

---

Markus Lippert

Quantenkorrekturen an magnetischen  
Domänenwänden auf Gitterstrukturen

---

Dissertation  
zur Erlangung des Grades  
„Doktor der Naturwissenschaften“  
am Fachbereich Physik der  
Johannes Gutenberg-Universität  
in Mainz

von **Markus Lippert**  
geboren in Hofheim am Taunus

Mainz, den 26.07.2004

Universität Mainz, Institut für Physik, 55099 Mainz



Pyramus: *Thou wall, O wall, O sweet and lovely wall,  
Show me thy chink, to blink through with mine eyne!*

— William Shakespeare

*A Midsummer Night's Dream*

III 1, 212f

*Für Karin, Marlis und Gerhard*



# Abstract

We have a new and actualized look at the one dimensional Heisenberg spin chain. As experimental techniques allow for the production of nanoscale particles or nanowires, measurement also improves and allows the examination of wall structures.

Most theories today are based on the continuum model, which leads to the wide field of micromagnetics. We choose a different approach to the calculation of wall shape.

We will start by including the discrete structure of matter into the well-known classical spin wall. There, one can find a structural phase transition between an 'Ising-type' and an extended wall. This leads to certain corrections to the continuum model.

The main part of our work will then focus on the quantum mechanical case. A method first published by Winter will allow us to rotate to a system of parallel spins. The Hamiltonian can be diagonalized in the  $1/S$  approximation, and we present the excitation modes of the classical solution, which extend and confirm earlier results.

A method to numerically diagonalize and minimize the quantum mechanical energy will then be presented, as well as the quantum mechanical corrections to the wall shape and the critical point. These are entirely new results.



# Zusammenfassung

Wir betrachten die eindimensionale Heisenberg-Spinkette aus einem neuen und aktuelleren Blickwinkel. Experimentelle Techniken der Herstellung und selbstverständlich auch experimentelle Meßmethoden erlauben nicht nur die Herstellung von Nanopartikeln und Nanodrähten, sondern gestatten es auch, Domänenwände in diesen Strukturen auszumessen.

Die meisten heute verwendeten Theorien und Simulationsmethoden haben ihre Grundlage im mikromagnetischen Kontinuumsmodell, daß schon über Jahrzehnte hinweg erforscht und erprobt ist. Wir stellen uns jedoch die Frage, ob die innere diskrete Struktur der Substrate und die quantenmechanischen Effekte bei der Genauigkeit heutiger Messungen in Betracht gezogen werden müssen. Dazu wählen wir einen anderen Ansatz.

Wir werden zunächst den wohlbekannteren klassischen Fall erweitern, indem wir die diskrete Struktur der Materie in unseren Berechnungen berücksichtigen. Man findet in diesem Formalismus einen strukturellen Phasenübergang zwischen einer Ising-artigen und einer ausgedehnten Wand. Das führt zu bestimmten Korrekturen im Vergleich zum Kontinuumsfall.

Der Hauptteil dieser Arbeit wird sich dann mit dem quantenmechanischen Fall beschäftigen. Wir rotieren das System zunächst mit einer Reihe lokaler Transformationen derart, daß alle Spins in die  $z$ -Richtung ausgerichtet sind. Im Rahmen einer  $1/S$ -Entwicklung läßt sich der erhaltene neue Hamilton-Operator diagonalisieren.

Setzt man hier die klassische Lösung ein, so erhält man Anregungsmoden in diesem Grenzfall. Unsere Resultate erweitern und bestätigen frühere Berechnungen.

Mit Hilfe der Numerik wird schließlich der Erwartungswert der Energie minimiert und somit die Form der Domänenwand im quantenmechanischen Fall berechnet. Hieraus ergeben sich auch bestimmte Korrekturen zum kritischen Verhalten des Systems. Diese Ergebnisse sind vollkommen neu.





# Inhaltsverzeichnis

<b>Abstract</b>	<b>1</b>
<b>Zusammenfassung</b>	<b>3</b>
<b>1 Domänenwände: Vergangenheit, Gegenwart und Zukunft</b>	<b>9</b>
1.1 Historische Einführung . . . . .	9
1.2 Magnetoelektronik . . . . .	11
1.3 Einordnung und Überblick dieser Arbeit . . . . .	11
<b>2 Experimentelle Grundlagen</b>	<b>13</b>
2.1 Eisen auf Wolfram(110) . . . . .	13
2.2 Messung der Wandenergie . . . . .	14
2.3 Die Messung der Wandbreite . . . . .	16
2.4 Mikroskopische Parameter . . . . .	17
<b>3 Klassische Domänenwände</b>	<b>19</b>
3.1 Eindimensionales XY-Modell mit verdrehten Randbedingungen . . . . .	20
3.2 Die Kontinuumsnäherung . . . . .	21
3.2.1 Herleitung der Kontinuumsnäherung . . . . .	21
3.2.2 Betrachtungen zur Entropie und zu Solitonen . . . . .	23
3.3 Analytische Berechnungen zum Verhalten an der Domänengrenze . . . . .	24
3.3.1 Der einfache Fall von vier Spins . . . . .	24
3.3.2 Landau-Theorie und Eigenwertmethoden . . . . .	25
3.3.3 Thermodynamischer Limes . . . . .	28
3.4 Numerische Methoden . . . . .	31
3.5 Korrekturen zum Kontinuumsmodell . . . . .	32
3.6 Die Dynamik einer Domänenwand . . . . .	34
3.6.1 Kontinuumsmodell und Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung . . . . .	34
3.6.2 Bewegung im Gittermodell . . . . .	38
<b>4 Quantenmechanische Beschreibung der eindimensionalen Spinkette</b>	<b>45</b>
4.1 System und Hamiltonoperator . . . . .	45
4.2 Die 1/S-Entwicklung . . . . .	47
4.2.1 Die Wintersche Drehung . . . . .	47
4.2.2 Die 1/S-Entwicklung . . . . .	48
4.2.3 Entkoppelte Matrixform des Hamilton-Operators . . . . .	49
4.2.4 Diagonalisierung und Bemerkungen . . . . .	51

4.3	Numerische Umsetzung . . . . .	53
<b>5</b>	<b>Magnonen im klassischen Grundzustand</b>	<b>55</b>
5.1	Ein erneuter Blick auf die Randspins . . . . .	55
5.1.1	Der thermodynamische Limes . . . . .	56
5.1.2	Endliche Systeme: Stabilisierung durch ein Magnetfeld? . . . . .	59
5.2	Analytische Lösung des 4-Spin-Problems . . . . .	60
5.2.1	Berechnung und Ergebnisse . . . . .	60
5.2.2	Das demagnetisierende Feld . . . . .	67
5.2.3	Die Domänenwand im Spiegel: Ein periodisches System . . . . .	71
5.3	Magnetische Anregungsmoden in großen Systemen . . . . .	73
5.3.1	Numerische Ergebnisse . . . . .	73
5.3.2	Lokalisierte Moden und Bandmoden . . . . .	74
5.4	Fluktuationskorrekturen zu Energie und Magnetisierung . . . . .	77
5.4.1	Korrekturen zum Erwartungswert der Magnetisierung . . . . .	77
5.4.2	Die Schwankungsquadrate der x und y-Komponenten . . . . .	81
5.4.3	Korrekturen zur Energie . . . . .	83
<b>6</b>	<b>Quantenmechanische Formkorrekturen der Domänenwand</b>	<b>87</b>
6.1	Gültigkeit der $1/S$ -Näherung . . . . .	87
6.1.1	Negative Eigenwerte in $M$ . . . . .	88
6.1.2	Negative Eigenwerte in $N$ . . . . .	89
6.2	Der quantenmechanische Grundzustand . . . . .	90
6.2.1	Korrekturen für feste Werte der Parameter . . . . .	90
6.2.2	Parameterabhängigkeit . . . . .	94
6.3	Quantenkritisches Verhalten . . . . .	98
6.4	Magnonen und Korrekturen . . . . .	102
6.4.1	Abweichung der Magnonenfrequenzen . . . . .	102
6.4.2	Abweichung der Energie . . . . .	105
6.5	Korrekturen zum Experiment . . . . .	106
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>109</b>
7.1	Was erreicht wurde. . . . .	109
7.2	. . . und ein Ausblick . . . . .	111
<b>A</b>	<b>Das Tight Binding Modell</b>	<b>113</b>
A.1	Lösung des Modells . . . . .	113
A.2	Anregungen der freien eindimensionalen Spinkette . . . . .	114
<b>B</b>	<b>Die Holstein-Primakoff-Transformation</b>	<b>117</b>
<b>C</b>	<b>Einblick in die numerischen Lösungen</b>	<b>119</b>
C.1	Die „klassische Klasse“ . . . . .	119
C.2	Die quantenmechanische Klasse . . . . .	122

<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>125</b>
<b>Danksagung</b>	<b>131</b>



# 1 Domänenwände: Vergangenheit, Gegenwart und Zukunft

Als im Jahre 1932 Bloch (Blo32) zum ersten Mal die Übergänge zwischen verschiedenen magnetischen Domänen betrachtete und dabei feststellte, daß diese Abgrenzungen in den meisten Fällen nicht scharf sein sollten, konnte noch niemand ahnen, daß diese Domänenwände eines Tages eine Rolle als Signalüberträger spielen könnten.

Diese Einleitung beginnt mit einer kurzen Skizze, welche Wegsteine es auf dem langen Pfad zu unserem heutigen Verständnis von Domänenwänden gibt. Dann soll ein Versuch gemacht werden, die interessanteste aktuelle Forschung auf diesem Gebiete darzustellen, wobei natürlich nicht alle Arbeiten Erwähnung finden können. Schließlich soll die vorliegende Dissertation in das Gesamtbild aktueller Forschung eingereiht werden.

## 1.1 Historische Einführung

Die Geschichte der ferromagnetischen Domänentheorie begann im Jahre 1907 mit der damals noch vollkommen unbewiesenen Aussage von Weiss (Wei07), daß der Ferromagnetismus durch ein extrem starkes Molekularfeld hervorgerufen sei. Damit auch die Meßergebnisse mit seiner Theorie vereinbar waren, postulierte er zudem, daß ferromagnetische Substanzen in Domänen verschiedener Magnetisierungsrichtung unterteilt waren. So abstrus diese beiden Postulate damals auch schienen, bilden sie tatsächlich den Grundstein für unser heutiges Verständnis dieses weitreichenden Gebietes.

Ein Meilenstein wurde erst wieder im Jahre 1935 durch Landau und Lifschitz (LL35) gesetzt, die die erste theoretische Vorhersage zur Struktur dieser Domänen, getrennt durch  $180^\circ$ -Wände und  $90^\circ$ -Wände zu den Randdomänen, machten. Dennoch, der erste, der sich mit den Grenzen zwischen den Domänen befaßte, war Bloch (Blo32). Nach ihm sind auch heute noch jene Wände benannt, deren Magnetisierung sich in der Wandebene dreht, siehe auch Abb. 1.1.

Da das Bohr-van Leeuwensche Theorem<sup>1</sup> eindeutig beweist, daß die Erklärung für magnetische Phänomene nicht durch rein klassische Elektronen gebildet werden kann, waren die ersten Ansätze zu genaueren Rechnungen aufwendige quantenmechanische Betrachtungen. Doch Anfang der 40er Jahre hatte Brown die Idee, eine kontinuierliche *mean field*-Approximation zu konstruieren, mit deren Hilfe man im klassischen Grenzfalle arbeiten kann. Die hieraus resultierende Theorie ist die Theorie des Mikromagne-

---

<sup>1</sup>Siehe zum Beispiel (Nol86a).

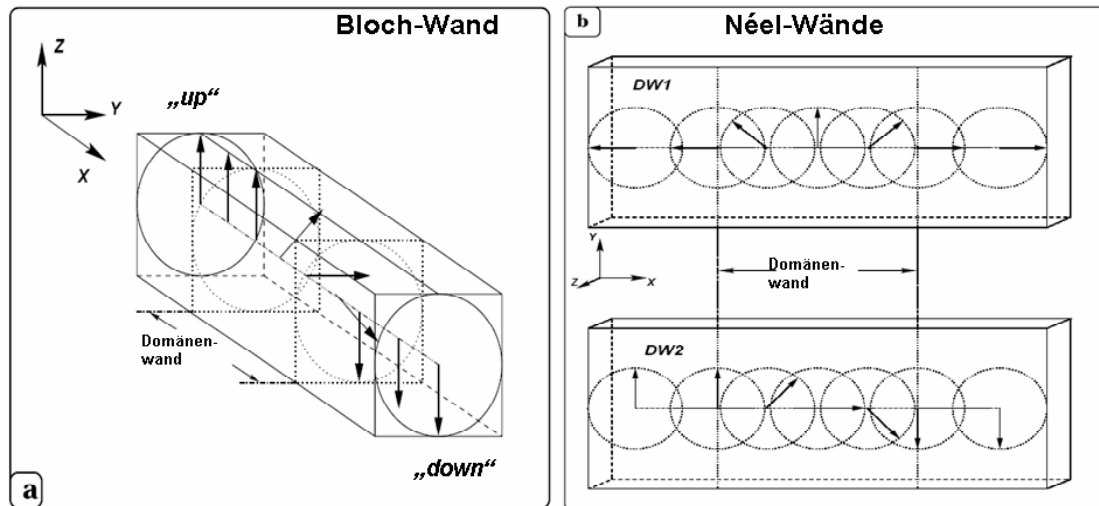


Abbildung 1.1: Zur Unterscheidung zwischen Bloch- und Néel-Wänden. Die Veränderung der Magnetisierung in einer Probe hängt stark von der Art derselben ab. In Teilbild a ist eine Bloch-Wand dargestellt, die in den bulk-Materialien verbreitet ist. Die Wandebenenormale fällt hier mit der Rotationsachse zusammen. Teilbild b zeigt eine Wand in einer dünnen Schicht, in denen die Rotationsachse senkrecht zur Schichtebene steht. Bild aus (Jon00).

tismus, die sich in den 50er und 60er Jahren als ein äußerst mächtiges und hilfreiches Werkzeug erwies, um Phänomene des Ferromagnetismus zu betrachten (Bro63; KG56). Die Domänenwände betreffend war der nächste wichtige Punkt auf unserer Zeitskala die Entdeckung der Tatsache, daß die spezifische Form einer Wand von den magnetostatischen Wechselwirkungen abhing. In ausgedehnten Materialien, wie durch die Bloch-Wand beschrieben und schon erwähnt, dreht sich die Magnetisierung in einer Ebene senkrecht zur Wandnormalen. Betrachtet man nun aber beispielsweise einen dünnen Film, so würde eine Drehung der Spins aus der Ebene heraus natürlich ein großes Streufeld an der Wandmitte erzeugen. Deshalb dreht die Magnetisierung in diesem Fall in der Schichtebene. Eine Darstellung beider Wandtypen sieht man in Abb. 1.1. Der Übergang zwischen beiden Wänden ist keineswegs kontinuierlich. Es tritt ein komplizierter Zwischenzustand, die sogenannte *cross-tie wall* auf. Diese Betrachtungen wurden von Néel (Née55) durchgeführt, weshalb eine Wand mit Drehung der Magnetisierung in der Wandebene auch heute noch als Néel-Wand bezeichnet wird.

Die Berechnungen im Rahmen der mikromagnetischen Theorie wiesen auch auf Wandstrukturen hin, die mehr als eindimensional sind, und gaben Abschätzungen über ihre Mobilität und Geschwindigkeit. Dennoch, nach den 60er Jahren wurde es recht ruhig um die Domänenwände. Erst kürzlich traten sie wieder in Erscheinung, in vollkommen neuem Lichte.

## 1.2 Magnetoelektronik

Wir leben in einem Zeitalter der Miniaturisierung. Doch unsere momentanen Computertechniken sind im Hinblick auf Taktfrequenzen und Speicherdichten nach oben beschränkt, so daß ein wichtiger Aspekt heutiger Forschung neue Technologie auf Nanometerniveau ist (Was03). Neben dem großen Forschungsgebiet der Quantencomputer und der Materialwissenschaft ist es auch der Magnetismus, der zunehmend weiteren Einzug in die Elektronik hält (Pri98).

Der Siegeszug der spinabhängigen Elektronik begann mit der Entdeckung des Riesenmagnetwiderstandes (*giant magneto resistance*, GMR) 1988 (BBF<sup>+</sup>88)<sup>2</sup>. Dieser Effekt fand mit größter Schnelligkeit seinen Weg in die freie Wirtschaft, vor allem für Speichervorgänge. Doch ist dieses Fachgebiet des spinpolarisierten Ladungstransports noch lange nicht am Ende angelangt.

Ein weiterer, sehr neuer Forschungsbereich, der für uns von Interesse sein wird, ist die sogenannte Spintronik. Die Idee hinter diesem Wort ist es, logische Schaltungen mit Hilfe von magnetischen Signalen herzustellen, die den elektronischen in nichts nachstehen und sogar eine größere Schnelligkeit erreichen. In diesem Bereich gibt es zweierlei Ansätze. Der erste Ansatz ist es, Ketten aus Makrospins zu erzeugen, indem man eine Reihe aus Nanopartikeln auf ein Substrat aufdampft, die so klein sind, daß es nur eine Domäne gibt. Diese können eine leichte Achse haben, also zwei Vorzugsrichtungen der Magnetisierung. Ein Signal in diesen Systemen ist dementsprechend ein Übergang von einer  $\uparrow$  zu einer  $\downarrow$ -Magnetisierung (CW00). Dies ist aber nichts anderes als – eine Domänenwand, nur in anderen Maßstäben.

Natürlich liegt es nahe, noch einen Schritt weiter zu gehen und Domänenwände in Nanodrähten zu beobachten. Diese Wand läßt sich entweder durch ein Magnetfeld bewegen oder, eine relativ neue Entdeckung, durch elektrische Ströme. Es gibt relativ viele aktuelle experimentelle Ergebnisse zu Geschwindigkeiten von Domänenwänden in Drähten, von denen hier als Beispiel die Arbeiten von Ono *et al.* (OMS<sup>+</sup>99) und Atkinson *et al.* (AAX<sup>+</sup>03) genannt seien. Jedoch gibt es auch eine Vielzahl theoretischer Ansätze, zum Beispiel durch mikromagnetische Simulationen (NTM03) oder analytische Ansätze (TK03; BM03). Ein Durchbruch in der Forschung ist sicherlich das erste ferromagnetische Sub-Mikrometer *NOT*-Schaltelement. Die erfolgreiche Vermessung gelang Allwood *et al.* (AXC<sup>+</sup>02) und wurde in vielerlei Medien, zum Beispiel als „Tor zur Nanologik“ (Physics Web), gelobt.

## 1.3 Einordnung und Überblick dieser Arbeit

Mit den immer kleiner werdenden Größenskalen im Bereich dieser Forschungsgebiete wird auch immer mehr die Frage laut, ob Quantenkorrekturen nicht doch beachtet

---

<sup>2</sup>Der GMR ist ein Effekt, der in einem Schichtsystem aus ferromagnetischen und nichtmagnetischen Lagen auftritt. Sind die Magnetisierungen der ferromagnetischen Lagen parallel, gibt es kaum Streuung der Ladungsträger aufgrund des Spins. Ist die Magnetisierung antiparallel, ist der Widerstand maximal.

werden müssen, und inwieweit der mikromagnetische Formalismus noch seine Gültigkeit behält. Dennoch – die meisten Rechnungen und Simulationen basieren weiterhin darauf. Herr Dipl.-Phys. Pratzner und Herr Prof. Dr. Elmers, Kollaborationspartner im Nanozentrum, haben 2001 in Kooperation mit einer Arbeitsgruppe in Hamburg Domänenwände sowohl energetisch als auch in ihren Dimensionen vermessen (PEB<sup>+</sup>01; PE03). Die Auswertung dieses Experimentes erfolgte über den mikromagnetischen Kontinuumsformalismus. Ein Gespräch über diskrete und quantenmechanische Korrekturen gab den Ausschlag für diese Arbeit.

Wir beginnen in Kapitel 2 mit der Beschreibung der wichtigsten Ergebnisse des Experimentes. In Kapitel 3 wiederholen und ergänzen wir die Analyse von klassischen Domänenwänden auf einem *diskreten* Gitter. Wir zeigen, daß es sowohl eine Isingartige und eine ausgedehnte Wand abhängig von den Wechselwirkungsparametern gibt, berechnen die daraus folgenden Korrekturen für das beschriebene Experiment und stellen im weiteren einige Betrachtungen über die Bewegung von Domänenwänden auf dem diskreten Gitter und ihr Peierls-Potential an, daß wir mit Hilfe einer relativ neuen numerischen Methode berechnen.

Danach wenden wir uns dem quantenmechanischen, diskreten Fall zu, indem wir in Kapitel 4 ein anisotropes Heisenberg-Modell in der  $1/S$ -Entwicklung betrachten und eine Methode zu dessen Lösung herleiten.

In Kapitel 5 nutzen wir diese Methode zunächst, um Fluktuationskorrekturen und Anregungsmoden im klassischen Grundzustand zu betrachten. Weiterhin führen wir die demagnetisierende Energie, also eine harte Achse, ein, um die Azimuthalsymmetrie zu brechen, die sonst eine Goldstone-Mode zur Folge hat. Wir bestätigen und erweitern auch frühere Resultate in unserer Betrachtung der Energie- und Magnetisierungskorrekturen aufgrund der Fluktuationen.

In Kapitel 6 werden wir vollkommen neue Ergebnisse zur Formkorrektur der Domänenwand aufgrund quantenmechanischer Fluktuationen präsentieren, sowie das quantenmechanische kritische Verhalten. Besonders interessant sind unsere Resultate für schmale Domänenwände. Abschließend wenden wir auch diese Ergebnisse an, um eine Korrektur für das Experiment abzuschätzen.

Wir beschließen diese Arbeit in Kapitel 7 mit der Zusammenfassung.



## 2 Experimentelle Grundlagen

Die grundlegende Motivation für diese Arbeit waren Experimente, die von Kollaborationspartnern der Gruppe TA5 des Nanozentrums in der Gruppe von Prof. Dr. Elmers gemeinsam mit einer Gruppe um Dr. Pietsch in Hamburg durchgeführt und ausgewertet wurden (PEB<sup>+</sup>01; PE03). Beide Teilerperimente bestimmten Kenngrößen von Domänenwänden. In Mainz wurde über die Messung des magneto-optischen Kerr-Effekts (MOKE)<sup>1</sup> die Suszeptibilität und unter Verwendung einiger Annahmen, die wir unten näher erläutern, daraus die Energie einer Wand bestimmt. In Hamburg gelang es unter Verwendung von Spin Polarized Scanning Tunneling Microscopy (SP-STM) Domänenwände auszumessen und somit direkt ihre Breite zu bestimmen. Beide Ergebnisse zusammen erlaubten es, im Rahmen der mikromagnetischen Theorie aus diesen beiden Resultaten die Wechselwirkungsparameter der Austauschwechselwirkung und der Anisotropie zu berechnen. Dennoch deuteten beide Ergebnisse auf extrem schmale Domänengrenzen hin. Dies wirft die Frage auf, ob der Kontinuumsansatz des Mikromagnetismus in diesen Bereichen noch gültig ist und konsequenterweise auch, ob Quanteneffekte eine Rolle spielen. Diese beiden Problemstellungen werden eine Art roter Faden durch die weiteren Kapitel dieser Arbeit sein.

### 2.1 Eisen auf Wolfram(110)

Beide Messungen fanden in verschiedenen UHV-Systemen statt. Die Präparation der Filme durch molekulare Strahlepitaxie geschah jedoch nach derselben Methode. Verwendet wurden vizinale Wolfram(110)-Oberflächen. Hierbei wächst das Eisen in einer Art, die man am besten als ein Fließen über die Stufen bezeichnen könnte. Es bilden sich also parallele Streifen, wobei hier eine Bedeckung größer als 1 gewählt wurde: Es gab also an den Stufenkanten eine Doppellage Eisen.

Warum wurde genau dieses System ausgesucht?

Die Eigenschaften dieses Systems werden seit einiger Zeit schon untersucht und sind recht gut bekannt. Hierzu sei besonders die Lektüre der Dissertationen von Hauschild und Pietsch empfohlen, (Hau98) und (Pie01). Die Kriterien zur Auswahl genau dieses Systems sind in zwei Punkten zusammenzufassen. Zum einen ist wohlbekannt, daß die einfache Lage Eisen auf *ebenem* Wolfram(110) im Rahmen des zweidimensionalen Ising-Modells beschrieben werden kann (EHG96). Die Ursache hierfür ist darin zu sehen, daß die Monolage eine extrem starke Anisotropie in der Ebene aufweist. In der

---

<sup>1</sup>Unter dem magneto-optischen Kerr-Effekt versteht man die Änderung der Polarisation polarisierten Lichtes durch die Reflexion an magnetischen Materialien, hervorgerufen durch die Magnetisierung. Näheres z.B. in (Hau98).

gestuften Geometrie jedoch zeigten Monte-Carlo-Simulationen der Gruppe Binder ein quasi-eindimensionales Verhalten (ABHP89; MP93). Dies macht das System zu einem perfekten Kandidaten zur Messung niedrigdimensionaler Effekte.

Zum anderen zeigt dieses System die Eigenschaft, daß die einzelnen Streifen nicht mehr über Austauschwechselwirkung Einfluß aufeinander ausüben, sondern durch das Dipolfeld. Hierzu gab es in der Folge auch eine neuere Arbeit von Pratzer und Elmers (PE02) für Bedeckungen kleiner als 1, also partielle Monolagen. Was geschieht jedoch in Anwesenheit einer Doppellage? Der überraschende Effekt, der hier auftritt, ist eine starke Anisotropie lotrecht zur Ebene (Pie01). Betrachten wir hierzu Abb. 2.1, in der

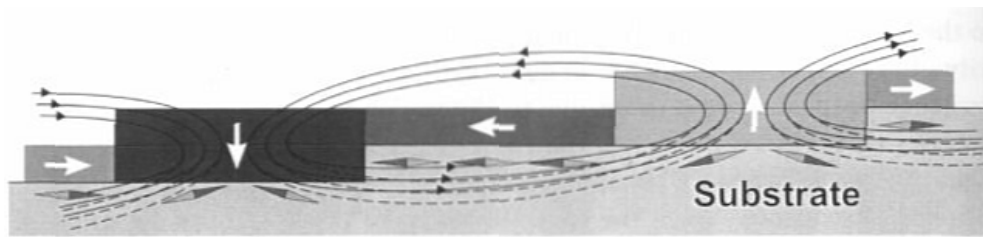


Abbildung 2.1: Schema der Mono- und Doppellagen Eisen auf Wolfram und Erklärungsmöglichkeit der antiferromagnetischen Kopplung, nach O. Pietsch. Das Substrat ist Wolfram(110), an den verschiedenen Dicken erkennt man die Eisenmono- und -doppellagen. Am Übergang zwischen den Elementen gibt es eine magnetisch polarisierte Schicht, die die Symmetrie des Streufeldes der Doppellage bricht. Die gestrichelten Kurven deuten das ungestörte Feld an, die durchgezogenen das verzerrte. Dieser Mechanismus beeinflusst dann die Vorzugsrichtung der Monolagenmagnetisierung.

das System schematisch dargestellt ist, inklusive einer möglichen Erklärung der Kopplung durch die Streufelder. Hierbei nimmt man an, daß die oberste Wolframlage durch das Streufeld polarisiert wird und dadurch das Feld verzerrt. Diese Vermutung wird durch Untersuchungen von Hong *et al.* unterstützt (HFF88). Die verschiedenen Streifen koppeln offenbar - im Gegensatz zu den Monolagen, die ferromagnetisch koppeln - antiferromagnetisch aneinander. Diese Kopplung ist es, die den Ferromagnetismus der einzelnen Streifen stabilisiert und somit trotz der niedrigen Dimensionalität eine recht hohe *mean field* Curie-Temperatur der einzelnen ferromagnetischen Lagen erzeugt.

## 2.2 Messung der Wandenergie

Mit Hilfe der MOKE-Messungen kann man Magnetisierungskurven bestimmen, im Falle eines paramagnetischen Verhaltens also auch die Suszeptibilität als Steigung der Magnetisierungskurve. Wie aber kann man aus der Suszeptibilität die Energie einer Domänenwand bestimmen? Im eindimensionalen Isingmodell ist die Suszeptibilität

durch ein Arrhenius-Gesetz<sup>2</sup>, nämlich

$$k_B T \chi \propto \exp(2J/k_B T)$$

gegeben. An dieser Stelle muß nochmals hervorgehoben werden, daß gerade dieses exponentielle Verhalten typisch für eindimensionale Systeme ist. Für höherdimensionale Systeme würde man ein Potenzgesetz erwarten.

Die Energie  $4J$  ist genau die Energie, die im Ising-Modell benötigt wird, um einen Spinblock in der anderen Magnetisierungsrichtung zu erzeugen (sozusagen die Erzeugung eines Domänenwandpaares). Ein ähnliches Gesetz kann für  $W$  Atomreihen bestimmt werden, solange die Temperatur kleiner als die Curie-Temperatur  $T_C$  des zweidimensionalen Systems ist. Albano *et al.* (ABHP89) zeigten in einem solchen Falle folgendes Gesetz für die Suszeptibilität:

$$k_B T \chi \propto |\varepsilon|^{2\beta} \exp(2JW/k_B T), \quad (2.1)$$

wo  $\varepsilon = (T - T_C)/T_C$  die reduzierte Temperatur ist und  $\beta$  der kritische Exponent des zweidimensionalen Ising-Modells. Der temperaturabhängige Vorfaktor spiegelt die Tatsache wieder, daß aufgrund der endlichen Temperatur durchaus Spinfluktuationen auftreten können, die die Gesamtmagnetisierung herabsetzen. Gl. (2.1) wurde in Monte Carlo-Untersuchungen von Sen *et al.* bestätigt (SSG97).

In einer kruden Näherung kann man nun annehmen, daß eine schmale Domänenwand demselben Gesetz folgt, wobei  $2J$  durch die Energie der Wand  $e_W$  ersetzt werden muß. Definiert man also eine effektive Suszeptibilität via

$$\chi^* \propto \chi \frac{k_B T}{|\varepsilon|^{2\beta}} \propto \exp(e_W/k_B T),$$

so kann man anhand der Steigung in einem Arrhenius-Plot die Energie der Wand bestimmen. Bei welchen Temperaturen läßt sich aber die Messung durchführen? Die obere Schranke ist klar durch die Curie-Temperatur des zweidimensionalen Systems ( $T_C = 226$  K) gegeben, denn oberhalb dieser sind die Spinfluktuationen zu stark. Hier haben wir jedoch ein quasi-eindimensionales System vorliegen. Quasi-eindimensional bedeutet in diesem Falle, daß dessen kritische Temperatur nicht bei Null liegt, da, wie schon oben erwähnt, Streufeldeffekte den Ferromagnetismus fördern. Es tritt also eine *mean field* kritische Temperatur (HEG98) auf, die von der Streifenbreite abhängt und etwa im Bereich von 160-180K liegt. Die Messung der Suszeptibilität ist über die Magnetisierungskurve nur in dem paramagnetischen Bereich möglich, der von diesen beiden kritischen Temperaturen eingeschlossen wird. Dies ist durchaus sinnvoll, denn auch wenn die mittlere Magnetisierung der Probe ohne angelegtes Feld null ist, gibt es trotzdem klar abgegrenzte Spinblöcke der beiden einfachen Richtungen, die das quasi-eindimensionale Verhalten zeigen. Die Ergebnisse der Messung sind in Abb. 2.2 zu sehen. Man erkennt deutlich das erwartete lineare Verhalten. Die durchschnittliche

---

<sup>2</sup>Ursprünglich bezeichnete dieses Wort nur das Gesetz der Geschwindigkeit von chemischen Reaktionen, wird aber heute von Physikern sehr gerne allgemein für Exponentialgesetze genutzt.

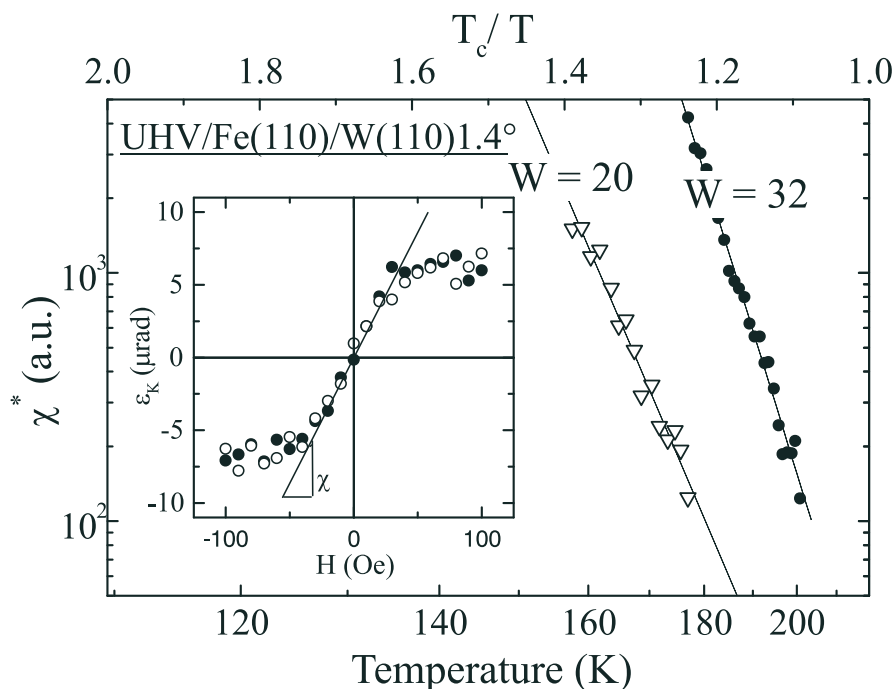


Abbildung 2.2: Die effektive Suszeptibilität für durchschnittliche Streifenbreiten von  $W=20$  und  $W=32$  Atomreihen, gemessen von Pratzner et al. Die eingesetzte Magnetisierungskurve zeigt die Bestimmung der Suszeptibilität.

Wandenergie wurde zu  $e_W/W = 15.4 \pm 1.4$  meV bestimmt.

Wir müssen jedoch schon an dieser Stelle im Hinterkopf behalten, daß das Ising-Modell für die Messung einer ausgedehnten Domänenwand ein recht ungenaues Werkzeug darstellen könnte, betrachten wir weiterhin den Fakt, daß die spätere Datenauswertung über ein Kontinuumsmodell erfolgt. Auch ist noch ungeklärt, inwiefern die Tatsache, daß bei solch hohen Temperaturen oberhalb der Curie-Temperatur im *mean field*-Modell gemessen wurde, eine Fehlerquelle darstellt. Das beste Argument für die Richtigkeit der Betrachtung sind jedoch die Messungen der Breite, die die Annahme einer schmalen Domänenwand bestätigen, die man auch schon durch die Nähe des Wertes von  $e_W$  an  $2J$  vermuten konnte.

## 2.3 Die Messung der Wandbreite

Mit Hilfe von SP-STM, welche eine Auflösung bis auf atomares Niveau bietet, konnte die Domänenwand vermessen werden. Diese Messungen wurden bei etwa 4 K durchgeführt. Da die Monolagenstreifen in der Ebene magnetisiert sind, wurde eine Spitze gewählt, die nur auf solche Komponenten anspricht. Da, wie schon erwähnt, die einfache Richtung der Magnetisierung in der Doppellage aus der Ebene herausweist, sollte man die verschiedenen Domänen nicht unterscheiden können, wohl aber ein Signal im

Bereich der Wand aufnehmen können. Die Ergebnisse sieht man in Abb. 2.3. Im Teilbild (a) sieht man die Topographie der Streifen, Teilbild (b) ist spinaufgelöst. Die Tendenz zu antiferromagnetischer Kopplung zwischen Monolagen ist deutlich zu erkennen. In der Vergrößerung erkennt man die Mono- und Doppellagendomänenwände. Diese wurden dann wie in Teilbild (c) an die Form einer Domänenwand im Kontinuumsmodell angefügt. Die Wandbreite im Fall der Monolage von  $0.6 \pm 0.2$  nm deutet wiederum auf eine Änderung der Magnetisierung im Bereich weniger atomarer Abstände hin. Es soll an dieser Stelle jedoch auch angemerkt werden, daß diese Breite als eine obere Grenze gesehen werden muß, da sie im Bereich der Auflösung des Mikroskopes liegt. Die Wände in der Doppellage sind deutlich breiter.

## 2.4 Mikroskopische Parameter

Die Wechselwirkungsparameter wurden über das Kontinuumsmodell berechnet. Genaueres zur Berechnung und zu den Ergebnissen findet der geneigte Leser im nächsten Kapitel. Festzuhalten bleibt an dieser Stelle jedoch, daß - wie von den Experimentatoren selbst angemerkt - der Einsatz des mikromagnetischen Kontinuumsmodells mehr als fraglich scheint. Doch lassen sich die Ergebnisse, die mittels dieser Methode gewonnen wurden, vielleicht aufgrund einer diskreten Rechnung eindeutig korrigieren? Traun, fürwahr. Diesem Aspekt wollen wir uns als nächstes zuwenden.

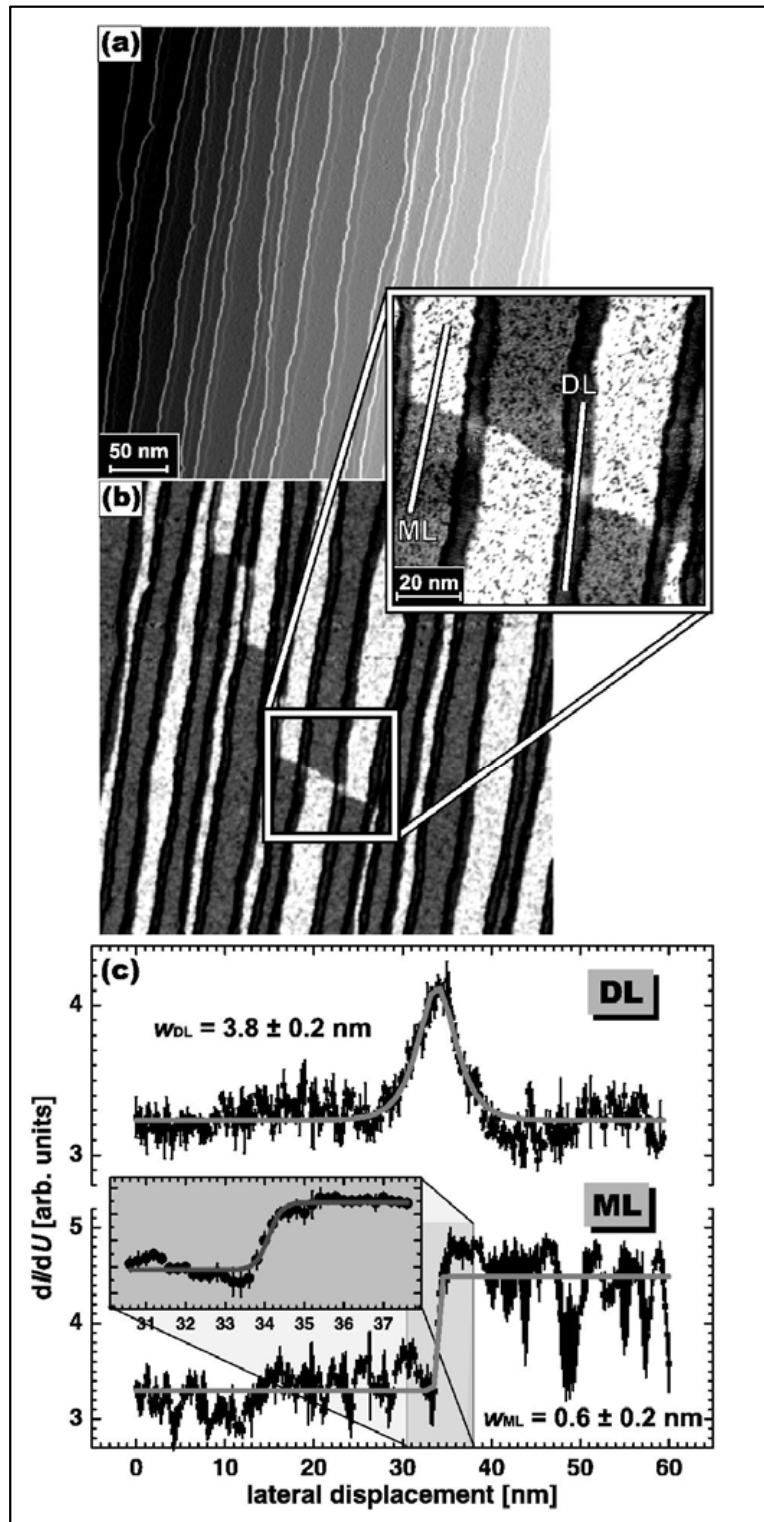


Abbildung 2.3: Topographische (a) und spinaufgelöste (b) Aufnahme der in-plane Spinausrichtungen von 1.25 Lagen Fe auf W(110). Man erkennt mehrere Domänenwände sowohl im Monolagen- als auch im Doppellagenbereich.

### 3 Klassische Domänenwände und der Effekt der diskreten Struktur der Materie

Zunächst wollen wir uns mit der Beschreibung der Domänenwände ohne Einfluß quantenmechanischer Effekte befassen. Wir verwenden hierfür ein klassisches Heisenberg-Modell mit einer einfachen Achse, also einer Anisotropie, dessen Randbedingungen zwei entgegengesetzt entlang dieser Anisotropie ausgerichtete Spins sind. Nachdem wir dieses Modell vorgestellt haben, gehört dazu zunächst natürlich eine kurze Einführung in die mikromagnetische Kontinuumstheorie, deren wichtigste Ergebnisse, die auch zur Auswertung des im vorherigen Kapitel beschriebenen Experimentes verwendet wurden, wir kurz herleiten. Dies geschieht im zweiten Unterabschnitt dieses Kapitels. Dann wollen wir uns die Frage stellen, welche Einflüsse die diskrete Struktur der Materie auf die Form der Domänenwand hat. Wir werden mit Hilfe von Landau-Theorie feststellen, daß es einen Phasenübergang zwischen einer Ising-artigen Wand und einer ausgedehnten Wand gibt sowie grundlegende Ergebnisse herleiten. Dieser Übergang ist im allgemeinen schon bekannt (NAFL78; ASB76), soll hier aber ausführlich untersucht werden.

Abschließend wenden wir diese Ergebnisse mit Hilfe einer numerischen Simulation direkt an, um quantitative Korrekturen zu den mit Hilfe des Kontinuumsmodells berechneten Wechselwirkungsgrößen herzuleiten.

Die Berechnungen in diesem Kapitel und den folgenden werden alle beim absoluten Nullpunkt durchgeführt. Dies ist in Übereinstimmung mit dem Experiment. Messungen und auch theoretische Betrachtungen haben gezeigt, daß die typische Energieskala der Wechselwirkungsparameter im Bereich von meV oder einigen 10 meV liegen, was einer Temperatur von etwas 50-100K entspricht. Die meisten Experimente messen weit unterhalb dieser Temperatur, so daß diese Näherung sicher gerechtfertigt ist.

An dieser Stelle ist jedoch auch die Frage berechtigt, ob es denn Ordnung oberhalb des absoluten Nullpunktes noch geben könnte, zeigen doch alle bisherigen Untersuchungen, daß dies nicht möglich sei (Quantenmechanisch entspricht dieser Aussage das Theorem von Mermin und Wagner). Wir betrachten hier jedoch *quasi*-eindimensionale Systeme; eigentlich ist das System natürlich zwei- oder gar dreidimensional. Wir werden darauf zu einem späteren Zeitpunkt zurückkommen.

### 3.1 Eindimensionales XY-Modell mit verdrehten Randbedingungen

Wir betrachten eine lineare (eindimensionale) Spinkette mit  $n$  Spins, welche in zwei betrachteten Dimensionen jede beliebige Einstellung einnehmen können sollen, also ein XY-Modell.

Die dritte Dimension im Spinraum kann vernachlässigt werden. Bloch-Wände wie auch Néel-Wände (wie dargestellt in Abb. 3.1) sowie alle Zwischenzustände, in denen alle Vektoren der magnetischen Momente in parallelen Ebenen liegen, sind offensichtlich Grundzustände gleicher Energie<sup>1</sup>. Wird ein Spin aus dieser Ebene ausgelenkt, entsteht eine Torsionsenergie, also ein angeregter Zustand. Es ist vollkommen hinreichend, *einen* dieser Zustände zu betrachten.

Als Randbedingung sei gegeben, daß der erste und letzte Spin (1 und  $n$ ) der Kette unbeweglich in Richtung der Anisotropie orientiert seien, beide allerdings um  $\pi$  verschoben. Im folgenden seien  $\phi_i, i \in \{1, \dots, n\}$  die Winkel der Spins,  $\pm \frac{\pi}{2}$  sei die Anisotropierichtung. Somit seien als Randbedingungen gegeben:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \frac{\pi}{2} \\ \phi_n &= -\frac{\pi}{2}. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Eine Darstellung unseres Modells ist auch in Abbildung 3.1 zu sehen. Unseren Berech-

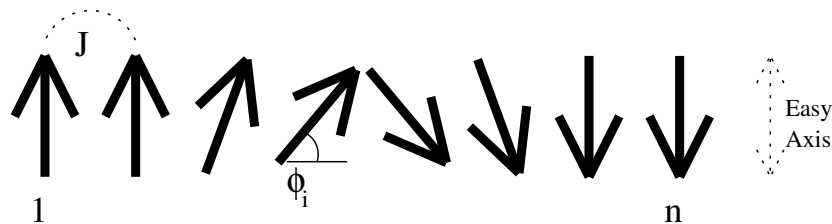


Abbildung 3.1: Lineare Spinkette mit Randbedingung (3.1)

nungen liegt folgende Hamiltonfunktion zugrunde:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - K \sum_{i=1}^n \sin^2 \phi_i \\ &= -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) - K \sum_{i=1}^n \sin^2 \phi_i. \end{aligned} \tag{3.2}$$

Hierbei stellt  $J$  die Skala der Nächster-Nachbar-Wechselwirkung (Heisenberg-Wechselwirkung) dar,  $K$  die der Anisotropie,  $\langle ij \rangle$  bedeutet einfach zählende Summierung nur über nächste Nachbarn,  $\mathbf{S}_i$  sei der Richtungsvektor des  $i$ -ten Spins.

Wir betrachten nun, welche Arten von Domänenwänden in einem solchen System auftreten können.

<sup>1</sup>Das liegt daran, daß wir keine harte Achse definiert haben. Wir werden diesen Punkt in unserer Diskussion der quantenmechanischen Effekte wieder aufgreifen.



## 3.2 Die Kontinuumsnäherung

Die Kontinuumsnäherung ist Teil des großen Rahmens des mikromagnetischen Formalismus zur Beschreibung von Domänenstrukturen. Wir werden uns in dieser Betrachtung auf das eben definierte System beschränken und verweisen für weitergehende Informationen auf die Standardwerke (Bro63) und (HS98).

### 3.2.1 Herleitung der Kontinuumsnäherung

Für große  $n$  und hinreichend großes  $\kappa = J/K$  können wir eine (ausgedehnte) Domänenwand voraussetzen. Dann können wir auch annehmen, daß die  $\Delta\phi = \phi_i - \phi_j$  kleine Größen sind. Wir betrachten nun daher folgende Kontinuumsnäherung

$$\begin{aligned} W_{ij} &= -J \cos(\phi_i - \phi_j) \approx -J \left(1 - \frac{\Delta\phi^2}{2}\right) \\ \{\phi_i\} &\rightarrow \phi(x) \\ (\Delta\phi)^2 &\rightarrow a^2(\phi')^2 \\ \sum_i &\rightarrow \frac{1}{a} \int dx. \end{aligned}$$

Hierbei soll  $W_{ij}$  für die Wechselwirkung zweier benachbarter Spins stehen, und  $a$  ist die Gitterkonstante, also der Abstand zwischen zwei Spins im Ortsraum.  $L$  sei im folgenden die Ausdehnung des Systems,  $x$  die kontinuierliche Variable, die die Position innerhalb der Kette angibt und somit den Index  $i$  ersetzt. Also wird nun die Energie (vgl. (3.2))

$$E = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \left\{ \frac{aJ}{2} (\phi')^2 - K \frac{\sin^2[\phi(x)]}{a} \right\} dx = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(\phi, \phi') dx. \quad (3.3)$$

Dabei haben wir zum einen den konstanten (von  $\phi$  und  $x$  unabhängigen) Term in  $W_{ij}$  hier vernachlässigt, da man den Energienullpunkt beliebig legen kann. Weiterhin wurde die Funktion

$$f(\phi, \phi') = \frac{aJ}{2} (\phi')^2 - K \frac{\sin^2[\phi(x)]}{a}$$

definiert. An dieser Stelle ist es sinnvoll, die allgemein benutzten Materialparameter einzuführen:

$$A = \frac{J}{2a_{nm}} = \frac{J}{2a} \quad \text{und} \quad e_K = \frac{K}{V} = \frac{K}{a^3}.$$

$V$  ist hierbei das Volumen, welches ein Atom in einer Diskretisierung einnehmen kann. Es sei hierbei darauf hingewiesen, daß  $V = a^3$  normalerweise nur im sc-Gitter gilt, und der nächste-Nachbar-Abstand  $a_{nm}$  auch nur in diesem Falle einfach gleich  $a$  ist. In unserem eindimensionalen Falle sind diese Annahmen jedoch trivial richtig. Es ergibt sich

$$E = a^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} (A\phi'^2 - e_K \sin^2 \phi(x)) dx = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} f(\phi, \phi') dx. \quad (3.4)$$

Gleichung (3.4) mit den Randbedingungen  $\phi(-\frac{L}{2}) = \frac{\pi}{2}$  und  $\phi(\frac{L}{2}) = -\frac{\pi}{2}$  stellt aber ein klassisches Variationsproblem dar (wir suchen das Minimum der Energie), dessen Lösungen durch die Euler-Gleichung

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \phi'} = 0,$$

gegeben werden, in unserem Fall also

$$\phi'' + \omega \sin \phi \cos \phi = 0, \quad (3.5)$$

wobei wir  $\omega = \frac{e_k}{A} = \frac{2K}{a^2 J}$  eingeführt haben. Im folgenden werden wir diese für den Fall des thermodynamischen Limes, also  $L \rightarrow \infty$  auswerten.

Gleichung (3.5) läßt sich durch Multiplikation mit  $\phi'$  lösen

$$\begin{aligned} \phi' \phi'' &= -\omega \sin \phi \cos \phi \phi' \\ \phi'^2 &= \omega \cos^2 \phi, \end{aligned}$$

wobei wir in der unteren Zeile die Randbedingungen genutzt haben<sup>2</sup>. Der Wert des verbleibenden Integrals liefert im Limes  $L \rightarrow \infty$

$$\phi(x) = 2 \arctan e^{-\sqrt{\omega}(x-x_0)} - \frac{\pi}{2}. \quad (3.6)$$

Dabei können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $x_0 = 0$  setzen, also die Mitte der Domänenwand in den Ursprung legen. Einen Plot dieses Verlaufs sehen wir in Abb. 3.2. Eine mögliche Definition der Breite der Domänenwand und vermutlich die naheliegendste Wahl ist sicher die folgende:

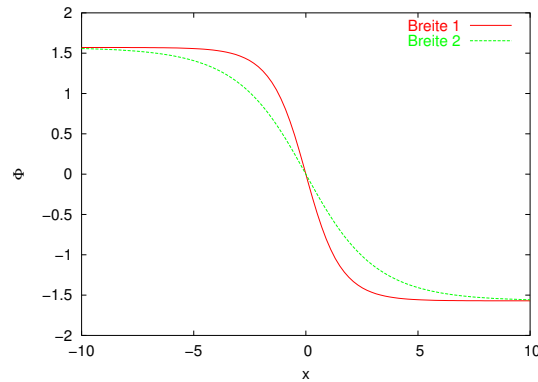


Abbildung 3.2: Verlauf der Domänenwand in der Kontinuumsnäherung (3.6)

$$b = \frac{1}{\sqrt{\omega}} = \sqrt{\frac{A}{e_k}} = a \sqrt{\frac{J}{2K}}. \quad (3.7)$$

<sup>2</sup>Da  $\phi(\pm\infty) = \mp \frac{\pi}{2}$  ist  $\phi'(\pm\infty) = 0$ .

Nun wollen wir uns noch der Energie der Domänenwand widmen. Setzen wir (3.6) in (3.4) ein, so sehen wir sofort, daß der  $\sin^2$ -Term eine Divergenz liefern würde. Da wir aber Konstanten addieren dürfen, fügen wir im Integranden  $e_K$  hinzu und haben daher folgendes Integral zu lösen:

$$E_{DW} = a^2 \int_{-\infty}^{\infty} (A\phi'^2(x) + e_K \cos^2 \phi(x)) dx .$$

Dieses Integral ist durch geeignete Relationen der trigonometrischen Funktionen auf das recht simpel zu lösende Integral

$$E_{DW} = a^2 e_K \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{8e^{-2\sqrt{\omega}x}}{(1 + 2e^{-2\sqrt{\omega}x})^2}$$

zurückzuführen, dessen Lösung

$$E_{DW} = 4a^2 \sqrt{e_K \cdot A} \tag{3.8}$$

ist.

### 3.2.2 Betrachtungen zur Entropie und zu Solitonen

Zunächst wollen wir uns die Frage stellen, ob es Solitonlösungen<sup>3</sup> bei  $T=0$  geben kann. Diese Frage ist recht leicht mit nein zu beantworten, wenn wir beachten, daß die Differentialgleichung (3.5) auch die des Fadenpendels ist. Dabei wäre allerdings der Auslenkungswinkel des Fadenpendels  $\alpha = 2\phi$ , so daß unsere Domänenwandlösung dem Fall entspräche, daß man ein Pendel bei  $\alpha = \pi$ , also oben, losläßt und es nach unendlicher Zeit (die bei unserer Wand dann  $x$  entspricht) wieder oben ankommt. Damit wird schon offensichtlich, daß es keine Lösung geben kann, die sozusagen zwei mal umschwingt - und dabei ggf. nicht einmal die Lage  $2\pi$  erreicht.

Eine andere Frage, die sich ergibt, ist die nach Temperaturen oberhalb des absoluten Nullpunkts. Langreichweitige Ordnung kann es, wie in der Einleitung diskutiert, nicht geben, so daß es möglich ist, daß neue Paare von Domänenwänden entstehen. Die Frage, die wir uns stellen wollen, ist die nach der Domänenwanddichte. Es sei nun also ein endliches System gegeben. Die Länge des Systems sei  $L$  und die Breite einer Domänenwand sei  $d$ . Dann kann es maximal  $\frac{L}{d} = N_0$  Domänenwände geben. Des weiteren sei  $E_{DW}$  wie in (3.8) die Energie einer Wand. Dann ist die freie Energie des Systems gegeben durch

$$F = N_W E_{DW} - TS(N_W) .$$

<sup>3</sup>Damit meine ich hier folgendes: Ein Konstrukt, daß durch Überlagerung zweier gegenläufiger Domänenwände entsteht, also eine Überlagerung von Domänenwänden, die eine Störung darstellt, die das System wieder in die selbe Orientierung zurückführt.

$N_W$  sei die Anzahl der Wände. Nach Statistik gibt es nun  $\binom{N_0}{N_W}$  Möglichkeiten, diese unterzubringen. Daher ergibt sich für die Entropie (im statistischen Sinne)

$$S = \ln \binom{N_0}{N_W} = \ln \left( \frac{N_0!}{N_W!(N_0 - N_W)!} \right).$$

Für große  $N_W, N_0$  können wir mit der Formel von Stirling entwickeln und das Minimum der freien Energie berechnen

$$N_{extr} = N_0 \frac{1}{e^{\frac{E_{DW}}{T}} + 1}. \quad (3.9)$$

Die Form einer Fermi-Dirac-Statistik mag irreführend sein. Doch ruft man sich ins Gedächtnis, daß unsere Annahmen nur für extrem niedrige Temperaturen gelten, so ist die 1 im Nenner vernachlässigbar, wir erhalten eine Boltzmann-Verteilung.

Dieses Modell ist stark vereinfacht, da sich Domänenwände auch überlagern können, es also nicht eine bestimmte Anzahl festgelegter Plätze geben kann. Dennoch wollen wir an dieser Stelle unsere Betrachtung des Kontinuummodells verlassen, da die Temperatur in unseren Betrachtungen weiterhin nur eine untergeordnete Rolle spielen wird.

### 3.3 Analytische Berechnungen zum Verhalten an der Domänengrenze

Obwohl der Effekt eines strukturellen Phasenübergangs bezüglich Domänenwänden wohlbekannt ist, existierten doch kaum analytische Abhandlungen über dessen Eigenschaften. Diese Lücke soll dieser Abschnitt nun füllen.

#### 3.3.1 Der einfache Fall von vier Spins: Hinweise auf einen Phasenübergang

Wie wir schnell aus den Randbedingungen erkennen, gibt es in jedem System, daß  $n$  Spins enthält, nur  $n-2$  freie Variablen. Auf unserer Suche nach dem Grundzustand sind weiterhin also nur folgende Anteile der Energie der Spinkette relevant, da sie von den veränderlichen Winkeln abhängen:

$$E(\phi_2, \phi_3) = -J \left( \cos\left(\frac{\pi}{2} - \phi_2\right) + \cos(\phi_2 - \phi_3) + \cos\left(\frac{\pi}{2} + \phi_3\right) \right) - K(\sin^2 \phi_2 + \sin^2 \phi_3). \quad (3.10)$$

Das Problem ist symmetrisch in der Art, daß  $\phi_3 = -\phi_2$  gilt. Dies läßt sich leicht zeigen, wenn wir den Gradienten von (3.10) betrachten

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \phi_2} &= -J(\cos \phi_2 - \sin(\phi_2 - \phi_3)) - 2K \sin \phi_2 \cos \phi_2 \\ \frac{\partial E}{\partial \phi_3} &= -J(-\cos \phi_3 + \sin(\phi_2 - \phi_3)) - 2K \sin \phi_3 \cos \phi_3. \end{aligned}$$

Dieser soll Null sein. Addieren wir nun die beiden Gleichungen, erhalten wir

$$0 = J(\cos \phi_2 - \cos \phi_3) + 2K(\sin \phi_2 \cos \phi_2 + \sin \phi_3 \cos \phi_3)$$

Die Gleichung hat die symmetrische Lösung  $\phi_3 = -\phi_2$ , welche auch die niedrigste Energie aufweist. Diese Symmetrie führt an vielen Stellen zu einer erheblichen Vereinfachung der Gleichungen, so daß sie auch im weiteren als gültig angenommen wird. Die Energie soll immer in Einheiten von  $K$  betrachtet werden, wobei wir hier wie auch im folgenden

$$\kappa = \frac{J}{K} \tag{3.11}$$

einführen werden. Dies führt uns zu folgender Form nach (3.10):

$$E_4(\phi_2) = \frac{E(\phi_2, -\phi_2)}{K} = -\kappa(2 \cos(\frac{\pi}{2} - \phi_2) + \cos(2\phi_2)) - 2 \sin^2 \phi_2 .$$

Leiten wir die Energie nun nach  $\phi_2$  ab und nutzen wir trigonometrische Relationen, so finden wir zunächst die Lösung

$$\cos \phi_2 = 0 ,$$

woraus ein Extremum für  $\phi_2 = \pm \frac{\pi}{2}$  folgt. Es bleiben weiterhin Terme zu berechnen, die uns zu einer Gleichung der Form

$$\sin \phi_2 = \frac{\kappa}{2(\kappa - 1)}$$

führen. Betrachten wir nun die zweite Ableitung der Energie, so finden wir, daß das einzige Minimum für  $\kappa > 2$  durch  $\frac{\kappa}{2(\kappa-1)}$  gegeben ist. Bemerkenswert ist auch, daß dieser Ausdruck für  $\kappa < 2$  größer als 1 wird, d.h., das Extremum „rutscht“ in den Bereich der komplexen Zahlen. Das hat zur Folge, daß als Lösung nur  $\cos \phi_2 = 0$  bleibt: Alle Spins zeigen entlang der Anisotropierichtung.

Hierbei stellen wir fest, daß das Minimum bei  $\frac{\kappa}{2(\kappa-1)}$  sich oberhalb von  $\kappa = 2$  kontinuierlich ausbildet, das bedeutet, die Winkel weichen mit steigendem  $\kappa$  kontinuierlich von der Anisotropierichtung ab. Offenbar haben wir es mit einem Phasenübergangsphänomen zu tun, was wir im folgenden Abschnitt näher beleuchten wollen.

### 3.3.2 Landau-Theorie und Eigenwertmethoden für gerade Anzahlen von Spins

Der vorhergehende Abschnitt wie auch die Numerik, Abschnitt 3.4 legen nahe, daß zumindest für gerade Spinzahlen  $n$  ein kontinuierlicher Übergang von einer „Domänenwandphase“ in eine „Ising-Phase“ (alle Spins zeigen entlang der Anisotropierichtung<sup>4</sup>)

<sup>4</sup>Wir nennen diese Phase hier „Ising-Phase“, da die Wand dann auch die einzig mögliche Art einer Domänengrenze in einem Ising-Modell ist.

stattfindet, also ein Phasenübergang 2. Ordnung<sup>5</sup>. Als Ordnungsparameter bieten sich hier die Abweichungen der Winkel von  $\frac{\pi}{2}$  an, also  $\frac{\pi}{2} - \phi_i$ , da sich diese Werte bei dem kritischen Wert  $\kappa_{c,n}$  von Null kontinuierlich erhöhen, sobald  $\kappa > \kappa_{c,n}$ .

Wir betrachten eine gerade Anzahl von Spins, da sich durch die schon erwähnte Symmetrie die Gleichungen stark vereinfachen. In den numerischen Betrachtungen zeigt sich, daß ungerade Systemgrößen kein abweichendes Verhalten zeigen.

Wir wollen den Phasenübergang nun mit Hilfe der Landau-Theorie weiter untersuchen, wobei wir weiterhin von der Symmetrie des Systems ausgehen wollen, also  $\frac{n-2}{2}$  un-abhängige Variablen betrachten.

**n=4**

Wir nutzen hier die Energie  $E_4$ , in Einheiten von K und in Termen des Ordnungsparameters  $\phi'_2 = \frac{\pi}{2} - \phi_2$ :

$$E_4(\phi'_2) = -\kappa(2\cos(\phi'_2) - \cos(2\phi'_2)) - 2\cos^2\phi'_2$$

Nach Bildung der Ableitungen stellen wir fest, daß tatsächlich bei  $\phi'_2 = 0$  die ungeraden Ableitungen verschwinden, so daß wir  $E_4$  in geraden Potenzen des Ordnungsparameters entwickeln können.

$$E_4(\phi'_2) = -(\kappa + 2) + (2 - \kappa)\phi'^2_2 + \frac{1}{12}(7\kappa - 8)\phi'^4_2 + O(\phi'^6_2)$$

Wir sehen, daß der Koeffizient von  $\phi'^2_2$  bei einem kritischen Wert  $\kappa_{c,4} = 2$  sein Vorzeichen wechselt: Das Energieminimum bei 0 wird zu einem Maximum. Das Verhalten des Systems in der Nähe dieses Maximums wird dann vor allem von den Koeffizienten der nächsthöheren Ordnungen bestimmt.

Dazu betrachtet man das Extremalverhalten der entwickelten Energie, die sich allgemein schreiben läßt als

$$E_4(\phi'_2) = a(\kappa) + \frac{1}{2}b_0(\kappa - \kappa_{c,4})\phi'^2_2 + \frac{1}{4}c(\kappa)\phi'^4_2 + O(\phi'^6_2).$$

Daher läßt sich leicht durch Ableitung folgern, daß nahe der Extremstelle für das Verhalten von  $\phi'_2$

$$\phi'_2 = \pm \sqrt{\frac{-b_0}{c(\kappa_{c,4})}} \sqrt{\kappa - \kappa_{c,4}}$$

gelten muß. In unserem Fall liest man leicht ab:

$$\phi'_2 \propto \sqrt{\kappa - \kappa_{c,4}}$$

in der Nähe des kritischen Punktes.

**n=6**

<sup>5</sup>Hier ist etwas Vorsicht mit der Begrifflichkeit geboten. Eigentlich handelt es sich hier um eine Stabilitätsanalyse im Rahmen der Bifurkationstheorie. Die Landau-Theorie ist ein Spezialfall dieses sehr allgemeinen Bereiches, deren komplette mathematische Aspekte sich jedoch auf den hier betrachteten Fall übertragen lassen. Daher soll auch die Sprechweise übernommen werden.

Für sechs Spins wird die Betrachtung etwas komplizierter. Wir erhalten folgende Energiefunktion (wieder in Einheiten von  $K$ ):

$$E_6(v, w) = -\kappa \left( 2 \cos\left(\frac{\pi}{2} - v\right) + 2 \cos(v - w) + \cos(2w) \right) - 2(\sin^2 v + \sin^2 w) .$$

Dabei sei  $v = \phi_2$ ,  $w = \phi_3$ ,  $-v = \phi_4$ ,  $-v = \phi_5$ . Nun haben wir es jedoch mit einem etwas komplizierteren Problem zu tun. Der Ordnungsparameter ist nun lokal unterschiedlich, da die Auslenkungen der Winkel im Fall der Domänenwandphase sich an den beiden relevanten Gitterpunkten unterscheiden. Beide haben aber die Eigenschaft des Ordnungsparameters gemein, daß sie im Ising-Falle Null sind.

Um effektiv Landau-Theorie zu betreiben, sollte die entwickelte Energiefunktion in 2. Ordnung in den beiden Winkelparametern entkoppeln. Setzen wir wie beim 4 Spin-Fall wieder  $v' = \frac{\pi}{2} - v$  und analog  $w'$  an, so stellen wir fest, daß dies nicht der Fall ist: Die gemischten Ableitungen zweiter und höherer geradzahlgiger Ordnung verschwinden nicht. Wir erhalten also eine Gleichung der Form

$$E_6(\mathbf{v}') = a + \mathbf{v}'^T B \mathbf{v}' + O(v'^4) ,$$

wobei  $\mathbf{v} = (v', w')$  sei. Die Matrix  $B$  ist gegeben durch

$$B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E_6}{\partial v'^2} & \frac{\partial^2 E_6}{\partial v' \partial w'} \\ \frac{\partial^2 E_6}{\partial v' \partial w'} & \frac{\partial^2 E_6}{\partial w'^2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\kappa + 2 & -\kappa \\ -\kappa & -\kappa + 2 \end{pmatrix} ,$$

wobei  $v$  und  $w$  am kritischen Punkt ausgewertet sind. Die Terme zweiter Ordnung entkoppeln also genau dann, wenn die Matrix  $B$  der zweiten Ableitungen diagonal wird.<sup>6</sup> Die Details dieser Rechnung seien hier zurückgehalten (es handelt sich um das Standard­eigenwertproblem), es folgt aber für die Eigenwerte von  $B$  und die zugehörigen Eigenvektoren

$$\lambda_{1/2} = \frac{1}{2} (4 + \kappa (1 \pm \sqrt{13})) ,$$

wobei sich der niedrigste der Eigenwerte, der das kritische Verhalten bestimmt, schreiben läßt als

$$\lambda_2 = \frac{1}{2} (\sqrt{13} - 1) (\kappa_{c,6} - \kappa) ,$$

wobei

$$\kappa_{c,6} = \frac{4}{\sqrt{13} - 1} \approx 1,535 .$$

Der Eigenvektor  $e_2$  zu  $\lambda_2$  bestimmt das Verhalten des Systems nahe des kritischen Punktes, da er die instabile Richtung angibt

$$\mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\sqrt{13} - 3) \\ 1 \end{pmatrix} .$$

<sup>6</sup>Als Anmerkung sei genannt, daß, will man nur  $\kappa_c$  berechnen, dieses auch schon aus Extremal­betrachtungen folgt. Die Determinante der zweiten Ableitungen muß für ein Minimum größer Null sein, so daß sich ein kritischer Wert von 1,53518 auch hier schon ergibt.

Machen wir nun den folgenden Ansatz:

$$\begin{pmatrix} v' \\ w' \end{pmatrix} = \alpha \mathbf{e}_2 ,$$

so erhalten wir schließlich

$$\alpha \approx 1,491 \sqrt{\kappa - \kappa_{c,6}} .$$

Damit beenden wir unsere Betrachtung für im Falle kleinerer Anzahl Spins analytisch lösbarer Probleme und betrachten nun den Grenzfall des thermodynamischen Limes.

### 3.3.3 Das kritische Verhalten im thermodynamischen Limes

Betrachtungen aus Abschnitt 3.4 weisen darauf hin, daß mit wachsender Systemgröße  $\kappa_{c,n}$  recht schnell gegen einen Wert von 1,5 konvergiert. Dieser Wert sollte auch im thermodynamischen Limes analytisch berechenbar sein.

Blicken wir noch einmal zurück auf die Matrix  $B$  im vorherigen Kapitel, die ja die Matrix der zweiten Ableitungen ist. Wir hatten festgestellt, daß der kritische Wert aus dem niedrigsten Eigenwert dieser Matrix folgt. Betrachten wir nun die Struktur der Energie in größeren Systemen, so stellen wir fest, daß die Matrix der zweiten Ableitungen eine recht einfache Form hat, die sich leicht auf den Fall  $n \rightarrow \infty$  übertragen läßt.

Die Aufgabe, die sich uns stellt, ist also, den niedrigsten Eigenwert einer unendlich dimensional Matrix zu finden, die im allgemeinen folgende Form hat: Es handelt sich um eine tridiagonale Matrix der Dimension  $\frac{n-2}{2}$ , deren erstes Diagonalelement  $2 - \kappa$  ist<sup>7</sup>, die folgenden  $2\kappa + 2$ . Auf den Nebendiagonalen findet sich  $-\kappa$ .

$$B_n := \begin{pmatrix} -\kappa + 2 & -\kappa & & & & \\ & -\kappa & 2\kappa + 2 & -\kappa & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & -\kappa \\ & & & & & -\kappa & 2\kappa + 2 \end{pmatrix}$$

Diese Matrix ist leicht zerlegt in eine einfachere Form.

$$B_n = \kappa \cdot \begin{pmatrix} -3 & -1 & & & & \\ -1 & 0 & -1 & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 0 & \end{pmatrix} + (2\kappa + 2)\mathbb{1} =: \kappa B'_n + (2\kappa + 2)\mathbb{1} \quad (3.12)$$

Die Matrix  $B'_n$  beschreibt aber gerade ein Tight-Binding-Modell mit offenen Randbedingungen und einer Störstelle an Gitterplatz 1. Leider läßt sich hier nicht der übliche störungstheoretische Greenfunktionsformalismus anwenden - die Lage an einem

<sup>7</sup>Eigentlich das letzte, doch beschreiben beide Matrizen aus Symmetriegründen die selbe Physik.



fest definierten Rand bei nicht periodischen Randbedingungen „verzerrt“ die Lösung<sup>8</sup>. Dennoch ist das Problem mit dem Wissen um die Energieeigenwerte des Tight-Binding-Modells<sup>9</sup> lösbar. Dazu bilden wir zum Finden der Eigenwerte die Determinante, also das charakteristischen Polynom.

$$\begin{vmatrix} -3-\lambda & -1 & & & \\ & -1 & -\lambda & -1 & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \ddots & -1 \\ & & & & & -1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0$$

Entwickeln wir hier nach der ersten Zeile, dann nach der ersten Spalte, so erhalten wir zunächst

$$0 = (-3-\lambda) \begin{vmatrix} -\lambda & -1 & & & \\ -1 & -\lambda & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & -1 \\ & & & -1 & -\lambda \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} -1 & -1 & & & \\ 0 & -\lambda & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & -1 \\ & & & -1 & -\lambda \end{vmatrix}.$$

Wir entwickeln die zweite Determinante nun nach der ersten Zeile und können das Resultat, beachten wir, daß die Dimension der Matrix nur  $Q = \frac{n-2}{2}$  beträgt, schreiben als

$$(-3-\lambda)P_{H,Q-1} - P_{H,Q-2} = 0,$$

wobei hier  $P_{H,M}$  das charakteristische Polynom der Hamilton-Matrix des eindimensionalen Tight Binding-Modells mit  $M$  Plätzen, Hüpfmatrixelement  $t = -1$ , Onsiteenergie  $\varepsilon = -\lambda$ , und Dirichlet-Randbedingungen sei. Wir können hier von der Hamilton-Matrix in Diagonaldarstellung ausgehen,

$$P_{H,M} = \prod_{m=1}^M \left( -\lambda + 2 \cos \frac{\pi m}{M+1} \right).$$

Somit folgt für unsere Eigenwerte

$$\lambda = -\frac{P_{H,Q-2}}{P_{H,Q-1}} - 3.$$

Wir notieren zunächst, daß die Eigenwerte des Tight-Binding-Modells alle innerhalb des Intervalls  $[-2,2]$  liegen. In diesem Intervall ist der Bruch auf der rechten Seite eine

<sup>8</sup>Das soll bedeuten, daß wegen der Nähe zum Rand, also einer Potentialwand, der entstehende lokalisierte Zustand nicht mehr symmetrisch sein kann. Es soll jedoch nicht bedeuten, daß dieser Fall keine Lösung in diesem Rahmen hätte, jedoch brächte die Rechnung erheblichen Mehraufwand mit sich.

<sup>9</sup>Zur Lösung des Modells siehe Anhang A.

relativ unkontrollierbare Funktion, die  $Q - 2$  Nullstellen und  $Q - 1$  Singularitäten besitzt. Soll es eine Lösung außerhalb geben, so sollte der Bruch konvergieren. Nehmen wir dies an und betrachten wir die Rekursionsbeziehung für die Polynome  $P_H$ ,<sup>10</sup>

$$P_{H,M} = -\lambda P_{H,M-1} - P_{H,M-2},$$

so können wir definieren:

$$f_M = \frac{P_{H,M-2}}{P_{H,M-1}},$$

somit ist dann natürlich

$$\frac{1}{f_{M+1}} = \frac{P_{H,M}}{P_{H,M-1}}.$$

Unsere obrige Annahme würde bedeuten, daß für  $M \rightarrow \infty$  und  $\lambda < -2$  sowie  $\lambda > 2$  gelten würde:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} (f_M - f_{M-1}) = 0,$$

mit anderen Worten, die Folge  $f_M$  konvergiert gegen einen Wert  $f_\infty$ . Somit wäre dann

$$\frac{1}{f_\infty} = -\lambda - f_\infty$$

zu lösen zu

$$f_\infty = \frac{1}{2}(-\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - 4}).$$

Wir setzen dies ein und erhalten nach einfacher Rechnung  $\lambda = -\frac{10}{3}$  als einzige Lösung außerhalb des Bandes und somit niedrigsten Eigenwert. Dies setzen wir nun in (3.12) ein und erhalten als Endergebnis

$$\kappa_{c,\infty} = \frac{3}{2}. \quad (3.13)$$

Zum Abschluß des analytischen Kapitels wollen wir uns noch mit der Frage befassen, wie das kritische Verhalten in diesem Limes aussieht. Zu finden ist also der Eigenvektor zum niedrigsten Eigenwert an der Stelle, wo dieser Eigenwert den Wert 0 annimmt. Es sei  $\mathbf{v} = (x_1, x_2, \dots)$ . Gesucht ist die Lösung zu

$$B_n(\kappa = \kappa_{c,\infty})\mathbf{v} = 0.$$

Wir erhalten ein lineares Gleichungssystem, beginnend mit der Gleichung

$$-1,5x_{n-1} + 0,5x_n = 0 \quad \Rightarrow \quad x_{n-1} = \frac{x_n}{3}$$

und müssen dann Gleichungen der Art

$$-1,5x_{i-1} + 5x_i - 1,5x_{i+1} = 0$$

<sup>10</sup>Es handelt sich übrigens hier um Chebyshev-Polynome 2. Art.

lösen, was einfach zu

$$x_i = \frac{1}{3^{n-i}} x_n$$

für  $i > 1$  möglich ist. Die letzte Gleichung

$$5x_1 - 1,5x_2 = \left( \frac{5}{3^{n-1}} - \frac{1}{2 \cdot 3^{n-3}} \right) x_n = 0$$

liefert

$$x_1 = \frac{1}{10} \frac{x_n}{3^{n-1}},$$

abweichend vom allgemeinen Ansatz.

## 3.4 Numerische Methoden

### Monte-Carlo-Simulation

Um erste Voraussagen über das Verhalten des Systems machen zu können, habe ich eine Programmierumgebung erstellt, die die Spinkette sowohl für  $T = 0$  als auch für  $T > 0$  beschreiben kann, nämlich die Bibliothek „elmers.h“. Sie enthält eine Klasse, die den momentanen Status der Kette wiedergibt sowie ihre Parameter, nämlich Zahl der Spins, Größe des Verhältnisses von Heisenberg-Wechselwirkung zu Anisotropie, Temperatur des Systems als auch die Winkel der einzelnen Spins. Das System sucht für  $T = 0$  einfach den Gleichgewichtszustand auf.

Basierend auf dieser Umgebung wurde auch ein erstes Programm entworfen, daß zum Auffinden des kritischen Punktes dienen sollte. Dieses ändert schrittweise  $\kappa_c$ , bis der Phasenübergang stattfindet. Ein Beispiel für die Arbeit des Programms sehen wir in

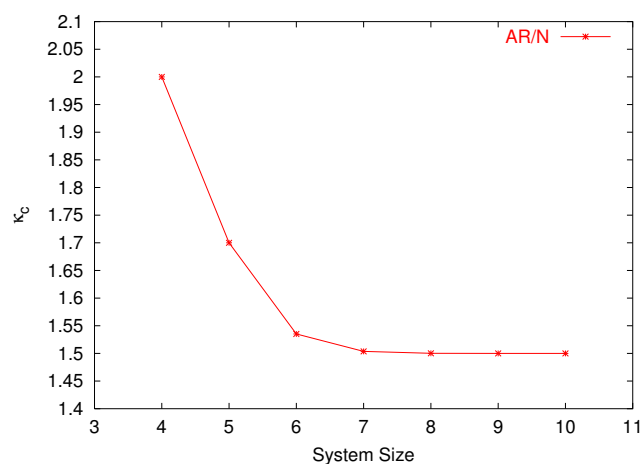


Abbildung 3.3: Ergebnisse der MC Simulation:  $\kappa_c$  gegen  $n$

Abb. 3.3.

Offenbar bestätigt das Programm hervorragend unsere analytischen Rechnungen. Die finite size-Effekte bei niedrigen  $n$  verschwinden recht schnell, der kritische Wert konvergiert rapide gegen 1.5.

Das Paket wurde nach und nach optimiert, nicht zuletzt durch die Analyse des kritischen Verhaltens konnten auch Monte-Carlo-Schritte gewählt werden, welche dem Fluß der Ordnungsparameter im Minimum um den kritischen Punkt folgen. Auf diese Art und Weise reagiert das System noch sensitiver auf kleine Verschiebungen in der Energie.

### Weitere numerische Methoden, die Verwendung fanden

Ist die Matrix  $M'$  aus Gl. (3.12) erst bekannt, bieten sich für größere Systeme numerische Methoden an, um den niedrigsten Eigenwert und den dazugehörigen Eigenvektor zu finden. Der geeignetste Algorithmus für diesen Fall, der sogenannte „tqli-Algorithmus“ (PTVF99), fand auch hier Verwendung, um Voraussagen für mittelgroße Systeme abgeben zu können.

Zudem erwies sich Mathematica (Wol03) als eine gute Hilfe zum Finden der Lösungen von Integralen.

## 3.5 Korrekturen zum Kontinuumsmodell

Die im vorhergegangenen Abschnitt beschriebenen numerischen Methoden erlauben es uns nun, für beliebige Systemgrößen eine Korrektur zum Kontinuumsmodell, in den Graphen durch  $CT$  gekennzeichnet, im Vergleich zum diskreten Gittermodell zu bestimmen. Um diesen Vergleich zu ermöglichen, simulieren wir im Prinzip das Experiment, nur daß uns die Eingabeparameter wohlbekannt sind. Es wurde zunächst ein System mit Hilfe des Hamiltonoperators (3.2) simuliert, bis sich im Gleichgewicht der Grundzustand mit der Domänenwand einstellte. Die erhaltene Form der Wand (das „Meßergebnis“) wurde dann an die Form (3.6) angefitet, die vom Kontinuumsmodell vorhersagt wird, siehe hierzu auch Abb. 3.4. Die Energie und die Wandbreite des besten Kontinuumsmodellfits erlauben uns die Berechnung der korrespondierenden Materialparameter  $A$  und  $e_K$  und somit der mikroskopischen Parameter  $K$  und  $J$ . Diese scheinbaren Werte von  $K$  und  $J$  können dann mit den wirklichen Werten verglichen werden, die verwendet wurden, um die Domänenwandform im diskreten Modell zu berechnen. Unsere hauptsächlichen Ergebnisse sieht man in Abb. 3.5. Der ursprüngliche Eingabeparameter  $\kappa$  ist als Funktion des zugehörigen Kontinuumstheoriewertes  $\kappa_c$  aufgetragen. Man bemerkt eine besonders große Abweichung in der Nähe des kritischen Punktes,  $\kappa = 1,5$ . Dies erklärt sich daraus, daß bei kleinen Werten von  $\kappa$  die Kontinuumstheorie erlaubt, Domänenwände bis zu einer Breite von 0 zu berechnen, wie auch durch ihre nichtdiskrete Natur zu erwarten ist.

Ein weiteres wichtiges Ergebnis dieser Betrachtung ist, daß es offenbar eine eindeutige Zuordnung der beiden Werte gibt, also keine Doppeldeutigkeiten auftreten können.

Bei großen Werten wird der Unterschied zwischen  $\kappa$  und  $\kappa_{CT}$  immer kleiner (im Limes  $\kappa \rightarrow \infty$  wird er 0). Die Abweichung beträgt etwa 10% bei  $\kappa = 4$  und fällt auf etwa 3%

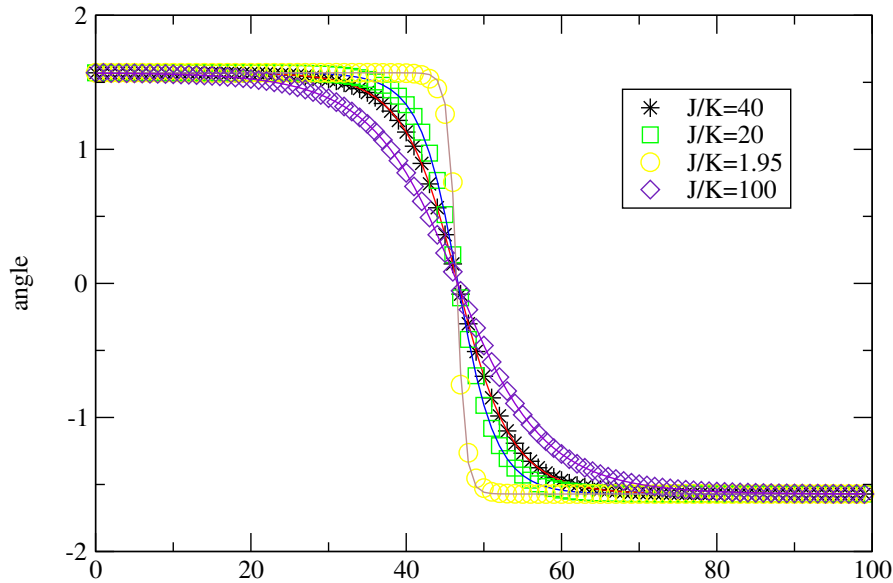


Abbildung 3.4: Domänenwände (Punkte) und Kontinuumsmodellfits (Linien) für ein System von 100 Spins, für verschiedene Werte von  $\kappa$ .

bei  $\kappa = 10$  ab.

Nachdem  $\kappa$  aus  $\kappa_{CT}$  mit Hilfe des obigen Graphen bestimmt wurde, können wir nun die Wechselwirkungsparameter  $J$  und  $K$  im diskreten Modell bestimmen. Die Verhältnisse  $J_{CT}/J$  und  $K_{CT}/K$  sind in den Abbildungen 3.6 und 3.7 gegen  $\kappa$  aufgetragen. Man erkennt, daß  $J$  deutlich unterschätzt wird,  $K$  leicht überschätzt wird.

In ihrem PRL (PEB<sup>+</sup>01) und einer folgenden Arbeit (PE03) haben Pratzner *et al.* Werte für  $J_{CT}$  und  $K_{CT}$  von 14 meV/Atom bzw. 4 meV/Atom bestimmt, was zu einem  $\kappa_{CT}$  von 3,5 führt - eine Korrektur wäre hier also sinnvoll. Aus Abb. 3.5 erhalten wir

$$\kappa = 4$$

und aus den Abbildungen 3.6 und 3.7

$$J = 15,4 \text{ meV/Atom, und } K = 3,8 \text{ meV/Atom.}$$

Die  $K$ -Korrektur scheint eine Tendenz, die sich in einer *ab initio*-Rechnung von Nie *et al.* (NBB01) abzeichnet, zu bestätigen. Diese errechneten eine Anisotropieenergie von 2,3 meV/Atom für eine Drehung der Magnetisierung von [110] nach [001]. Eine Abschätzung mit Hilfe dickerer Schichtdicken (Elm98) ergab  $K = 0,6$  meV, was offensichtlich zu klein ist.

Was die Austauschwechselwirkung angeht, gibt es leider sehr wenig verlässliche Ergebnisse, mit denen man vergleichen könnte. Dieser Parameter kann unter Verwendung einer Relation zur Curie-Temperatur (KW41) abgeschätzt werden,  $2.26J = k_B T_c$ , was ein  $J$  von 8,6 meV/Atom ergibt. Dies ist niedriger als der gemessene Wert und unser Ergebnis. Ein weiteres Ergebnis erhielt Heide (Hei02), der, unter Verwendung der selben

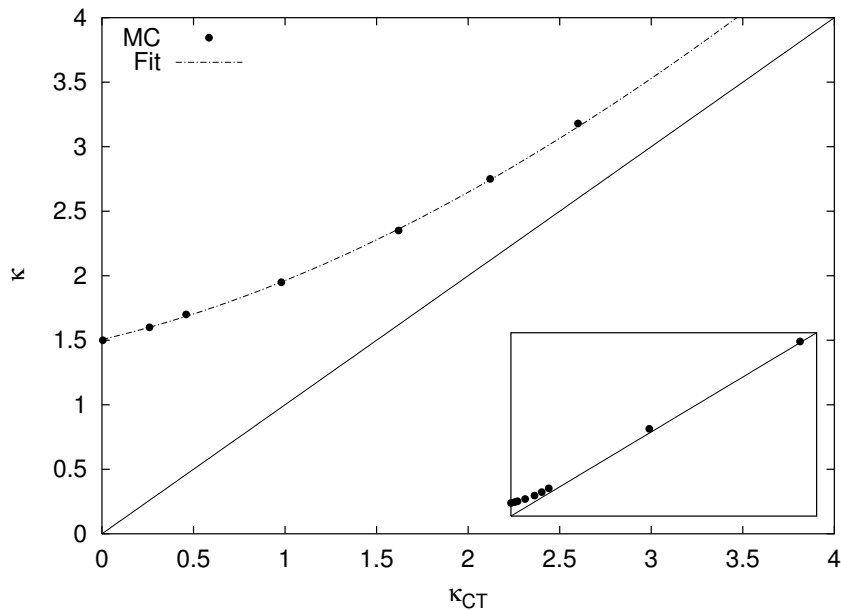


Abbildung 3.5: Monte Carlo-Ergebnisse für  $J/K$ . Die Punkte sind die Ergebnisse der Simulation für das diskrete System, die gestrichelte Linie entspricht einem polynomialen Fit, und die durchgezogene Linie deutet  $\kappa = \kappa_{CT}$  an. Der kleinere Einschubgraph zeigt, daß sich die Simulationsergebnisse für große Werte von  $\kappa$  immer mehr der durchgezogenen Linie annähern. Der umfaßte Bereich im Inset reicht von 0 bis 20.

Methoden wie Nie, ein  $J$  von 36 meV mit einer Zuverlässigkeit von etwa 50% ermittelte. Dieses Ergebnis ist offensichtlich viel zu groß, da die Domänenwand eine viel größere Breite erhielt, was dem Experiment widerspricht.

Nachdem wir nun nennenswerte Korrekturen bestimmen konnten, die nur aufgrund der diskreten Struktur auftreten, wollen wir uns in den weiteren Kapiteln dieser Arbeit mit den Effekten der Quantenmechanik befassen. Zunächst betrachten wir aber noch den Einfluß der diskreten Struktur auf die Mobilität der Domänenwand.

## 3.6 Die Dynamik einer Domänenwand

### 3.6.1 Kontinuumsmodell und Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung

Im Kontinuumsmodell würde man normalerweise annehmen, die Bewegung der Domänenwand sei eine einfache Sache: Für jeden Punkt, an dem man nämlich einen Spin aus der Anisotropierichtung herausdreht, findet man einen weiteren Punkt, an dem man einen Spin zur Erhaltung der Wandform um genau den selben Betrag zur leichten Richtung hindreht. Somit ist keinerlei Reibung vorhanden: Legt man in einem unendlich großen System ein Feld an, so bewegt sich die Wand ohne Widerstand sofort zum En-

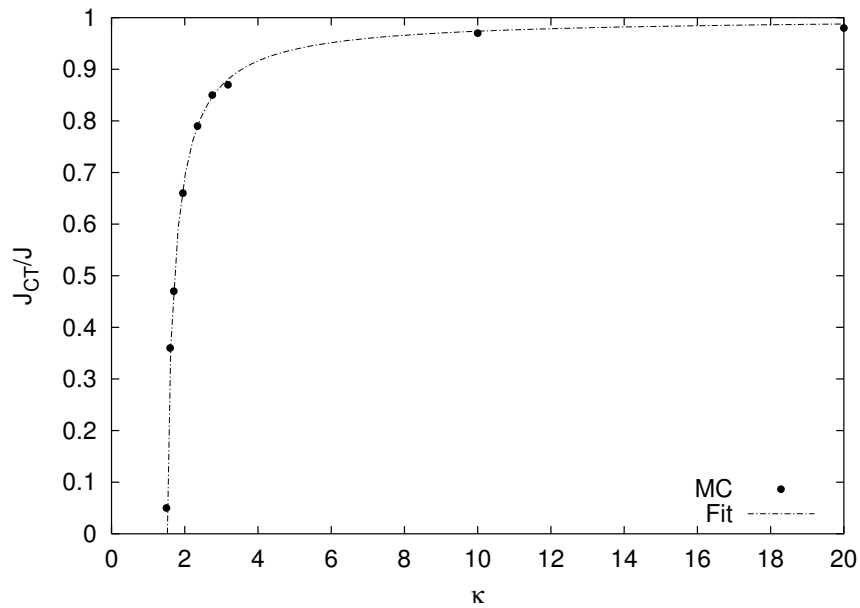


Abbildung 3.6: Das Verhältnis  $J_{CT}/J$  gegen  $\kappa$  aufgetragen. Die gestrichelte Linie ist ein  $1/\kappa$ -Fit. Der Graph zeigt eine starke Abweichung von 1 schon bei Werten von  $\kappa \approx 5$ . Das gemessene  $J$  ist kleiner als der Eingabewert.

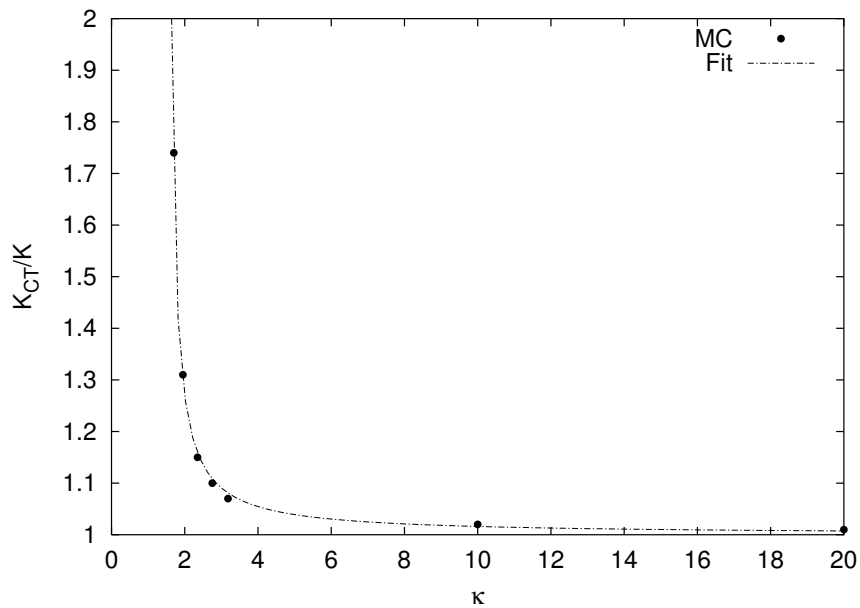


Abbildung 3.7: Das Verhältnis  $K_{CT}/K$  gegen  $\kappa$  aufgetragen. Die gestrichelte Linie ist ein  $1/\kappa$ -Fit. Die Abzisse reicht von 1 bis 2. Das gemessene  $K$  ist kleiner als der Eingabewert, aber die Abweichung ist schwächer als bei der Austauschwechselwirkung.

de, sind keine festen Randbedingungen gegeben, würde ein real existierendes Kontinuumsmodell durch das kleinste angelegte Feld in Anisotropierichtung instantan uniform magnetisiert sein. Offenbar versagt also das Kontinuumsmodell spätestens an dieser Stelle, es sei denn, man bringt einige Korrekturen an.

Der Schlüssel zu einer Berechnung einer Wandgeschwindigkeit im Kontinuumsmodell ist die Annahme, daß sich die Spins über eine gedämpfte Rotation in ihre neue Position bewegen, und somit sehr wohl eine Auslenkung aus der x-z-Ebene auftritt. Enz (Enz64) berechnete die Geschwindigkeit einer Domänenwand mit Hilfe der Annahme eines demagnetisierenden Feldes der Größenordnung  $4\pi M\phi$ , wo  $\phi$  der Azimutwinkel ist. Er leitete eine bestimmte Ähnlichkeit zwischen Domänenwänden (als Teilchen betrachtet) und der relativistischen Bewegung von Massen her, wobei er sogar eine Lorentz-Kontraktion beobachtet.

Eine ganze Reihe bemerkenswerter Arbeiten zu diesem Thema sind im Rahmen des mikromagnetischen Formalismus entstanden, von denen die aktuellsten sicher die von Thiaville *et al.* (TNM04) sind. Hier werden allerdings Wandbewegungen in zwei- oder dreidimensionalen Systemen behandelt. Dieser Ansatz, wie auch die meisten anderen dynamischen Ansätze im mikromagnetischen Rahmen, basiert weitestgehend auf der Landau-Lifschitz-Gilbert Gleichung (Siehe (LL35), (Gil55) bzw. (Bro63) zum Beweis der Gleichheit beider Formulierungen). Diese Gleichung beschreibt zum einen die normale Präzession des Spins um die Magnetfeldrichtung, welche sich leicht aus der Quantenmechanik herleiten läßt, sowie einen Dämpfungsterm, der es erst ermöglicht, daß der Spin die Richtung des äußeren Feldes einnimmt:

$$\frac{(1 + \alpha^2)\mu_S}{\gamma} \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial t} = -\mathbf{S} \times \frac{\partial H}{\partial \mathbf{S}} + \alpha \mathbf{S} \times \left( \mathbf{S} \times \frac{\partial H}{\partial \mathbf{S}} \right). \quad (3.14)$$

Hierbei ist  $\gamma$  das gyromagnetische Verhältnis,  $H$  die Hamiltonfunktion und  $\alpha$  ist die Dämpfungskonstante (oft auch Gilbert-Dämpfung genannt). Wir sehen die Bewegung eines Spins, die diese Gleichung beschreibt, in Abb. 3.8 am Beispiel einer Ummagnetisierung. Bemerkenswert ist an dieser Stelle der Fakt, daß die mikroskopische Ursache der Dämpfung noch immer nicht geklärt ist, sie wird hier rein phänomenologisch eingeführt. Trotzdem es in letzter Zeit einige Erklärungsversuche, oder zumindest Versuche, sie berechenbar zu machen, gegeben hat, ist ihr Geheimnis eigentlich doch noch nicht gelüftet. So machten zum Beispiel Sivasubramanian und Widom (SW02) den Ansatz, daß die sich mit der Zeit verändernde Magnetisierung elektromagnetische Felder ausstrahlen müsse, welche dann wiederum vom Gitter absorbiert werden. Ein Vergleich seines Ergebnisses mit einem konkreten Experiment konnte er jedoch noch nicht geben. Safonov und Bertram (SB00b) simulierten ein kleines System ohne Dämpfungsterme und fanden einen nichtlinearen intrinsischen Mechanismus, der auf Spinwellen beruht. Eine weitere interessante Arbeit dieser beiden Forscher befaßt sich mit dem Einfluß von Störstellen auf das Dämpfungsverhalten (SB00a), doch auch dieser Mechanismus alleine ist nicht ausreichend, um das allgemeine Verhalten zu erklären. Einen Ansatz mit *two level* Störstellen gab es allerdings auch schon früher (MF81) von Mikhailov und Farzetdinova, die sich auch mit dem Spinwellenansatz beschäftigt hatten (MF83). Bei einem anderen Ansatz konnte im Rahmen der Recherchen nicht festgestellt werden,



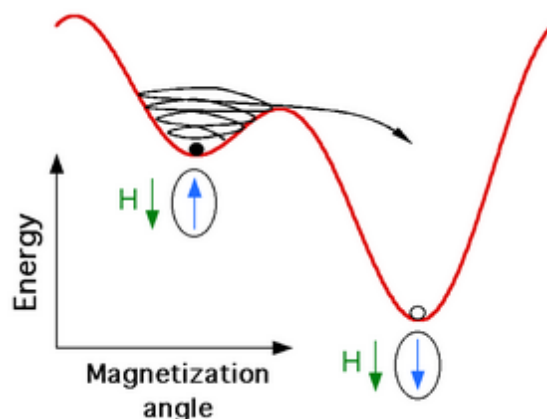


Abbildung 3.8: Ein Ummagnetisierungsvorgang, beschrieben durch die Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung.

inwiefern dieser einen Weg von der Konferenz in die Literatur antrat (Wan00).

Ein in unserer Gruppe diskutierter weiterer Ansatz, der in einer zukünftigen Arbeit behandelt werden kann, wäre die sogenannte Magnetostriktion. Hierbei nimmt man an, daß Schwankungen der Positionen der Spins auf dem Gitter durch die Austausch- und Dipolwechselwirkungen auftreten könnten. Somit würde die bei der Dämpfung verlorene Energie in Gitterschwingungen (Phononen) umgesetzt.

Zum Abschluß unserer Diskussion des Dämpfungsterms sei noch ein weiterer, vielversprechender Ansatz erwähnt, der versucht, die Verteilung oder Verschiebung von Spins analog dem Modell für die Ladung über die Kubo-Formel, also mit Hilfe von Spinleitfähigkeit und Steife zu beschreiben. Diese Modelle laufen unter dem Namen Spindiffusion. Auch hier sei auf die Literatur von Kopietz (Kop98) sowie Sodickson und Waugh (SW95) verwiesen.

Zusammenfassend läßt sich also sagen, daß die Erklärung der Spindämpfung noch unbekannt ist. Vielleicht ist es aber auch nur so, daß das Zusammenspiel aller dieser Effekte die Ursache ist, und der dominante Term von Material zu Material verschieden ist.

Wir kehren zurück zur Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung. Wie schon erwähnt, ist diese sozusagen die dynamische Ergänzung des Mikromagnetismus. Auch thermische Anregungen werden phänomenologisch eingeführt, und zwar hauptsächlich in Form einer statistischen Störung, eines sogenannten Langevin-Terms (LC93). Arbeiten zur eindimensionalen Spinkette gibt es hier vor allem von Hinzke *et al.* Wir wollen vor allem auf die Arbeiten (HN00) und (HNU00) hinweisen.

Es läßt sich also abschließend sagen, daß die mikromagnetischen Simulationen eine Vielzahl von Ergebnissen liefern, von denen wir einige im weiteren Verlauf dieser Arbeit noch ansprechen werden.

### 3.6.2 Bewegung im Gittermodell

Für ein diskretes Gittermodell gibt es weniger Ansätze. Zijlstra (Zij70) und van den Broek (vdBZ71) berechnen in ihren Arbeiten das Koerzitivfeld aus der Energiedifferenz zwischen einer Wand im Grundzustand und einer Wand, deren zentraler Spin maximal aus der Anisotropierichtung ausgelenkt ist. Diese Differenz müßte in periodischer Abfolge immer wieder aufgebracht werden, um die Wand in Bewegung zu setzen. Hierzu werden auch einige Berechnungen erwähnt. In diesen Arbeiten wird allerdings nur die Höhe der Barriere berechnet, nicht ihre Form oder die Bewegung der Spins.

Optionen hierzu böten zum Beispiel die oft, aber nicht nur, in der physikalischen Chemie angesetzten Monte Carlo- oder Pfadintegralmethoden. Eine weitere elegante Möglichkeit, diese Informationen zu erhalten, bietet die *nudged elastic band*-Methode (NEB), die von Rok Dittrich zum ersten Mal für ein Ensemble von Spins zur Berechnung von Energiebarrieren eingesetzt wurde (Dit03). Diese Methode bietet sich für die Untersuchung der Domänenwandbarriere an.

#### Die NEB-Methode

Eine genaue Beschreibung der Methode und ihrer Implementation findet man in der schon zitierten Doktorarbeit (Dit03) oder dem Artikel (DSS<sup>+</sup>02).

Im Prinzip starten alle Methoden, um den wahrscheinlichsten Pfad von Minimum zu Minimum in einer komplizierten Energielandschaft zu finden, damit, daß der Weg diskretisiert wird. Man legt also eine Art Pfadpunkte fest. Im Monte Carlo-Verfahren werden diese nach bestimmten Wahrscheinlichkeitsmustern zufällig gewählt, um durch Minimierung den idealen Pfad zu finden. Diese Methode bietet den Vorteil, daß sie auf alle Systeme anwendbar ist. Die NEB-Methode sucht den sogenannten *minimum energy path* (MEP) auf. Dies ist der Pfad, entlang dem der Gradient immer in Richtung der Tangenten des Pfades zeigt. Die Idee ist nun, iterativ den geschickt gewählten Initialpfad entlang der Richtung des negativen Gradienten, aber senkrecht zur momentanen Pfadtangenten, zu verschieben. Dies reduziert sich letztendlich auf die Lösung eines Sets von Differentialgleichungen, die numerisch zum Beispiel mit Hilfe des CVODE-Softwarepaketes (CH96) gelöst werden können. Eine besondere Vorsicht muß bei der Definition der Tangenten entlang der diskreten Parametrisierung des Weges gelten. Es sei hier darauf hingewiesen, daß diese Methode nur funktioniert, wenn ein Minimum entlang des Grates existiert<sup>11</sup>. Der Effekt ist also wirklich der eines elastischen Bandes, welches um eine Art Gebirge gelegt wird.

In diesem Bilde erkennt man schon ein zweites Problem des Algorithmus, nämlich, daß die Abstände zwischen den Wegpunkten im zentralen Teil (nahe des Maximums) immer größer werden, nahe der Minima diese aber immer dichter liegen. Um die Abstände möglichst gleich zu halten, kann die Methode durch die Einführung einer Federkraft optimiert werden.

---

<sup>11</sup>Dies ist nicht immer selbstverständlich! Man denke allein an ein Potentialgebirge, das zum Unendlichen hin kontinuierlich gegen Null ausläuft.

### Anwendung auf das Peierls-Potential der Domänenwände

Betrachten wir im thermodynamischen Limes eine unendlich lange Spinkette mit diskreten, festen Gitterabständen, so findet man äquidistante Minima in der Energie, abhängig von der Position der Domänenwand. Ein solches periodisches Potential wird im allgemeinen Peierls-Potential genannt; sein Effekt beim Auftreten von thermischen Anregungen und Tunneln ist eine Diffusion. Die Form der Peierls-Barriere und inwiefern der Übergang zwischen den Minima ein kollektiver Prozeß ist soll in diesem Kapitel diskutiert werden.

Zunächst läßt sich mit Hilfe des schon vorhandenen numerischen Rahmens sehr schnell zeigen, daß der Wechsel zwischen zwei Zuständen niedrigster Energie nicht auf dem Wege erfolgt, der eine lineare Extrapolation zwischen den Minima wäre: Der Gradient liegt nicht entlang der Tangente dieses Weges. Daher wurde eine Erweiterung um die NEB-Methode vorgenommen, deren Initialisierungspfad genau diese lineare Extrapolation ist. Da die Methode sehr effektiv ist und schnell konvergiert, kann sie für Systeme von mehreren tausend Spins angewandt werden.

Es sei an dieser Stelle noch angemerkt, daß hier schon die Winkel  $\theta_i = -\phi_i + \frac{\pi}{2}$  genutzt werden, die wir auch im quantenmechanischen Teil einsetzen werden.

Die Ergebnisse für das in Abschnitt 3.1 vorgestellte Modell wollen wir nun vorstellen. Alle Resultate wurden in einem System aus 100 Spins gewonnen, als Zahl der Wegpunkte wurde 35 gewählt. Die Genauigkeit des Algorithmus ist je mit Hilfe äußerer Parameter einstellbar, bei den hier gewonnenen Ergebnissen liegt sie bei  $10^{-6}$ . In Abbildung 3.9 sehen wir die zentralen Winkel der Domänenwand und ihre Entwicklung entlang des Weges. In grün gezeichnet ist der Spin, der „geflippt“ wird in dem Sinne, daß er von einem Wert größer  $\pi/2$  zu einem Wert kleiner als  $\pi/2$  gedreht wird. Sind die Spins unabhängig, also im Grenzfall  $\kappa = 0$ , so wird dieser Zentralspin einfach direkt gedreht, die anderen Spins werden hiervon nicht beeinflusst. Dies ist im obersten Graphen zu sehen. Die beiden mittleren Abbildungen zeigen das Verhalten mit Austauschwechselwirkung im Ising-Bereich. Die benachbarten Spins werden ein Stück weit mitgezogen. Bei einem gewissen Abstand pendeln sie dann zurück in ihre Ausgangslage. Betrachten wir schließlich ausgedehnte Domänenwände, so ist so beachten, daß auch die benachbarten Spins absolute Bewegung zeigen, die sich im Betrag immer mehr der des Zentralspins annähert, im Limes  $\kappa \rightarrow \infty$  sogar auf den selben Betrag. Man kann immer noch die Wechselwirkung der Spins darin erkennen, daß die Winkel der dem Zentralspin benachbarten Spins keine Geraden beschreiben. Für sehr große  $\kappa$  darf man jedoch wieder von der Gültigkeit der linearen Extrapolation des Pfades ausgehen. Die Kollektivität des Phänomens auch im Ising-Bereich wird auch durch Abbildung 3.10 bestätigt. Im Rahmen der numerischen Genauigkeit der Methode läßt sich 10 Gitterplätze von Zentralspin entfernt noch eine Auslenkung feststellen.

Kennen wir den MEP, so können wir auch die Energie entlang des Pfades berechnen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.11 dargestellt. Bemerkenswert ist, daß schon innerhalb des Ising-Bereichs die Höhe der Barriere stetig absinkt, was in direktem Zusammenhang mit dem eben beobachteten kollektiven Bewegen der Spins steht. Die Barriere verliert für ausgedehnte Domänenwände sehr rasch an Höhe und verschwin-

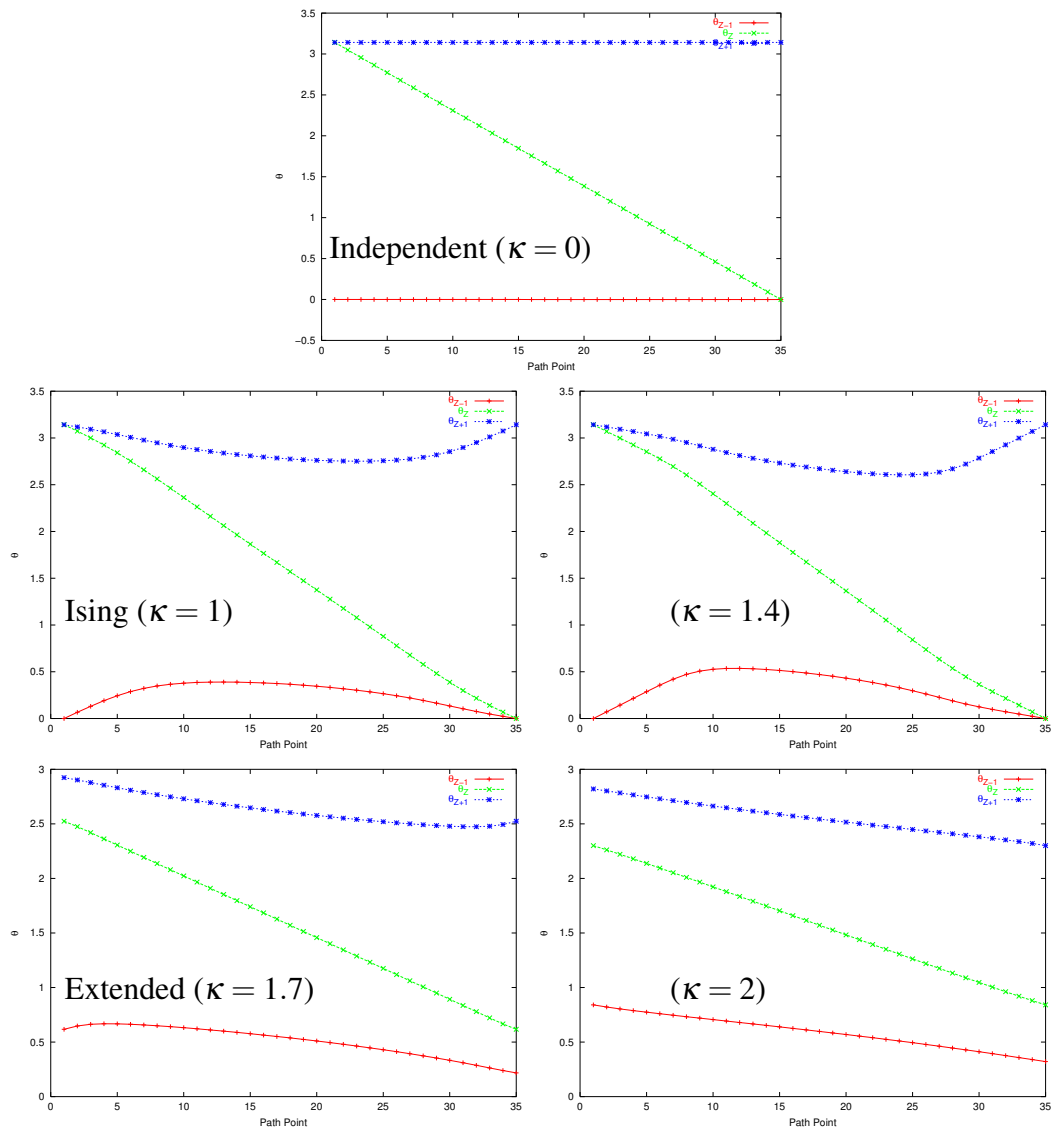


Abbildung 3.9: Die drei zentralen Winkel und ihr MEP für verschiedene Werte von  $\kappa$ . Auf der Abzisse ist der Winkel aufgetragen, auf der Ordinate die Pfadpunkte. Die mittlere, grüne Kurve zeigt das Verhalten des Spins, der „geflippt“ wird, die beiden anderen Kurven die jeweils rechts und links angrenzenden Spins.

det im Limes  $\kappa \rightarrow \infty$  (im thermodynamischen Limes!) ganz. Die Barriere ist absolut symmetrisch, die Energie hat, wie auch schon von Zijlstra angenommen, ihr Maximum an der Stelle, an der der Winkel des Zentralspins  $\pi/2$  beträgt. Somit sind auch die Betrachtungen zum Koerzitivfeld in diesen Arbeiten absolut richtig, und der interessierte Leser sei wiederum auf (Zij70) und (vdBZ71) verwiesen. Natürlich ist es mit Hilfe unseres Paketes auch sehr einfach möglich, Barrieren in Anwesenheit eines Ma-

### 3.6 Die Dynamik einer Domänenwand

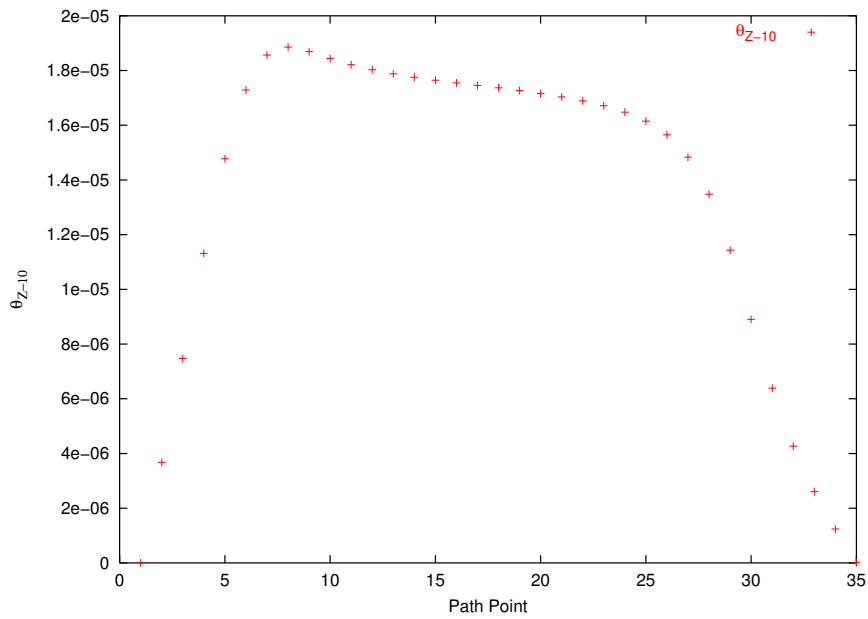


Abbildung 3.10: Die Entwicklung eines Spins, 10 Gitterplätze vom Zentralspin entfernt. Auch dieser Spin wird noch beeinflusst. ( $\kappa = 1.4$ )

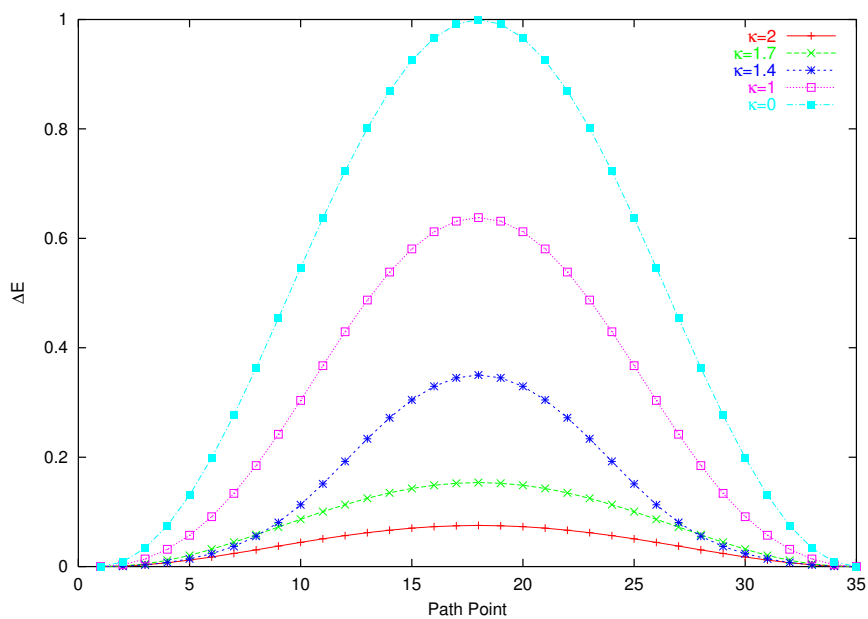


Abbildung 3.11: Form und Höhe der Peierls-Barriere der eindimensionalen Spinkette für verschiedene Werte von  $\kappa$ .

gnetfeldes zu berechnen. Eine solche Barriere ist dann asymmetrisch und ähnelt einem metastabilen Potential, wie es häufig in der Chemie bei Reaktionsprozessen auftritt. Die

Wahrscheinlichkeiten für den Wechsel des Minimums in beiden Richtungen sind dann nicht mehr gleich, die Wand würde in eine Richtung diffundieren. Ein Beispiel für ein solches Potential ist in Abb. 3.12 dargestellt. Die Parameter für diesen Prozeß sind

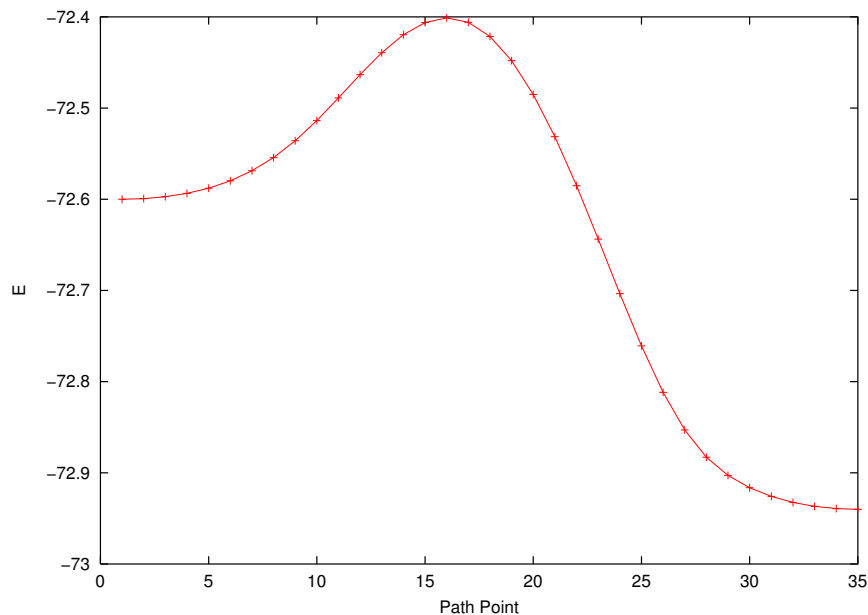


Abbildung 3.12: In Gegenwart eines magnetischen Feldes erhalten wir eine asymmetrische Barrierenstruktur.

$\kappa = 1.4$  und ein magnetisches Feld, dessen Feldenergie relativ zur Anisotropie 0.17 beträgt. Diesen Beobachtungen entsprechend ist auch der kollektive Prozeß der Winkel nicht mehr symmetrisch, da nun eine weitere rücktreibende Kraft beziehungsweise antreibende Kraft wirkt. Dies sieht man besonders deutlich durch Betrachtung der Winkel direkt neben dem Zentralspin. In Abb. 3.13 sind die absoluten Auslenkungen dieser Spins aufgetragen. Der schon in Richtung des äußeren Feldes stehende Spin wird weniger stark ausgelenkt. Die Frage, die sich nun stellt, ist, inwieweit ein Prozeß, der direkt in das übernächste (oder weiter entfernte) Minimum überführen würde, nicht durch niedrigeren Gesamtaufwand bevorzugt würde. Dies wurde in dieser Arbeit nicht näher untersucht, jedoch fanden sich Hinweise, daß ein solches „Sprungverhalten“ auftreten kann.

#### Ausblick: Diffusion im Peierls-Potential

Im direkten Anschluß an die soeben erhaltenen Ergebnisse stellt sich nun die Frage nach der Diffusionskonstanten des Problems. Treten thermische Anregungen auf, so wird eine zu einem bestimmten Zeitpunkt fest lokalisierte Domänenwand mit der Zeit immer delokalisiert. Die Berechnung dieser Konstanten erweist sich allerdings als keinesfalls trivial. Würden wir von einem eindimensionalen Problem entlang des MEP

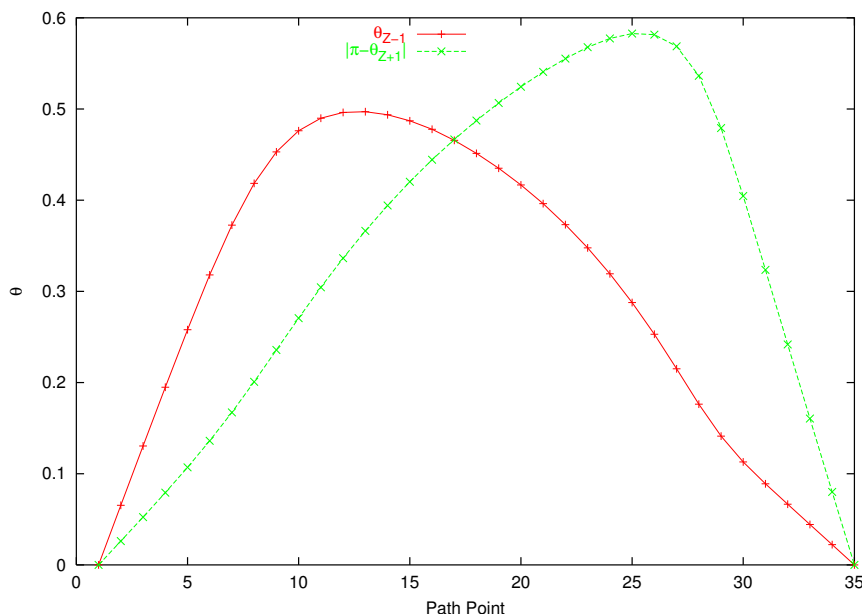


Abbildung 3.13: *Evolution der dem Zentralspin benachbarten Spins. Aufgetragen sind die absoluten Auslenkungsbeträge. Das magnetische Feld verursacht eine deutliche Asymmetrie.*

ausgehen, so fänden wir im Rahmen der Kramersschen Theorie<sup>12</sup> zwar eine Lösung (LJ62), doch betrachten wir das System hier als ein ganzes und könnten über die Reibungskonstante keine fundierte Aussage treffen.

Die zweite Option wäre eine Betrachtung im Rahmen eines Langevin-Terms in der Bloch- oder Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung, die allerdings auch nur bestimmte Grenzfälle beschreiben. Der Frage nach einer allgemeinen Gleichung haben sich Garanin *et al.* Ende des letzten Jahrzehnts erfolgreich gestellt (GIP90; Gar97). Die Reibung folgt hierin zwangsläufig aus der ursprünglichen Form der angesetzten Potentiale und Felder. Bislang wurde seine Arbeit jedoch nur auf Einspinsysteme angewandt (GPL98), so daß es hochinteressant wäre, sie auch auf Systeme aus mehreren Spins (wie die Domänenwand) zu erweitern (Gar04). Leider liegt dies außerhalb des Zeitrahmens dieser Arbeit, so daß dieser Abschnitt lediglich als Anregung dienen kann. Experimentell ist dieser Forschungsbereich aktuell erst in Erscheinung getreten, nachdem die Bewegung von Domänenwänden im Peierls-Potential sogar auf subatomarem Niveau gemessen werden konnte (NGD<sup>+</sup>03).

<sup>12</sup>Für einen ausführlichen Überblick sei (HTB90) empfohlen.





# 4 Quantenmechanische Beschreibung der eindimensionalen Spinkette

In diesem Kapitel werden Modell und Methode beschrieben, mit deren Hilfe die später in der Arbeit diskutierten quantenmechanischen Ergebnisse erhalten wurden. Betrachtet wurde ein anisotropisches Heisenberg-Modell mit verdrehten Randbedingungen. In unserem Fall ist eine analytische Lösung noch unbekannt. Wir rechnen in dieser Arbeit in einer störungstheoretischen Näherung. Die Methode der Wahl ist die  $1/S$ -Entwicklung, andere Möglichkeiten wären zum Beispiel eine Entwicklung in Magnonenzustände oder Störungstheorie in einem anderen Parameter. Eine Entwicklung für große Spins bietet einen kontrollierten Ansatz und sollte im Limes  $S \rightarrow \infty$  wieder zur klassischen Lösung führen. Außerdem, wenn wir an Kapitel 2 zurückdenken, bietet sich aufgrund der dort verwendeten Probe die  $1/S$ -Näherung an - aus zweierlei Grund. Zum einen ist die Grundzustandskonfiguration von Eisen mit 6 3d-Elektronen  $[\text{Ar}]3d^64s^2$  derart, daß sich ein recht großes magnetisches Moment ausbildet. Theoretisch zeigten Freeman und Fu (FF87) sowie experimentell Elmers *et al.* (ELG89), daß sich dieses Moment im zweidimensionalen Regime des Eisen auf Wolfram noch vergrößert. Zum anderen kann man auch ein *mean field*-Modell konstruieren, indem man annimmt, daß die Spins in der einfachen Richtung reihenweise zu großen Makrospins koppeln, wodurch auch auf ein eindimensionales Modell projiziert wird.

Weiter werden wir die Methode beschreiben, mit der wir den Hamiltonoperator diagonalisieren. Tikochinsky benennt diese Transformationen als bosonische Bogoliubov-Transformationen (Tik77).

## 4.1 System und Hamiltonoperator

Im Vergleich zum klassischen Modell, das stark an die Vorgaben des Experiments und des Kontinuumsmodells angepaßt war, müssen wir nun ein etwas anderes Bezugssystem für die Winkel wählen, um mit der Literatur vergleichen zu können. Wie wir in Abbildung 4.1 sehen, betrachten wir weiterhin eine eindimensionale Spinkette, gehen aber vom klassischen XZ-Modell nun zu einem Heisenberg-Modell über. Es sind also auch Auslenkungen in azimuthaler Richtung möglich.

Das neue Bezugssystem äußert sich in einer Verschiebung des Polarwinkels. Die Domänenwand ist nun durch die neue Randbedingung bestimmt, daß der erste Spin um einen (festen) Polarwinkel von 0, der letzte um einen (festen) Winkel  $\pi$  gedreht sein soll, formal

$$\theta_1 = 0$$

$$\theta_n = \pi. \quad (4.1)$$

Die Form des Hamilton-Operators wird hierdurch nicht verändert, wir verwenden wei-

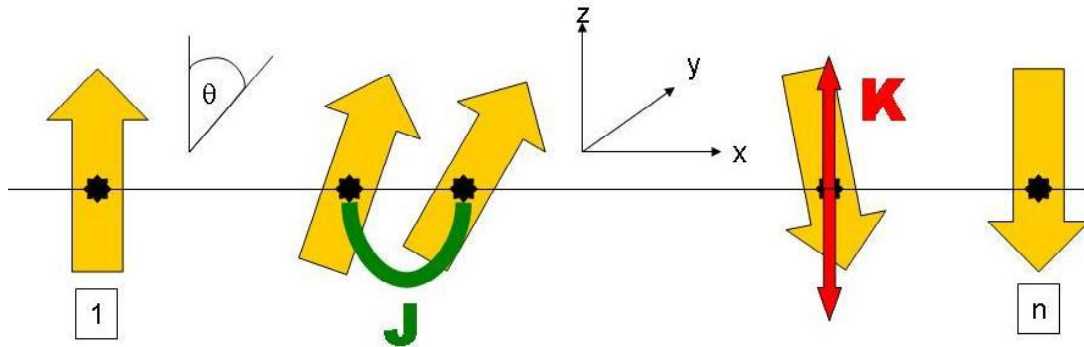


Abbildung 4.1: Lineare Spinkette mit Definitionen der Achsen. Es handelt sich um ein rechtshändiges Koordinatensystem.

terhin

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - K \sum_{i=1}^n (S_i^z)^2. \quad (4.2)$$

Hierbei stellt  $J$  wiederum die Skala der Nächster-Nachbar-Wechselwirkung (Heisenberg-Wechselwirkung) dar,  $K$  die Skala der Anisotropiewechselwirkung,  $\langle ij \rangle$  bedeutet Summierung nur über nächste Nachbarn,  $\mathbf{S}_i$  sei hier der Spinoperator des  $i$ -ten Gitterplatzes.

Im klassischen Fall ergibt sich die Energie zu<sup>1</sup>:

$$\frac{E_{cl}}{S^2} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - K \sum_{i=1}^n \cos^2 \theta_i. \quad (4.3)$$

Analog zu unseren früheren Betrachtungen ergibt sich auch hier die Minimierungsbedingung, indem man nach den Winkeln differenziert. Wir erhalten  $n - 2$  Gleichungen, da sowohl  $\theta_1$  als auch  $\theta_n$  fest seien.

$$0 = \frac{\partial(E_{cl}/S^2)}{\partial \theta_i} = K [\kappa \sin(\theta_i - \theta_{i-1}) + \kappa \sin(\theta_i - \theta_{i+1}) + \sin(2\theta_i)], \quad (4.4)$$

wo  $i = 2, 3, \dots, (n - 1)$ . Diese Grundlagen bilden den Ausgangspunkt für die 1/S-Entwicklung.

<sup>1</sup>Hierbei ist die Verschiebung der Winkel im Anisotropieterm zu beachten.

## 4.2 Die 1/S-Entwicklung

In diesem Abschnitt werden wir die Spinkette in genäherter Form betrachten und ein Lösungsverfahren zum Auffinden der Grundzustandsenergie und der magnetischen Anregungen herleiten.

### 4.2.1 Die Wintersche Drehung

Die Form (4.2) des Hamiltonoperators ist kein optimaler Ausgangspunkt für eine Störungstheorie, da die Lösung unbekannt ist und wir somit die Anregungen nicht nur schwer interpretieren könnten, sondern die Winkel der Spins gar als implizite Parameter in den Operatoren auftauchen. Winter (Win61) vereinfachte den Hamilton-Operator derart, daß er die Spinoperatoren um ihren klassischen Auslenkungswinkel zurückdrehte, formal also neue Spins  $\mathbf{s}$ , die

$$\mathbf{s}_i = R(-\theta_i \mathbf{e}_y) \mathbf{S}_i$$

erfüllen, einführte. Hierbei sei  $\mathbf{e}_y$  der Einheitsvektor in  $y$ -Richtung.

Durch diese Winter-Transformation führen wir unser System also von einem anisotropen Heisenberg-System mit globalen Wechselwirkungen und einem Grundzustand, in dem die Spins nicht allgemein in  $\uparrow$ - oder  $\downarrow$ - Richtung stehen, in ein formal anderes anisotropisches Heisenberg-System über, in welchem die Wechselwirkungen lokal sind (also noch von den Richtungswinkeln im Grundzustand abhängig), die Spins aber alle in  $\uparrow$ -Richtung stehen und unabhängig von den Winkeln sind. Der Azimutal- und Polwinkel sind nun als Wechselwirkungsparameter aufzufassen.

Die Lösung der eindimensionalen anisotropen Heisenberg-Spinkette mit nicht verdrehten Randbedingungen und globalen Wechselwirkungsparametern ist in 1/S-Näherung wohlbekannt; wir können dieses Wissen an geeigneter Stelle nutzen<sup>2</sup>.

Wenn man nun weiterhin die Leiteroperatoren

$$s_i^\pm = s_i^x \pm i s_i^y$$

einführt, erhalten wir nach etwas Algebra eine gedrehte Version des Hamilton-Operators.

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J \sum_{i=1}^{n-1} \left[ \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} + \{ \cos(\theta_i - \theta_{i+1}) - 1 \} \{ s_i^z s_{i+1}^z \right. \\ & + \frac{1}{4} (s_i^+ s_{i+1}^+ + s_i^+ s_{i+1}^- + s_i^- s_{i+1}^+ + s_i^- s_{i+1}^-) \} \\ & \left. - \frac{1}{2} \sin(\theta_i - \theta_{i+1}) (s_i^z s_{i+1}^+ + s_i^z s_{i+1}^- - s_i^+ s_{i+1}^z - s_i^- s_{i+1}^z) \right] \\ & - K \sum_{i=1}^n \left\{ \cos^2 \theta_i (s_i^z)^2 + \frac{1}{4} \sin^2 \theta_i [(s_i^+)^2 + (s_i^-)^2 + s_i^+ s_i^- + s_i^- s_i^+] \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \sin \theta_i \cos \theta_i (s_i^z s_i^+ + s_i^z s_i^- + s_i^+ s_i^z + s_i^- s_i^z) \right\} \end{aligned}$$

<sup>2</sup>Siehe hierzu auch Anhang A.

### 4.2.2 Die 1/S-Entwicklung

Mit Hilfe einer Holstein-Primakoff-Transformation in niedrigster Ordnung,

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar}s^z &= -S + n_a \\ \frac{1}{\hbar}s^- &= \sqrt{2S}a \\ \frac{1}{\hbar}s^+ &= \sqrt{2S}a^\dagger,\end{aligned}$$

kann man den Hamilton-Operator nun durch bosonische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausdrücken. Hierbei ist  $n_a = a^\dagger a$  der Besetzungszahloperator und es gelten die bosonischen Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned}[a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{ij} \\ [a_i, a_j] &= [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0.\end{aligned}\quad (4.5)$$

Für detaillierte Informationen siehe auch Anhang B. Man erhält für ein System aus  $n$  Spins

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \hbar^2 S^2 \left[ -J \sum_{i=1}^{n-1} \left\{ \cos(\theta_i - \theta_{i+1}) \right. \right. \\ &\quad - \frac{1}{\sqrt{2S}} \left( a_{i+1}^\dagger + a_{i+1} - a_i^\dagger - a_i \right) \sin(\theta_i - \theta_{i+1}) \\ &\quad - \frac{1}{S} (n_i + n_{i+1}) \cos(\theta_i - \theta_{i+1}) \\ &\quad + \frac{1}{2S} \left( a_i^\dagger a_{i+1}^\dagger + a_i^\dagger a_{i+1} + a_i a_{i+1}^\dagger + a_i a_{i+1} \right) \cos(\theta_i - \theta_{i+1}) \\ &\quad \left. - \frac{1}{2S} \left( a_i^\dagger a_{i+1}^\dagger - a_i^\dagger a_{i+1} - a_i a_{i+1}^\dagger + a_i a_{i+1} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\sqrt{2S^3}} \left( n_i a_{i+1}^\dagger + n_i a_{i+1} + -a_i^\dagger n_{i+1} - a_i n_{i+1} \right) \sin(\theta_i - \theta_{i+1}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{S^2} n_i n_{i+1} \cos(\theta_i - \theta_{i+1}) \right\} \\ &\quad - K \sum_{i=1}^n \left\{ \cos^2 \theta_i \right. \\ &\quad + \frac{2}{\sqrt{2S}} (a_i^\dagger + a_i) \sin \theta_i \cos \theta_i \\ &\quad + \frac{1}{S} \left( -2n_i \cos^2 \theta_i + \left( n_i + \frac{1}{2} \left( 1 + a_i^{\dagger 2} + a_i^2 \right) \right) \sin^2 \theta_i \right) \\ &\quad - \frac{1}{S} \sqrt{2S} \left( a_i^\dagger n_i + a_i n_i + n_i a_i^\dagger + n_i a_i \right) \sin \theta_i \cos \theta_i \\ &\quad \left. + \frac{1}{S^2} n_i^2 \cos^2 \theta_i \right\} \right].\end{aligned}\quad (4.6)$$

Diesen Ausdruck, der extrem unhandlich wirkt (und ist), wollen wir nun nach Ordnungen in  $1/\sqrt{S}$  aufschlüsseln. In der nullten Ordnung finden wir - wie zu erwarten - genau den Ausdruck für die klassische Energie, Gl. (4.3), wieder.

Wir wenden uns daher direkt der Ordnung  $1/\sqrt{S}$  zu. Auf den ersten Blick wirken diese Terme problematisch, da sie einzelne Erzeuger und Vernichter enthalten. Wir schreiben die Terme durch Zusammenfassung der Summen um und erhalten

$$\begin{aligned}\frac{1}{S^2} H_{0.5} &= \frac{K}{\sqrt{2S}} \left[ \sum_{i=2}^{n-1} \left( \kappa \sin(\theta_i - \theta_{i-1}) + \kappa \sin(\theta_i - \theta_{i+1}) + \sin(2\theta_i) \right) (a_i^\dagger + a_i) \right. \\ &\quad \left. - \sin(\theta_2 - \theta_1) (a_1^\dagger + a_1) + \sin(\theta_n - \theta_{n-1}) (a_n^\dagger + a_n) \right].\end{aligned}\quad (4.7)$$

Wir sehen, daß die Terme in der ersten Zeile von Gleichung (4.7) genau die Minimierungsbedingung im klassischen Fall ergeben, Gleichung (4.4), und somit im quantenmechanischen Fall nahe der klassischen Lösung selbst von der Ordnung 1/S sind.

Etwas schwieriger zu diskutieren sind die beiden Randterme. Im thermodynamischen Limes, hier also großen Systemen, gilt sicherlich immer, daß sich die Winkel des ersten und zweiten Spins beziehungsweise des vorletzten und letzten Spins kaum unterscheiden, so daß in diesem Falle auch diese Beiträge verschwindend klein sind. Für kleinere Systeme ist eine physikalisch schlüssige Argumentation bezüglich dieses Terms jedoch kaum möglich.

Man kann jedoch noch einen Schritt weitergehen, und die Spins an den Gitterplätzen 1 und  $n$  quantenmechanisch als immobil ansetzen, in Formeln  $\langle n_1 \rangle = 0$  und  $\langle n_n \rangle = 0$  für alle Zustände fordern. Ihr Einfluß ist dann auf eine Ankopplung am Rand beschränkt. Diese Vorgehensweise wäre insbesondere für schmale Domänenwände akzeptabel, wenn man bei den weit entfernten Spins am Rande nur extrem kleine Abweichungen von der einfachen Richtung findet.

In Abschnitt 5.1.1 werden wir die Frage der Behandlung dieser beiden Randspins wieder aufgreifen und zeigen, unter welchen Bedingungen genau die unteren beiden Terme von Gleichung (4.7) vernachlässigbar klein sind.

Zusammenfassend läßt sich also sagen, daß die obere Zeile von Gleichung (4.7) als von Ordnung  $1/\sqrt{S^3}$  betrachtet werden kann. Fallen auch die Terme in der unteren Zeile weg, so können wir die Entwicklung bis Ordnung 1/S betrachten und erhalten somit einen quadratischen Hamilton-Operator.

Die Terme der Ordnung 1/S sind

$$\begin{aligned}
 H_1 = & -J \sum_{i=1}^{n-1} \left[ \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) \left( -n_{i+1} - n_i + \frac{1}{2}(a_{i+1}^\dagger + a_{i+1})(a_i^\dagger + a_i) \right) \right. \\
 & \left. - \frac{1}{2}(a_{i+1}^\dagger - a_{i+1})(a_i^\dagger - a_i) \right] \\
 & + K \sum_{i=1}^n \left[ 2 \cos^2(\theta_i) n_i - \frac{1}{2} \sin^2(\theta_i) (a_i^\dagger + a_i)^2 \right]. \quad (4.8)
 \end{aligned}$$

Insgesamt betrachtet man nun den genäherten Hamilton-Operator,

$$\frac{1}{\hbar^2 S^2} \mathcal{H} = E_{cl} + \frac{1}{S} H_1 + O\left(\frac{1}{S^{3/2}}\right), \quad (4.9)$$

der hermitesch ist.

### 4.2.3 Entkoppelte Matrixform des Hamilton-Operators

Der in Gleichung (4.9) erhaltene Hamilton-Operator ist quadratisch in den bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren. Ein Schritt zur Diagonalisierung des Systems wäre sicherlich eine Fourier-Transformation, was wegen unseren Randbedingungen und den Anisotropie termen nicht möglich ist. Letzteres Problem soll im nächsten

Kapitel kurz angeschnitten werden.

Die Standardmethode zur Diagonalisierung quadratischer Hamilton-Operatoren ist die bosonische Bogoliubov-Transformation. Eingeführt wurde sie für den fermionischen Fall im Rahmen der Supraleitungstheorie (Bog58), doch läßt sie sich auch im hier vorliegenden Falle anwenden. Die allgemeine Form ist

$$\alpha_i = \sum (\lambda_{ij} a_j + \mu_{ij} a_j^\dagger), \quad \alpha_i^\dagger = \sum (\mu_{ij}^* a_j + \lambda_{ij}^* a_j^\dagger),$$

es werden also die Erzeuger und Vernichter gemischt. Als Randbedingung werden die kanonischen Vertauschungsrelationen erhalten, es sollte also für die neuen Operatoren ebenso (4.5) gelten. Damit ist es eine kanonische Transformation, sie kann also nach dem von Neumann-Theorem durch einen unitären *Operator* dargestellt werden. Nun ist es aber so, daß wir im Raum, der durch die  $a_i, a_i^\dagger$  aufgespannt wird, wie schon erwähnt Erzeuger und Vernichter mischen. In diesem Raum läßt sich die Transformation als eine lineare Transformation formulieren, die durch eine *Matrix*  $R$  ausgedrückt werden kann. Diese Matrix  $R$  ist im Allgemeinen nicht mehr unitär (Tik77).

Wir werden hier einen etwas abweichenden Weg von der üblichen Vorgehensweise wählen, der uns anstatt der Diagonalisierung einer großen  $2n \times 2n$ -Matrix die sukzessive Diagonalisierung zweier  $n \times n$ -Matrizen erlaubt. Im Grunde jedoch ist diese Transformation eine Bogoliubov-Transformation.

Ausgehend von der Beobachtung, daß das betrachtete System eine starke Ähnlichkeit mit dem quantenmechanischen harmonischen Oszillator hat, führt man „Ort“ und „Impuls“ ein<sup>3</sup>,

$$\begin{aligned} q_i &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(a_i^\dagger + a_i) \\ p_i &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(-a_i^\dagger + a_i). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Man rechnet leicht nach, daß diese die üblichen kanonischen Kommutatorrelationen erfüllen:

$$\begin{aligned} [p_i, q_i] &= i\hbar\delta_{ij} \\ n_i + \frac{1}{2} &= \frac{1}{2\hbar}(p_i^2 + q_i^2). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Schreibt man nun  $H_1$ , Gleichung (4.8), mit Hilfe dieser Größen um, so entkoppeln Orts- und Impulsanteile,

$$H_1 = \frac{1}{2\hbar} \mathbf{q}^T N \mathbf{q} + \frac{1}{2\hbar} \mathbf{p}^T M \mathbf{p} - \beta. \quad (4.12)$$

Es handelt sich hier offenbar um das aus der klassischen Mechanik bekannte Problem kleiner Schwingungen. Die Matrizen  $N$  und  $M$  sind hierbei  $n \times n$ -Matrizen,  $\beta$  ist ein

<sup>3</sup>Es ist offensichtlich so, daß  $p_i$  sich nur durch einen konstanten Faktor von  $s^y$  unterscheidet,  $q_i$  nur durch einen konstanten Faktor von  $s^x$ . Wir behalten dies im Hinterkopf und benutzen trotzdem die neue Notation, da die physikalischen und mathematischen Parallelen so offensichtlicher werden.

Skalar.  $N$  und  $M$  sind symmetrische reelle Matrizen, die jedoch nicht für alle Werte der Winkel positiv definit sind. Wir werden in Abschnitt 5.1.1 jedoch zeigen, daß sie im Falle der klassischen Lösung positiv semidefinit sind. Die Konsequenzen eventueller Nulleigenwerte werden wir in den folgenden Kapiteln in ihrem physikalischen Kontext diskutieren.

Die Matrizen sind gegeben durch

$$M = \begin{pmatrix} C_1 & 2B_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 2B_1 & C_2 & 2B_2 & 0 & & \\ 0 & 2B_2 & C_3 & 2B_3 & 0 & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & 2B_{n-1} \\ & & & & 2B_{n-1} & C_n \end{pmatrix},$$

$$N = \begin{pmatrix} C_1 + 4D_1 & 2A_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 2A_1 & C_2 + 4D_2 & 2A_2 & 0 & & \\ 0 & 2A_2 & C_3 + 4D_3 & 2A_3 & 0 & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & 2A_{n-1} \\ & & & & 2A_{n-1} & C_n + 4D_n \end{pmatrix},$$

sowie

$$\beta = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n C_i.$$

Die Größen  $A_i$ ,  $B_i$ ,  $C_i$  und  $D_i$  sind von den Winkeln und den Wechselwirkungsparametern wie folgt abhängig:

$$\begin{aligned} A_i &= -\frac{J}{2} \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) \\ B_i &= -\frac{J}{2} \\ C_i &= \begin{cases} 2K \cos^2 \theta_1 + J \cos(\theta_2 - \theta_1) & i = 1 \\ 2K \cos^2 \theta_i + J \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) + J \cos(\theta_i - \theta_{i-1}) & i = 2 \dots n-1 \\ 2K \cos^2 \theta_n + J \cos(\theta_n - \theta_{n-1}) & i = n \end{cases} \\ D_i &= -\frac{K}{2} \sin^2 \theta_i. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Damit ist das Problem in einen Orts- und einen Impulsanteil zerlegt.

#### 4.2.4 Diagonalisierung und Bemerkungen

Das Ziel der Diagonalisierung des Hamilton-Operators ist, wie bei den kleinen Schwingungen, im Allgemeinen nicht durch eine einzige orthonormale Transformation, die beide Matrizen in Diagonalf orm überführen würde, zu erreichen. Man benötigt zwei

sukzessive Hauptachsentransformationen. Wie gleich gezeigt wird, kann man deren sinnvolle Anwendung durch eine einfache Skalentransformation erreichen. Nehmen wir an, die Matrix der Impulse  $M$  sei diagonalisiert worden, mit Eigenwerten  $\lambda_i$ , und die Matrix des Ortes  $N$  sei transformiert worden,

$$\bar{N} = ONO^T ,$$

wo  $O$  die Transformation sei, die  $M$  diagonalisiert. Weiter seien

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{p}} &= O\mathbf{p} \\ \bar{\mathbf{q}} &= O\mathbf{q} \end{aligned}$$

die Impulse nach der Drehung.

Die Matrix  $\bar{N}$  ist im Allgemeinen nicht diagonal. Die Skalentransformation

$$\begin{aligned} \bar{P}_i &= \bar{p}_i \sqrt{\lambda_i} \\ \bar{Q}_i &= \frac{\bar{q}_i}{\sqrt{\lambda_i}} , \end{aligned} \quad (4.14)$$

die als Bedingung natürlich  $\lambda_i > 0$  fordert, erzeugt beim Impulsanteil eine Einheitsmatrix. Sie erhält trivialerweise die Kommutatorrelationen (4.11) und ist somit auch eine kanonische Transformation. Wir erhalten dann den folgenden Hamilton-Operator,

$$H_1 = \frac{1}{2\hbar} \sum_{i=1}^n \bar{P}_i^2 + \frac{1}{2\hbar} \bar{\mathbf{Q}}^T N' \bar{\mathbf{Q}} - \beta , \quad (4.15)$$

wobei  $N'$  gegeben ist durch

$$N'_{ij} = \sqrt{\lambda_i \lambda_j} \bar{N}_{ij} .$$

Der erste Term von (4.15) ist unter orthogonalen Transformationen invariant, so daß wir nun die Matrix  $N'$  diagonalisieren können. Ist dies getan, hat unser Hamilton-Operator schließlich die Form

$$H_1 = \frac{1}{2\hbar} \sum_{i=1}^n [P_i^2 + \gamma_i Q_i^2] - \beta .$$

Sind auch die Eigenwerte  $\gamma_i$  von  $N'$  größer als Null, ist eine Umschreibung auf die bosonische Ausdrucksweise möglich,

$$\begin{aligned} P_i &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2}} (b_i - b_i^\dagger) \gamma_i^{1/4} \\ Q_i &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (b_i + b_i^\dagger) \gamma_i^{-1/4} . \end{aligned} \quad (4.16)$$

Der diagonalisierte Hamilton-Operator läßt sich in der Form eines harmonischen Oszillators schreiben,

$$H_1 = \sum_{i=1}^n E_i (b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2}) - \beta ,$$



woraus sofort die Grundzustandsenergie zu

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n E_i - \beta \quad E_i = \sqrt{\gamma_i}$$

folgt.

Damit ist die Aufgabe prinzipiell gelöst. Im nächsten Kapitel werden wir und zunächst den Anregungsmoden (Magnonen) des Modells unter Annahme des klassischen Grundzustandes widmen. Der eigentlichen Frage nach dem quantenkritischen Verhalten der Wand widmet sich Kapitel 6.

## 4.3 Numerische Umsetzung

Eine übersichtliche und von Aufwand und Nutzen vertretbare analytische Lösung ist nur im Vierspinfall sinnvoll. Dieser Fall ist aus den schon genannten Gründen in seiner physikalischen Interpretation sehr problematisch, aber dennoch äußerst instruktiv, weshalb wir uns ihm im ersten Teil des nächsten Kapitels ausführlich widmen werden.

### Klassische Energie und Schwingungsmoden

Im allgemeinen Falle größerer Anzahlen von Spins ist daher eine numerische Lösung erforderlich, obwohl man auch hier einige analytische Aussagen in gewissen Limites treffen kann.

Da wir eine Entwicklung um die klassische Lösung durchführen, wurde zunächst eine Klasse<sup>4</sup> erstellt, die ein System, beschrieben durch seine Winkel und Wechselwirkungsparameter, bei der Erzeugung einer Instanz<sup>5</sup> klassisch energetisch minimiert und deren Winkel zur Verfügung stellt. Die Minimierung der klassischen Energie geschieht über den Polak-Ribière'schen Minimierungsalgorithmus (PTVF99), der sich zunutze macht, daß der Gradient der klassischen Energie analytisch bekannt ist. Diese Klasse (*punktC.h*) stellt auch alle direkt folgenden Größen zur Verfügung.

Aus dieser Klasse abgeleitet ist dann die Klasse *punktQM.h*, die die quantenmechanischen Algorithmen enthält. Mit Hilfe der *Matrix Template Library* (MTL) (Sie99) können die Matrizen dargestellt werden. Nun wurde ein Interface zum Linear Algebra Package (LAPACK) (ABB<sup>+</sup>99), welches in Fortran programmiert ist, entworfen, um die Diagonalisierungsroutine *dsyev* zu nutzen. Mit Hilfe dieser Programmierumgebung wurde ermöglicht, die Magnonenmoden im klassischen (oder auch jedem anderen Zustand) zu berechnen.

<sup>4</sup>Eine Klasse ist ein abstraktes Konstrukt aus der objektorientierten Theorie, das Informationen in Form von Variablen sowie Funktionen, die auf diese Variablen wirken, in ein Gesamtobjekt zusammenfaßt.

<sup>5</sup>Eine Instanz ist eine spezielle, wie eine Variable benannte Realisierung einer Klasse, enthält also konkrete Informationen in den Variablen und ggf. Unterfunktionen. Wird eine solche Instanz im Speicher des Computers erzeugt, können sofort erste Funktionen auf die übergebenen Werte reagieren und dadurch den konkreten Inhalt dieses Objektes bestimmen.

### Minimierungsalgorithmen für die quantenmechanische Energie

Da ad hoc der Gradient der quantenmechanischen Energie nicht bekannt ist, wird zum Auffinden des quantenmechanischen Grundzustandes zunächst der Powellsche *direction set*-Algorithmus genutzt (PTVF99). Hierbei wird entlang eines vorgegebenen Sets von Richtungen schrittweise minimiert.

Eine Möglichkeit, den Gradienten dennoch zu berechnen, stellt in einigen Fällen das Feynman-Hellmann-Theorem dar (Fey39). Seine Aussage ist kurz zusammenzufassen. Es sei ein Hamilton-Operator  $H_\lambda$  gegeben, der von einem Parameter  $\lambda$  abhängt. Ferner sei die Schrödinger-Gleichung  $H_\lambda \psi_\lambda = E_\lambda \psi_\lambda$  erfüllt. Dann gilt:

$$\frac{dE_\lambda}{d\lambda} = \frac{d}{d\lambda} \langle \psi_\lambda | H_\lambda | \psi_\lambda \rangle = \langle \psi_\lambda | dH_\lambda / d\lambda | \psi_\lambda \rangle .$$

Das Theorem läßt sich für unseren Fall mehrerer Parameter (der Winkel) und eines Gradienten nutzen. Dennoch ist eine Implementation nicht effektiv möglich. Das Problem in unserem Falle ist, daß Diagonalität des Hamilton-Operators nicht Diagonalität der Ableitungsmatrix impliziert. Man würde also die komplette Struktur des Grundzustandes benötigen, um den Erwartungswert des Gradienten zu berechnen. Der Implementationsaufwand deckt sich jedoch nicht mit dem Zeitgewinn durch ein *conjugate gradient*-Verfahren. Optimierungen wurden daher hauptsächlich durch geschickte Wahl der Richtungsmatrix im Powellschen Verfahren durchgeführt.

# 5 Magnonen im klassischen Grundzustand

Die erste Möglichkeit, die uns Modell und numerischer Rahmen bietet, ist auch der erste Test für die Richtigkeit unserer Überlegungen. In diesem Kapitel wollen wir die Anregungsmoden im klassischen Grundzustand berechnen, also kollektive Schwingungsmoden. Diese sind mit einer vollkommen anderen Methode in einer Serie von wissenschaftlichen Arbeiten von Niez *et al* schon berechnet worden. Niez bestimmte die Magnonenmoden über die Greenschen Funktionen im Liouville-Raum zunächst für den Fall einer Ising-artigen Wand (Nie76), erweiterte die Ergebnisse dann auf schmale Domänenwände (NFA77) und stellte, was wir bestätigen werden, die Existenz einer Goldstone-Mode fest. In seiner ausführlichsten Arbeit (NAFL78) faßt er schließlich die kompletten Ergebnisse seiner Arbeit zusammen und untersucht die Natur der Magnonen näher. Die Goldstone-Mode wird darin durch ein demagnetisierendes Feld gehoben, ein Hilfsmittel, zu dem auch diese Arbeit greifen wird.

Bevor wir in diesem Kapitel Niez' Resultate bestätigen und erweitern wollen, müssen wir uns zunächst nochmals mit der schon aufgeworfenen Frage der Behandlung der Randterme befassen. Wir werden zeigen, daß im thermodynamischen Limes die Matrizen positiv semidefinit werden und im weiteren, daß ein Festhalten der Randspins nichts anderes ist als der Limes eines unendlich großen lokalen magnetischen Feldes an den äußeren beiden Gitterplätzen. Als nächstes werden wir uns mit dem Fall von vier Spins beschäftigen, da sich dieser mit festgehaltenen Randspins recht einfach analytisch lösen läßt und exemplarisch alle relevanten Effekte aufzeigt. Schließlich wenden wir uns dem allgemeinen Fall und dem thermodynamischen Limes zu.

## 5.1 Ein erneuter Blick auf die Randspins

In kleinen Systemen tritt in der Matrix  $M$  ein negativer Eigenwert auf. Dies ist natürlich fatal für unser Lösungsverfahren, doch die Ursache ist leicht gefunden. Es sind die beiden schon kurz diskutierten Randterme, die nicht durch die Minimierungsbedingung wegdiskutiert werden können. Im Folgenden wollen wir zunächst zeigen, daß dieser Effekt, wie zu erwarten, im thermodynamischen Limes verschwindet. Danach soll eine Methode gezeigt werden, mit Hilfe derer kleine Systeme trotzdem berechnet werden können.

### 5.1.1 Der thermodynamische Limes

Unter welchen Bedingungen ist ein Modell mit beweglichen Randspins schon durch die Vorgabe der klassischen Domänenwandlösung stabil, und inwieweit dürfen die vernachlässigten Randterme in  $H_{0,5}$  wirklich vernachlässigt werden?

Wir hatten bezüglich dieser Frage eben diskutiert, daß in kleinen Systemen in  $M$  tatsächlich negative Eigenwerte auftreten, im 4-Spin-Fall passiert dies zum Beispiel oberhalb von  $\kappa = \sqrt{2}$ .

Das Modell liefert dort also keine physikalisch sinnvolle Beschreibung, jedoch ist die Interpretation, daß für 4 Spins unterhalb dieses Wertes die Anisotropie stark genug ist, die Domänenwandform aufrecht zu erhalten und diese dann aufgrund stärkerer Austauschwechselwirkung zusammenbricht, sicher - trotzdem sie naheliegend scheint - nicht die eigentliche Antwort. Der wirkliche Fehler liegt in den schon in der Einleitung zu diesem Abschnitt erwähnten Randtermen.

Numerische Untersuchungen deuten darauf hin, daß der niedrigste Eigenwert der Matrix  $M$ , also der Impulsmatrix, bei einem Wert von  $\kappa = 1.5$ , also am kritischen Punkt, im thermodynamischen Limes gegen Null geht, siehe 5.1. Ebenso zeigt sich numerisch, daß dieser niedrigste Eigenwert bei Null bliebe.

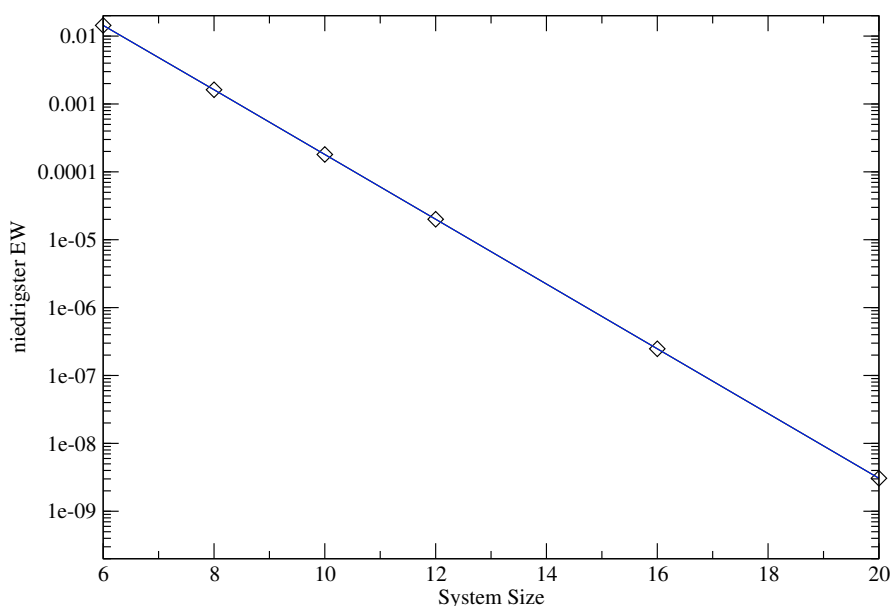


Abbildung 5.1: Die Beträge der niedrigsten Eigenwerte am kritischen Punkt für verschiedene Systemgrößen mit beweglichen Randspins. Offenbar liegt ein exponentieller Abfall vor.

Diesen Sachverhalt wollen wir nun analytisch beweisen. Wir betrachten dazu die Ising-Lösung am thermodynamischen kritischen Punkt. Setzt man für die Winkel 0 respektive  $\pi$  ein, so erhält man  $C_1 = 3.5 = C_n$ ,  $C_{n/2} = 2 = C_{n/2-1}$ ,  $C_i = 5$  sonst und  $2B = -1.5$ . Da wir das charakteristische Polynom betrachten wollen, definieren zur Vereinfachung



Dabei haben wir neue Bezeichnungen eingeführt:

$$\begin{aligned} x &= -\frac{b}{z} \\ l &= \frac{n}{2} - 2, \end{aligned}$$

sowie  $S_i$  als Bezeichnung für die uns schon wohlbekannten Chebyshev'schen Polynome 2. Art. Dieser Ausdruck soll nun gleich 0 sein, und wir können zunächst die Divergenz der Determinante via Division durch  $z^{n-4}$  beseitigen. Als nächstes sieht man leicht, daß an der Stelle  $\lambda = 0$  der Wert  $x = \frac{10}{3}$  erreicht wird, so daß wir außerhalb des Bereiches der Nullstellen der  $S_n$  liegen<sup>1</sup>. Wir können also  $S_{l-1}^2$  ebenso herausdividieren und definieren das Verhältnis der Polynome

$$f_l = \frac{S_l}{S_{l-1}}.$$

Wir erhalten

$$0 = (c^2 - z^2)(af_l + z)^2 + \frac{2cz}{f_{l-1}}(af_l + z)(af_{l-1} + z) + \frac{z^2}{f_{l-1}^2}(af_{l-1} + z)^2$$

Gehen wir nun davon aus, daß ein Limes  $f_\infty$  existiert, so folgt, daß die Terme  $af_\infty + z$  wegfallen und wir erhalten die einfachere Gleichung

$$0 = (c^2 - z^2) + \frac{2cz}{f_\infty} + \frac{z^2}{f_\infty^2}. \quad (5.1)$$

Gleichzeitig folgt aus der Rekursionsbeziehung für die Polynome

$$f_\infty^2 - f_\infty x + 1 = 0, \quad (5.2)$$

also

$$f_\infty = \frac{x}{2} \pm \sqrt{\frac{x^2}{4} - 1}. \quad (5.3)$$

Setzen wir in (5.3) in  $b$  und  $z$  nun  $\lambda = 0$  ein, so erhalten wir 3 und  $\frac{1}{3}$  als Lösung für  $f_\infty$  in (5.2). Setzen wir nun die Lösung  $f_\infty = 3$  wiederum in (5.1) ein, ergibt sich ein glattes

$$0 = 0,$$

womit unter Berücksichtigung der numerischen Ergebnisse bewiesen ist, daß der niedrigste Eigenwert im thermodynamischen Limes bei  $\kappa = 1.5$  gegen Null geht.

Nun wollen wir noch den Fall  $J \rightarrow \infty$  betrachten. In diesem Limes werden die Differenzen aller benachbarter Winkel gleich groß, im thermodynamischen Limes gehen diese dann gegen Null. Somit läßt sich für die Winkel schreiben:

$$\phi_i = (i-1) \frac{\pi}{n-1}.$$

<sup>1</sup>Zu den Eigenschaften der Polynome siehe (AS72).

Somit sind dann

$$\begin{aligned}
 A_i &= \left(-\frac{\kappa}{2}\right)K = B_i \\
 C_1 &= (2 + \kappa)K = C_n \\
 C_i &= \left(2 \cos^2 \left(\frac{(i-1)\pi}{n-1}\right) + 2\kappa\right)K \\
 D_i &= \left(-\frac{1}{2} \sin^2 \left(\frac{(i-1)\pi}{n-1}\right)\right)K .
 \end{aligned}$$

Bilden wir nun den Limes  $\kappa \rightarrow \infty$  bei konstantem  $K$ , so sehen wir, daß sowohl die konstanten Anteile als auch die nach oben beschränkten trigonometrischen Funktionen vernachlässigbar kleine Anteile liefern, also für die Betrachtung wegfallen können. Es bleibt uns also eine Determinante

$$D = \kappa^n \begin{vmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & \ddots & -1 & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{vmatrix} .$$

Diese Determinante<sup>2</sup> ist für alle  $n$  gleich Null, wie einfach mit vollständiger Induktion gezeigt werden kann.

Damit ist schlußendlich bewiesen, daß im thermodynamischen Limes die Vorgabe der Domänenwandform ausreichend ist, um physikalisch sinnvolle Lösungen zu berechnen. Das Modell ist dann anwendbar.

### 5.1.2 Endliche Systeme: Stabilisierung durch ein Magnetfeld?

Wie kann es uns nun gelingen, eine konsistente Lösung für kleinere Systeme zu finden? Intuitiv kann man vermuten, daß dem klassischen Falle von Randspins mit festgelegtem Winkel im quantenmechanischen ein Fall entspräche, in dem

$$\langle n_1 \rangle = \langle n_n \rangle = 0 ,$$

sowie (festgelegt)

$$\theta_1 = 0 \text{ und } \theta_n = \pi .$$

Dies ist sicher unphysikalisch, kann jedoch motiviert und hergeleitet werden durch die Einführung eines lokalen magnetischen Feldes an den Gitterplätzen 1 und  $n$ , in Form eines Termes

$$H_R = B\hat{\epsilon}_z (\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_n) .$$

Lassen wir nun  $B \rightarrow \infty$  gehen (schon im ursprünglichen Hamiltonian), so sehen wir schnell, daß in erster Ordnung nur  $H_R$  die Physik bestimmt. Es ist jedoch hier keine

<sup>2</sup>Übrigens wieder eine eines Tight-Bindung-Modells.

Wechselwirkung enthalten, so daß das starke Magnetfeld die Spins 1 und  $n$  an ihrem Platz festhält, die oben genannten Erwartungswerte gehen also tatsächlich gegen Null. Diese Betrachtung ändert nichts an der Tatsache, daß dieser Fall - zumindest in sehr kleinen (4-6 Spins) Systemen - offenbar unphysikalisch ist. Eine mögliche Interpretation wäre beispielsweise die Ankopplung eines Materials mit sehr viel stärkerer Anisotropie oder auch Austauschwechselwirkung, wobei im letzten Falle ein äußeres Feld im Bereich dieser Substanz angelegt sein müßte. Dennoch wollen wir ihn im nächsten Abschnitt exemplarisch betrachten. Es ist die einzige Möglichkeit, diese Systeme mit unserer Methode konsistent zu berechnen.

## 5.2 Analytische Lösung des 4-Spin-Problems

Wir wollen uns nun – vor allem seiner Einfachheit wegen – dem 4-Spin-Fall zuwenden. Außerdem ist er exemplarisch und illustriert weitere Modifikationen an unserem Modell, bevor wir uns wieder dem allgemeinen Fall zuwenden. Gemäß unsere Betrachtung aus Sektion 5.1.2 setzen wir

$$\langle n_1 \rangle = \langle n_4 \rangle = 0 ,$$

da eine Berechnung sonst zu negativen Eigenwerten der Matrizen  $M$  und  $N$  führt.

### 5.2.1 Berechnung und Ergebnisse

#### Ergebnisse des klassischen Falles

Da wir im Folgenden zunächst betrachten wollen, welche Anregungen es in dem Falle gibt, in dem das System im klassischen Minimum verweilt, wollen wir dieses hier herleiten. Wir setzen hierbei Symmetrie der Lösung ( $\theta_2 = \pi - \theta_3 =: x$ ) voraus.

Die Ableitung der klassischen Energie (4.3) soll 0 sein:

$$0 = 2K \sin(x)(\kappa - 2\kappa \cos(x) + 2 \cos(x)) .$$

Diese Gleichung wird gelöst durch

$$x = \begin{cases} 0 & \kappa \leq 2 \\ \arccos\left(\frac{\kappa}{2(\kappa-1)}\right) & \kappa > 2 . \end{cases}$$

#### Magnonenspektrum

Wir müssen die beiden Bereiche (Ising und Domänenwand, DW) getrennt betrachten und beginnen mit dem Ising-Bereich. Setzen wir also in (4.13) 0 und  $\pi$  für die beweglichen Winkel ein, so erhalten wir

$$\begin{aligned} A_2^I &= \frac{J}{2} = -B_2^I \\ C_2^I &= 2K = C_3^I \\ D_2^I &= 0 = D_3^I , \end{aligned}$$



also sehr einfache Matrizen  $M^I$  und  $N^I$ , die in diesem Falle durch dieselbe orthogonale Transformation diagonalisiert werden können. Wir erhalten sofort die Eigenwerte

$$\begin{aligned}\lambda_2^I &= 2K + J & \lambda_3^I &= 2K - J \\ \alpha_2^I &= 2K - J & \alpha_3^I &= 2K + J\end{aligned}\quad (5.4)$$

und daraus die möglichen Magnonfrequenzen

$$\omega_{2/3}^I = K\sqrt{(2 - \kappa)(2 + \kappa)}. \quad (5.5)$$

Offenbar sind die Frequenzen im Ising-Bereich entartet. Dies ist auf die hohe Symmetrie der Anordnung zurückzuführen, und wir werden später darauf zurückkommen.

Im zweiten Bereich, dem DW-Bereich, ergibt sich aus (4.13)

$$\begin{aligned}A_2^{II} &= J \left( \left( \frac{J}{2(J-K)} \right)^2 - \frac{1}{2} \right) \\ B_2^{II} &= -\frac{J}{2} \\ C_2^{II} &= C_3^{II} = J \\ D_2^{II} &= D_3^{II} = -\frac{K}{2} + \frac{KJ^2}{8(J-K)^2}.\end{aligned}$$

Wieder sind unsere Matrizen simultan diagonalisierbar, diesmal mit den Eigenwerten

$$\begin{aligned}\lambda_2^{II} &= 2J & \lambda_3^{II} &= 0 \\ \alpha_2^{II} &= K \frac{4-8\kappa+3\kappa^2}{2(\kappa-1)} & \alpha_3^{II} &= K \frac{-4+8\kappa-3\kappa^2+\kappa^3}{2(\kappa-1)^2}.\end{aligned}\quad (5.6)$$

Gehen wir wie üblich weiter vor, stoßen wir mit der 0 auf ein Problem: Unsere Skalentransformation scheint keinen Sinn mehr zu machen. Würden wir jedoch ein sehr kleines  $h > 0$  einführen und bei  $C_2$  den Wert  $J + h$  einsetzen, so wäre  $\lambda_2^{II}$  nicht mehr gleich Null und wir könnten wie geplant weiter vorgehen. Da wir jedoch für jedes  $h > 0$  nun ein eindeutiges Ergebnis erhalten, können wir analytisch fortsetzen auf  $h = 0$ . Dies ist die naheliegendste Regularisierungsmethode.

Wir erhalten also letztendlich

$$\begin{aligned}\omega_2^{II} &= K\sqrt{2\kappa\left(\frac{4-8\kappa+3\kappa^2}{2(\kappa-1)}\right)} \\ \omega_3^{II} &= 0.\end{aligned}\quad (5.7)$$

Die berechneten Frequenzen in beiden Bereichen sind in Abb. 5.2 graphisch dargestellt. Offenbar sind beide Moden am (klassischen) kritischen Punkt Null und laufen dann auseinander, wobei eine Frequenz bei Null bleibt. Das System enthält eine Goldstone-Mode und ist somit instabil. Hierfür ist nach dem Goldstone-Theorem (GSW62) eine spontan gebrochene Symmetrie verantwortlich, bei uns die Tatsache, daß der Azimutalwinkel weder durch den Hamilton-Operator (4.2) noch durch die Randbedingungen (4.1) festgelegt wird. Die Ursache dafür ist darin zu suchen, daß wir zwar eine einfache Achse definiert haben, aber keine harte Achse. Somit haben eine Néel- und eine Bloch-Wand sowie Zwischenzustände genau dieselben Energien, anders ausgedrückt, werden alle Spins um einen Azimutwinkel  $\psi$  gedreht, so bleibt die Energie

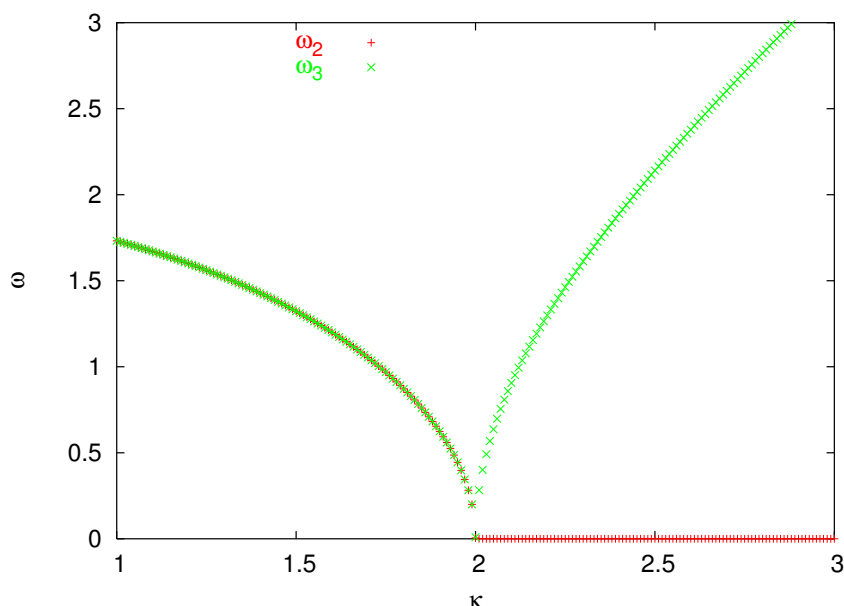


Abbildung 5.2: Die beiden Magnonenmoden für 4 Spins. Unterhalb von  $\kappa_c = 2$  liegt Entartung vor, oberhalb erhalten wir zwei verschiedene Frequenzen, von denen eine immer Null bleibt.

der Anordnung dieselbe. Der Grundzustand ist also unendlich entartet. Die Form der Domänenwand ist nicht klar festgelegt, die Magnonen ermöglichen Übergänge zwischen diesen Wandtypen. Im Ising-Fall tritt die Goldstone-Mode natürlich nicht auf, da bei entlang der  $z$ -Richtung orientierten Vektoren eine Azimuthaldrehung nichts bewirkt. Die Symmetrie kann durch Einführung einer harten Achse, also eines demagnetisierenden Feldes, gebrochen werden. Dies wird in Abschnitt 5.2.2 dem Modell hinzugefügt. Unterhalb des kritischen Punktes tritt eine Entartung auf. Niez erklärt diesen Effekt durch einen genaueren Blick auf die Natur der Spins als Pseudovektoren. Spiegelt man nämlich das System an der Wandebene<sup>3</sup>, so erhält man dank der Axialnatur der Spins dasselbe System wieder. Die bedeutet Symmetrie unter eine nullparametrischen Gruppe, also zweifache Entartung. Diese Aussage wird im nächsten Abschnitt überprüft werden.

### Struktur der Anregungen

Wie sehen die Moden nun genau aus? Dazu betrachten wir, wie die neuen Erzeuger und Vernichter  $b$  durch die Transformationen aus den alten Erzeugern und Vernichtern  $a$  hervorgehen.

Durch eine orthogonale Transformation

$$\theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

<sup>3</sup>Eine Spiegelung an der Ebene ist die Kombination einer Raumspiegelung (Inversion) und einer 180 Grad-Drehung.

werden beide Matrizen gleichzeitig diagonalisiert:

$$M_d = \mathcal{O}M\mathcal{O}^T \quad \text{und} \quad N_d = \mathcal{O}N\mathcal{O}^T .$$

Danach wird noch die Skalentransformation wie in (4.15) durchgeführt, so daß wir schließlich gedrehte Impulse/Orte erhalten.

$$\begin{aligned} P_2 &= i\frac{\sqrt{\hbar\lambda_2}}{2}(a_2 + a_3 - a_2^\dagger - a_3^\dagger) \\ Q_2 &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{\lambda_2}}(a_2 + a_3 + a_2^\dagger + a_3^\dagger) \\ P_3 &= i\frac{\sqrt{\hbar\lambda_3}}{2}(-a_2 + a_3 + a_2^\dagger - a_3^\dagger) \\ Q_3 &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{\lambda_3}}(-a_2 + a_3 - a_2^\dagger + a_3^\dagger) . \end{aligned}$$

Betrachten wir nun noch die Rücktransformation von (4.16),

$$\begin{aligned} b_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\gamma_i^{1/4} \left( Q_i + i\gamma_i^{-1/2}P_i \right) \\ b_i &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\gamma_i^{1/4} \left( Q_i - i\gamma_i^{-1/2}P_i \right) , \end{aligned}$$

können wir die neuen bosonischen Operatoren durch die alten ausdrücken. Dazu definieren wir ( $\gamma_i = \lambda_i\alpha_i$ )

$$W_{i\pm} = \sqrt[4]{\frac{\alpha_i}{\lambda_i}} \pm \sqrt[4]{\frac{\lambda_i}{\alpha_i}}$$

und erhalten nach kurzer Rechnung für die Operatoren  $b$

$$\begin{aligned} b_2^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left( (a_2^\dagger + a_3^\dagger)W_{2+} + (a_2 + a_3)W_{2-} \right) \\ b_2 &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left( (a_2^\dagger + a_3^\dagger)W_{2-} + (a_2 + a_3)W_{2+} \right) \\ b_3^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left( (-a_2^\dagger + a_3^\dagger)W_{3+} + (-a_2 + a_3)W_{3-} \right) \\ b_3 &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left( (-a_2^\dagger + a_3^\dagger)W_{3-} + (-a_2 + a_3)W_{3+} \right) \end{aligned}$$

beziehungsweise für  $a$

$$\begin{aligned}
 a_2^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left( W_{2+} b_2^\dagger - W_{2-} b_2 - W_{3+} b_3^\dagger + W_{3-} b_3 \right) \\
 a_2 &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left( -W_{2-} b_2^\dagger + W_{2+} b_2 + W_{3-} b_3^\dagger - W_{3+} b_3 \right) \\
 a_3^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left( W_{2+} b_2^\dagger - W_{2-} b_2 + W_{3+} b_3^\dagger - W_{3-} b_3 \right) \\
 a_3 &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left( -W_{2-} b_2^\dagger + W_{2+} b_2 - W_{3-} b_3^\dagger + W_{3+} b_3 \right)
 \end{aligned}$$

Es macht natürlich mehr Sinn, die unteren Gleichungen zu verwenden, da der Grundzustand des harmonischen Oszillators, den wir dann erhalten, selbstverständlich in der neuen Basis zu schreiben ist. Uns interessieren nun die Erwartungswerte für  $s_2$  und  $s_3$ , die Spins im Winter-gedrehten System nach 4.2.1, in diesem quantenmechanischen Zustand, wie auch in angeregten Zuständen, um zu sehen, wie die Moden wirken.

Wir schreiben die Basis der Fock-Räume, die durch  $b_i$  aufgespannt werden, nun als  $|\mu\nu\rangle$ , wobei  $\mu$  die Zahl der durch  $b_2^\dagger$  erzeugten Bosonen,  $\nu$  die Zahl der durch  $b_3^\dagger$  erzeugten Bosonen sei. Die Komponenten der Spins sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
 s_2^x &= \hbar \sqrt{\frac{S}{2}} (a_2^\dagger + a_2) = \frac{\hbar \sqrt{S}}{2} \left( \sqrt[4]{\frac{\lambda_2}{\alpha_2}} (b_2 + b_2^\dagger) - \sqrt[4]{\frac{\lambda_3}{\alpha_3}} (b_3 + b_3^\dagger) \right) \\
 s_2^y &= \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{S}{2}} (a_2^\dagger - a_2) = \frac{i \hbar \sqrt{S}}{2} \left( \sqrt[4]{\frac{\alpha_2}{\lambda_2}} (b_2 - b_2^\dagger) - \sqrt[4]{\frac{\alpha_3}{\lambda_3}} (b_3 - b_3^\dagger) \right) \\
 s_i^z &= \hbar(-S + n_i).
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

Dabei ist

$$\begin{aligned}
 n_2 &= a_2^\dagger a_2 \\
 &= \frac{1}{8} (W_{2-}^2 b_2 b_2^\dagger - W_{2-} W_{2+} b_2^2 - W_{2-} W_{3-} b_2 b_3^\dagger + W_{2-} W_{3+} b_2 b_3 \\
 &\quad + W_{2+}^2 b_2^\dagger b_2 - W_{2-} W_{2+} b_2^{\dagger 2} + W_{2+} W_{3-} b_2^\dagger b_3^\dagger - W_{2+} W_{3+} b_2^\dagger b_3 \\
 &\quad - W_{2-} W_{3-} b_2^\dagger b_3 + W_{2+} W_{3-} b_2 b_3 + W_{3-}^2 b_3 b_3^\dagger - W_{3-} W_{3+} b_3^2 \\
 &\quad + W_{2-} W_{3+} b_2^\dagger b_3^\dagger - W_{2+} W_{3+} b_2 b_3^\dagger + W_{3+}^2 b_3^\dagger b_3 - W_{3-} W_{3+} b_3^{\dagger 2}).
 \end{aligned}$$

Für den 3. Spin ändern sich die Vorzeichen der  $b_3$ -Anteile in der  $x$  und  $y$ -Komponente: Sie kehren sich um. Die  $b_2$ -Anteile bleiben gleich. In  $n_3$  drehen sich dann folgerichtig nur die Vorzeichen der *gemischten* Terme.

Betrachten wir zunächst den Bereich  $\kappa < 2$ . Dort ist der Grundzustand eindeutig als  $|00\rangle$  gegeben. Die Erwartungswerte von  $s^x$  und  $s^y$  verschwinden dann (da sie linear in den Erzeugern und Vernichtern sind), doch der Erwartungswert des  $z$ -Anteils wird

(Beitrag der  $b_i b_i^\dagger$ -Terme)

$$\langle 00 | s_i^z | 00 \rangle = -S + \frac{1}{4} \left( \sqrt{\frac{2-\kappa}{2+\kappa}} + \sqrt{\frac{2+\kappa}{2-\kappa}} - 2 \right).$$

Zunächst bedeutet das, daß die Amplitude des z-Anteils verringert wird: Der Spin präzediert also um die klassische Richtung (um die z-Achse im Winter-gedrehten System, durch Rückdrehung dann um die klassische feste Position). Das sind aber gerade die in einem harmonischen Oszillator immer vorhandenen Nullpunktsschwingungen. Bemerkenswert ist an dieser Stelle die Tatsache, daß für  $\kappa \rightarrow 2$  dieser Wert gegen unendlich geht. Wir sollten hierbei nie vergessen, daß wir eine  $1/S$ -Näherung betrachten, deren klassische Lösung dort einen kritischen Punkt voraussagt. Die Fluktuationen müssen dort also sehr groß werden.

Um die Natur der Präzessionen besser zu verstehen, wollen wir nun noch das Schwankungsquadrat, in unserem Falle einfach die Erwartungswerte der Operatorquadrate der jeweiligen Richtung, Gleichungen (5.8), berechnen. Da nur der Grundzustand betrachtet wird, arbeiten wir nur mit den teilchenzahlerhaltenden Termen,

$$\begin{aligned} \langle 00 | (s_i^x)^2 | 00 \rangle &= \frac{\hbar^2 S}{4} \langle 00 | \sqrt{\frac{\lambda_2}{\alpha_2}} (1 + 2b_2^\dagger b_2) + \sqrt{\frac{\lambda_3}{\alpha_3}} (1 + 2b_3^\dagger b_3) | 00 \rangle \\ &= \frac{\hbar^2 S}{4} \left( \sqrt{\frac{\lambda_2}{\alpha_2}} + \sqrt{\frac{\lambda_3}{\alpha_3}} \right) \\ \langle 00 | (s_i^y)^2 | 00 \rangle &= \frac{\hbar^2 S}{4} \langle 00 | \sqrt{\frac{\alpha_2}{\lambda_2}} (1 + 2b_2^\dagger b_2) + \sqrt{\frac{\alpha_3}{\lambda_3}} (1 + 2b_3^\dagger b_3) | 00 \rangle \\ &= \frac{\hbar^2 S}{4} \left( \sqrt{\frac{\alpha_2}{\lambda_2}} + \sqrt{\frac{\alpha_3}{\lambda_3}} \right). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Zwei Schlußfolgerungen sind hier angebracht. Zum einen ist durch die Form der Eigenwerte die Präzession isotrop, da die Schwankungsquadrate in x- und y-Richtung den selben Betrag haben, vergleiche Gl. (5.4)<sup>4</sup>. Die zweite Schlußfolgerung ist nicht ganz so trivial. Betrachten wir reine Zustände, so zeigt sich, daß die Schwankungsquadrate der beiden energetisch entarteten Magnonenmoden nicht gleich sind, sondern durch Austausch von x und y-Komponenten ineinander übergeführt werden. Die zweifache Entartung stammt also nicht, wie ursprünglich angenommen, von der axialen Natur der Spinvektoren her, sondern hat ihre Ursache in der Gleichwertigkeit zweier aufeinander senkrechter Raumrichtungen. Die Annahme von Niez trifft den Punkt hier nicht genau. Kehren wir wieder zurück zu den Erwartungswerten der Operatoren (5.8), so stellen wir fest, daß einzelne Anregungen  $|ij\rangle$  als reine Zustände nichts ändern, außer einer Erhöhung des Erwartungswertes von  $S_z$ . Wir müssen aber bedenken, daß die physikalische Realität aufgrund der Entartung der Frequenzen jeder Energie mehrere Zustände zugeordnet werden können, auch höhere Zustände weisen also Entartung auf. Es tritt

<sup>4</sup>In einem klassischen Bild beschreibt der Spin also eine Kreisbahn.

dabei ein bemerkenswerter Effekt auf. Betrachten wir einen Zustand, in dem eine Anregung der Energie  $\sqrt{(2-\kappa)(2+\kappa)}$  vorhanden sei:

$$\xi_1 = d_1|10\rangle + d_2|01\rangle .$$

Da im Ising-Bereich

$$W_{2+} = W_{3+} =: W_+ \quad \text{und} \quad W_{2-} = -W_{3-} =: W_-$$

gilt, lassen sich die Operatoren  $n_2$  und  $n_3$  vereinfachen zu

$$\begin{aligned} n_2 &= \frac{1}{8}(W_-^2(b_2b_2^\dagger + b_2b_3^\dagger + b_2^\dagger b_3 + b_3b_3^\dagger) \\ &\quad + W_+^2(b_2^\dagger b_2 - b_2^\dagger b_2 - b_2b_3^\dagger + b_3^\dagger b_3) + \text{NME}) \\ n_3 &= \frac{1}{8}(W_-^2(b_2b_2^\dagger - b_2b_3^\dagger - b_2^\dagger b_3 + b_3b_3^\dagger) \\ &\quad + W_+^2(b_2^\dagger b_2 + b_2^\dagger b_2 + b_2b_3^\dagger + b_3^\dagger b_3) + \text{NME}') , \end{aligned}$$

wo NME nicht teilchenzahlerhaltende Terme sind. Diese Form der Zähloperatoren erbringt aber ein interessantes Ergebnis, betrachten wir den Erwartungswert im Zustand  $\xi_1$ :

$$\begin{aligned} \langle \xi_1 | n_2 | \xi_1 \rangle &= \frac{1}{8}(W_-^2(4 - d_2^* d_1 - d_1^* d_2) + W_+^2(2 + d_2^* d_1 + d_1^* d_2)) \\ \langle \xi_1 | n_3 | \xi_1 \rangle &= \frac{1}{8}(W_-^2(4 + d_2^* d_1 + d_1^* d_2) + W_+^2(2 - d_2^* d_1 - d_1^* d_2)) . \end{aligned}$$

Offenbar liegt auch hier Präzession vor, doch ist die Symmetrie für bestimmte Werte der  $d_i$  gebrochen.

Betrachten wir nun den Bereich  $\kappa \geq 2$ . Hier können beliebig viele Anregungen erzeugt werden - Die 1/S-Näherung bricht vollkommen zusammen. Der Grund dafür ist jedoch ersichtlich. Zunächst geht, da  $\lambda_3 \rightarrow 0$ , die Amplitude der  $b_3$ -Operatoren in  $s^x$  gegen 0, in  $s^y$  aber gegen unendlich. Außerdem müssen wir von einem Grundzustand der folgenden Form ausgehen:

$$\xi_0 = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n=0}^{\infty} c_n |0n\rangle ,$$

wo die  $c_n$  komplexe Amplituden sind. Vergleichen wir nun die Wirkung von  $s^y$  auf beispielsweise  $|0i\rangle$  und  $|0(i+1)\rangle$ , so sehen wir schnell, daß sich im Erwartungswert ein Term der Art

$$\sqrt{i+1}(c_{i+1}^* c_i + c_{i+1} c_i^*)$$

ergibt. Der Erwartungswert von  $s^y$  verschwindet hier im Allgemeinen nicht, so daß offenbar unsere Vermutung direkt nach der Entdeckung der Goldstone-Mode richtig war: Wir haben einen Freiheitsgrad offengelassen, eine Symmetrie, die zu diesem Effekt führt. Als letztes wäre noch die Bedeutung der zweiten Mode zu diskutieren; diese Diskussion macht natürlich erst Sinn, wenn die Azimuthalsymmetrie gebrochen ist. Wir besprechen diese Mode dann im nächsten Abschnitt.

### 5.2.2 Das demagnetisierende Feld

Um die Symmetrie zu brechen, also die Goldstone-Mode auf einen endlichen Wert zu heben, addieren einen weiteren Term zu unserem ursprünglichen Hamilton-Operator (4.2)

$$H_d = \sum_{i=1}^n K_d (S_i^y)^2 \quad (5.10)$$

hinzu, der uns offensichtlich die y-Achse als harte Achse definiert. Im Formalismus der 1/S-Entwicklung wird dieser Ausdruck schließlich zu

$$H_d = \frac{\hbar}{S} \sum_{i=1}^n K_d p_i^2.$$

Zusätzlich definieren wir analog  $\kappa$  noch

$$\kappa_d = \frac{K_d}{K}$$

als dimensionslose Größe.

Es gibt nur in der Matrix  $M$  eine Veränderung

$$M = \begin{pmatrix} C_1 & 2B_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 2B_1 & C_2 & 2B_2 & 0 & & \\ 0 & 2B_2 & C_3 & 2B_3 & 0 & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & 2B_{n-1} \\ & & & & 2B_{n-1} & C_n \end{pmatrix} + K_d \mathbb{1}.$$

#### Auswirkung auf den 4-Spin-Fall

Die Ergebnisse aus dem letzten Abschnitt werden nun modifiziert zu

$$\begin{aligned} \lambda_2^I &= 2K + J + K_d & \lambda_3^I &= 2K - J + K_d \\ \alpha_2^I &= 2K - J & \alpha_3^I &= 2K + J \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \lambda_2^{II} &= 2J + K_d & \lambda_3^{II} &= K_d \\ \alpha_2^{II} &= K \frac{4-8\kappa+3\kappa^2}{2(\kappa-1)} & \alpha_3^{II} &= K \frac{-4+8\kappa-3\kappa^2+\kappa^3}{2(\kappa-1)^2} \end{aligned}$$

Wir haben also – wie schon durch unsere physikalische Diskussion motiviert – das Problem stabilisiert. Niez' Ergebnis, daß die Mode  $\omega_3$  mit  $\sqrt{K_d}$  skaliert, können wir hier sofort ablesen. Die veränderten Anregungsfrequenzen sind in Abb. 5.3 geplottet. Die Frequenz der Goldstone-Mode wurde gehoben, sie erreicht Null nicht einmal am kritischen Punkt. Dem auftretenden Level Crossing ist wohl keine physikalische Bedeutung beizumessen. Bemerkenswert ist ebenso, daß auch die zweifache Entartung unterhalb des kritischen Punktes aufgehoben wurde. Dies ist eine folgerichtige Konsequenz der

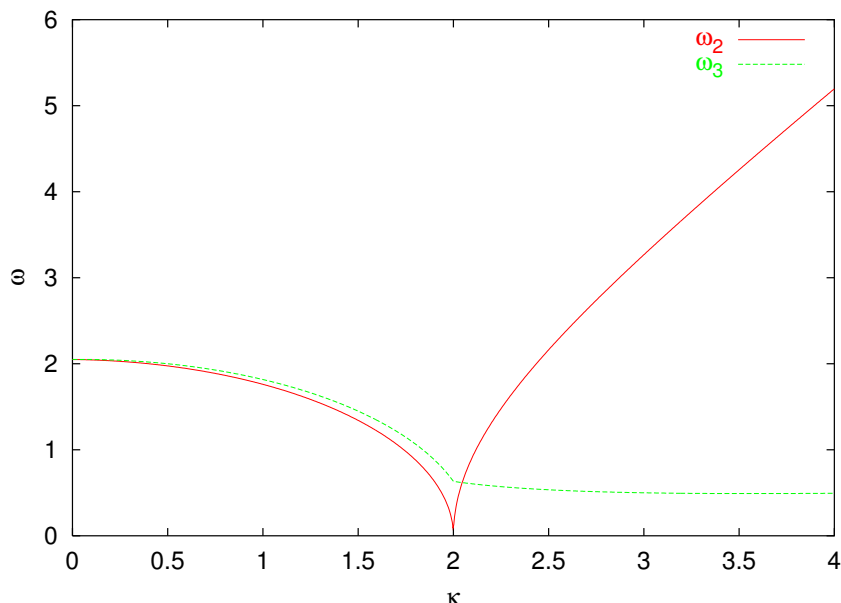


Abbildung 5.3: Die Frequenzen der Anregungen im 4-Spin-Modell nach Einführung eines demagnetisierenden Feldes. Die Frequenz der Goldstone-Mode wurde gehoben.

durch Gln. (5.9) nachgewiesenen Tatsache, daß auch diese von der Isotropie in der x-y-Ebene herrührte.

Die Mode  $\omega_2$  scheint also die Mode zu sein, die den Phasenübergang zwischen der Ising- und der ausgedehnten Wand vermittelt. Diesen Sachverhalt wollen wir als nächsten überprüfen.

### Die Moden am kritischen Punkt

Die Transformationen bleiben selbst mit Einführung des demagnetisierenden Feldes formal dieselben, so daß wir direkt auf die Ergebnisse in der vorherigen Betrachtung zurückgreifen können. Am kritischen Punkt ist die Mode  $\omega_2$  gleich Null, so daß der Grundzustand dort als

$$\xi_0 = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n0\rangle$$

angesetzt werden kann. Analog zu unserer Betrachtung der Goldstone-Mode geht jetzt durch  $\alpha_2 \rightarrow 0$  die Amplitude der  $b_2$ -Operatoren in  $s^y$  gegen Null, nun aber in  $s^x$  gegen unendlich, und wir erhalten einen im allgemeinen endlichen Erwartungswert für  $s^x$ . Betrachten wir wiederum  $|(i+1)0\rangle$  und  $|i0\rangle$ , erhalten wir Terme der Art

$$\sqrt{i+1}(c_{i+1}^* c_i + c_{i+1} c_i^*).$$

Das bedeutet aber genau, daß diese Mode für die Ausbildung der Domänenwand verantwortlich ist. Am kritischen Punkt rechnen wir mit extremen Fluktuationen. Dies ist



aber exakt, was wir sehen: Die Anregungsenergie wird Null, die Spins werden beliebig in der x-z-Ebene ausgelenkt. Auch Niez identifizierte diese Mode, wenn auch mit anderen Methoden.

### Das XZ-Modell

Lassen wir den Betrag des demagnetisierenden Feldes  $K_d$  gegen unendlich laufen, so können gar keine Auslenkungen mehr in y-Richtung stattfinden. Wir müssen aber auch bedenken, daß das bedeutet, daß Präzession nicht mehr stattfinden kann, oder nur im gewissermaßen maximalen Grenzfall einer Drehung in der x-z-Ebene. Im Moment wollen wir davon ausgehen, daß sich dieser Limes bilden läßt; auf diese Fragestellung kommen wir jedoch bald zurück.

Der Effekt unseres Gedankenexperiments wäre dann also, daß der Erwartungswert von  $s^y$  im Grundzustand gegen 0 geht, sprich, daß alle Terme, die  $\mathbf{p}$  enthalten, keinen Beitrag liefern<sup>5</sup>. Der mittlere Term in Gleichung (4.12) fällt weg; es bleibt uns nur  $N$  zu diagonalisieren.

Täten wir dies, erhielten wir einen Hamiltonoperator der Form:

$$H_1 = \frac{1}{2\hbar} \sum_{i=1}^n v_i q_i^2 - \beta .$$

Das bedeutete, es gäbe nur statische Anregungen<sup>6</sup>, der Grundzustand entspräche  $q_i = 0$  für alle  $i$  und die einzige Korrektur zur klassischen Energie wäre  $\frac{1}{S}\beta$ . Dies ist aber genau das, was wir erwarten: Durch unsere Einschränkung haben wir nicht nur die Entartung des Grundzustandes durch die Nullmode aufgehoben, in einem solchen Modell sind natürlich alle anderen Anregungen, die eine Präzession enthalten, nicht möglich. Natürlich ist dieses Modell eher von mathematisch-hypothetischem Interesse; dennoch schauen wir uns die möglichen Konsequenzen für den 4-Spin-Fall an.

Wir nehmen nun an, die Lösung noch nicht zu kennen und gehen nur von der Symmetriebedingung ( $\theta_2 = \pi - \theta_3 =: x$ ) aus. Hier sind

$$\begin{aligned} C_2 &= 2K \cos^2 x + J \cos x - J \cos 2x = C_3 =: C \\ A_2 &= \frac{J}{2} \cos 2x =: A \\ D_2 &= -\frac{K}{2} \sin^2 x = D_3 =: D . \end{aligned}$$

Man erhält sofort die Abweichung  $\Delta E = E_{qm} - E_{cl}$

$$\Delta E = -\frac{C}{S} .$$

<sup>5</sup>Wir erinnern uns an die Fußnote an anderer Stelle: Bis auf Vorfaktoren ist  $p_i$  gleich  $s_i^y$ .

<sup>6</sup>Wir behalten aber die Tatsache im Hinterkopf, daß die  $v_i$  in manchen (weit von der klassischen Lösung entfernten) Parameterbereichen negativ sind.

Dieser Ausdruck ist recht einfach, durch Minimierung der Gesamtenergie  $E_{qm}$  erhalten wir Lösungen für die Winkel

$$\begin{aligned} \sin x &= 0 & \text{und} \\ \cos x &= \frac{\kappa(2 + \frac{1}{S})}{4(1 + \frac{1}{S})(\kappa - 1)}. \end{aligned}$$

Da der Kosinus betragsmäßig kleiner oder gleich 1 sein muß, können wir einen kritischen Wert berechnen (bis Ordnung  $1/S$ ) zu

$$\kappa_c = 2 - \frac{1}{S} + O\left(\frac{1}{S^2}\right).$$

Der kritische Punkt würde nach dieser Näherung zu kleineren Werten hin abweichen. Intuitiv hätte man vielleicht vermuten können, daß, da Magnonen im Ising-System energetisch günstiger erzeugt werden, die Korrektur also die Ising-Lösung auch bei niedrigerer Anisotropie stabilisiert. Dann wäre dieses Ergebnis eher unerwartet.

Es gibt aber drei Argumente, die uns zum überdenken dieser Rechnung zwingen. Zum einen: Der Limes  $\kappa_d \rightarrow \infty$  läuft offensichtlich genau der  $1/S$ -Entwicklung entgegen, die Korrektur wird also immer größer. Dieser Effekt läßt sich durch einen einfachen Plot der quantenmechanischen Energie für verschiedene Werte von  $\kappa_d$  beobachten, siehe Abb. 5.4.  $S$  ist hierbei festgehalten als 10, im Vergleich geplottet die klassische

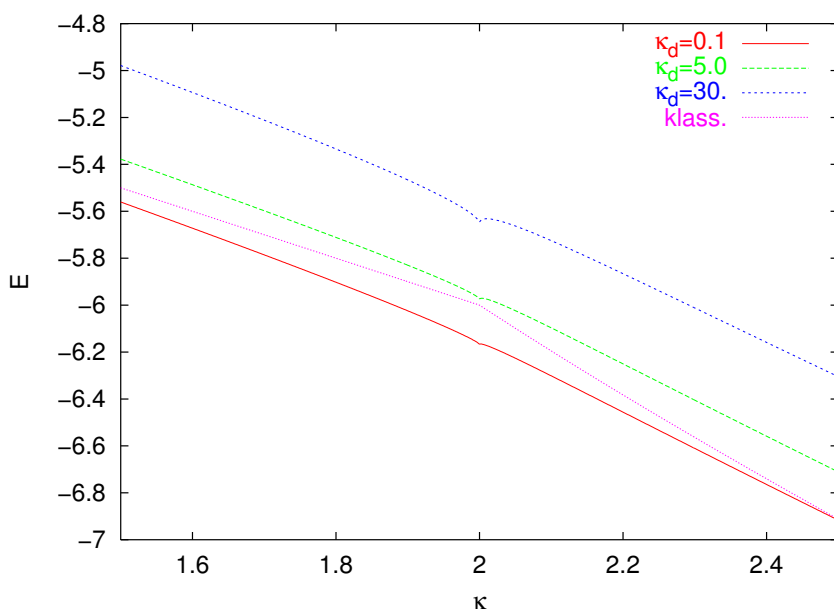


Abbildung 5.4: Die quantenmechanische Energie in Einheiten von  $K$  im Vergleich für verschiedene  $\kappa_d$ .

Energie. Was man hier schon erkennt, ist ein Effekt, mit dem wir uns im nächsten

Kapitel noch ausführlicher beschäftigen werden: Für kleine Werte von  $\kappa_d$  ist die quantenmechanische Energie bis zu einem bestimmten Wert oberhalb des kritischen Punktes niedriger als das klassische Pendant, dann kreuzen sich die Kurven. Bei großen Werten des demagnetisierenden Feldes ist die Korrektur immer positiv, und der Effekt der Phasenübergangsmode wird immer weniger bemerkbar. Es zeichnen sich hier also zwei Effekte ab. Zum einen scheint das demagnetisierende Feld bei großen Werten von  $\kappa$  ein *qualitativ* anderes Verhalten der Domänenwand auszulösen, zum anderen scheint die Näherung nicht mehr gerechtfertigt, wenn  $\sqrt{\kappa_d}$  in die Größenordnung von  $S$  gelangt. Dem ersten Effekt widmet sich diese Arbeit im Kapitel über die quantenmechanischen Korrekturen näher, der zweite Effekt warnt uns, diese Näherung mit größter Vorsicht zu behandeln.

Zum zweiten ist es aber auch so, daß ein Eigenwert von  $N$  am kritischen Punkt immer Null wird und somit auch einen sehr großen Anteil von den  $M$ -Eigenwerten egalisiert. Es gibt also immer (wenn auch kleiner werdende) Umgebung um den kritischen Punkt, an dem die Annahme, daß alle Anregungen große Energie haben, eben nicht mehr stimmt. Dies erkennt man an dem Knick in der Energie am kritischen Punkt in Abb. 5.4.

Abschließend werfen wir noch einen Blick auf die Schwankungsquadrate (5.9). Unsere Überlegungen werden insoweit bestätigt, daß das Schwankungsquadrat in  $y$ -Richtung sehr schnell gegen Null geht. Tatsache ist aber auch, daß in  $x$ -Richtung die mittlere Abweichung mit  $\kappa_d$  unbeschränkt zunimmt. Die Fläche der beschriebenen Ellipse nimmt zunächst leicht ab, konvergiert aber für  $\kappa_d \rightarrow \infty$  gegen einen endlichen Wert. Es sind also keine Anregungen möglich, aber  $\langle s^x \rangle$  ist schon im Grundzustand maximal unbestimmt.

### 5.2.3 Die Domänenwand im Spiegel: Ein periodisches System

Eine interessante Fragestellung, insbesondere auf das Verhalten bezüglich der Randspins hin, ist, ob ein periodisches System Vorteile bei der Berechnung bringen kann. Wir modifizieren daher unser System und betrachten es nun sozusagen doppelt, indem wir eine zweite Domänenwand umgekehrter Orientierung anschließen, siehe Abb. 5.5. Diese Modifikation hat den Vorteil, daß wir nun mit periodischen Randbedingungen

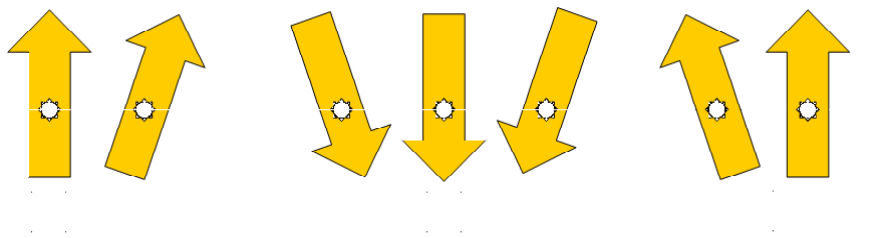


Abbildung 5.5: Die Domänenwand als ein periodisches System.

arbeiten können, also kurz gesagt keinen Rand mehr haben.

Theoretisch könnten wir nun auch eine Fouriertransformation durchführen, dies hat jedoch wenig Sinn, da durch eine solche zwar der nichtdiagonale Austauschanteil diagonalisiert würde, dafür aber der Anisotropieanteil nichtdiagonal wäre. Effektiv hätten wir also nichts gewonnen.

Daher verwenden wir im folgenden den altbewährten Lösungsansatz. Zunächst definieren wir

$$L = 2(n - 1)$$

als die neue Systemgröße. Dann ändert sich der Hamilton-Operator nur in der Summierung im Austauschterm:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{Q}} = -J \sum_i^L \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - K \sum_{i=1}^L (S_i^z)^2 .$$

Durch die periodischen Randbedingungen erhalten wir also folgende Veränderungen in der Definition von  $C$ ,

$$C_i = \begin{cases} 2K \cos^2 \theta_1 + J \cos(\theta_2 - \theta_1) + J \cos(\theta_1 - \theta_L) & i = 1 \\ 2K \cos^2 \theta_i + J \cos(\theta_{i+1} - \theta_i) + J \cos(\theta_i - \theta_{i-1}) & i = 2 \dots n - 1 \\ 2K \cos^2 \theta_n + J \cos(\theta_L - \theta_{L-1}) + \cos(\theta_1 - \theta_L) & i = L \end{cases} ,$$

eine Neudefinition,

$$E = A_L = -\frac{J}{2} \cos(\theta_L - \theta_1) ,$$

und es gibt  $1L$  und  $L1$ -Elemente in den Matrizen

$$M = \begin{pmatrix} C_1 & 2B_1 & 0 & 0 & \dots & B \\ 2B_1 & C_2 & 2B_2 & 0 & & \\ 0 & 2B_2 & C_3 & 2B_3 & 0 & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & 2B_{n-1} \\ B & \dots & & & 2B_{n-1} & C_n \end{pmatrix} ,$$

$$N = \begin{pmatrix} C_1 + 4D_1 & 2A_1 & 0 & 0 & \dots & E \\ 2A_1 & C_2 + 4D_2 & 2A_2 & 0 & & \\ 0 & 2A_2 & C_3 + 4D_3 & 2A_3 & 0 & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & 2A_{n-1} \\ E & \dots & & 0 & 2A_{n-1} & C_n + 4D_n \end{pmatrix} .$$

Es zeigt sich jedoch schnell durch Betrachtung des Vier-Spin-Falles, daß auch hier die Endlichkeit des (grundlegenden) Systems zu negativen Eigenwerten führt. Setzt man die Spins 1 und 4 wieder als unbeweglich an, erhält man natürlich die selbe Lösung wie zuvor, nur zweifach entartet, da der Zusatzterm  $E$  dann verschwindet.

Abschließend läßt sich also sagen, daß ein periodisches System die selben Ergebnisse liefert, jedoch keine entscheidenden Vorteile bietet.

Mit dieser Betrachtung wollen wir das System von vier Spins nun verlassen, um uns größeren Systemen und dem thermodynamischen Limes zuzuwenden.

## 5.3 Magnetische Anregungsmoden in großen Systemen

Niez (NAFL78) teilte sein System in einen kleineren Teil um die schmale Domänenwand und einen freien Teil auf, den er im thermodynamischen Limes berechnet. In seiner Betrachtung erhält er somit das freie Magnonenband<sup>7</sup> und lokalisierte Moden, muß aber mit Fehlern insbesondere bei breiten Wänden rechnen. Die in dieser Arbeit hergeleitete Methode erlaubt die Berechnung für alle Werte von  $\kappa$ , bezieht sich jedoch auf endliche (wenn auch numerisch sehr große Zahlen von Gitterpunkten erreicht werden können) Systeme. In diesem Abschnitt wollen wir unsere Ergebnisse herleiten und diskutieren sowie zeigen, daß sie im thermodynamischen Limes (für entsprechend kleine  $\kappa$ ) den Niezschen Moden entsprechen.

Alle in diesem Abschnitt und den folgenden dieser Arbeit dargestellten Größen mit Energieeinheiten sind in Einheiten von  $K$  dargestellt.

### 5.3.1 Numerische Ergebnisse

Zunächst sollen die Ergebnisse für  $\kappa_d = 0$  diskutiert werden. Eine Sammlung von Ergebnissen steigender Systemgröße ist in Abb. 5.6 zusammengestellt. Bei allen Systemgrößen erkennt man die Entartung unterhalb des kritischen Punktes und natürlich die Goldstone-Mode, analog zum Fall von vier Spins. Zusätzlich eingezeichnet sind immer die drittniedrigste Mode, die höchste Mode sowie dazwischenliegende Moden<sup>8</sup>. Was bei zunehmender Systemgröße immer deutlicher wird, ist die Tatsache, daß die Moden, mit Ausnahme der beiden niedrigsten, ein Band zu formen beginnen – die dritte und höchste Mode stellen immer deutlicher die Bandkanten des freien Magnonenbandes dar, siehe auch Abb. A.1 im Anhang. Die numerischen Ergebnisse zeigen sehr deutlich das Ausbilden des Bandes, auch wenn hier aufgrund der Übersichtlichkeit der Graphen jeweils nur ein Teil der Frequenzen geplottet sind. Im thermodynamischen Limes sollte man somit das freie Magnonenband und lokalisierte Moden erhalten.

Als nächstes soll noch die Abhängigkeit vom demagnetisierenden Feld gezeigt werden. Man erhält ein ähnliches Bild wie 5.3, wobei alle Moden leicht gehoben werden und natürlich das Band leicht verschoben, wie man in Abb. 5.7 sieht. Es sind nur die untersten vier Moden geplottet, als demagnetisierendes Feld wurde  $\kappa_d = 1$  angesetzt. Die Goldstone-Mode ist wiederum angehoben, die wandtreibende Mode erreicht am kritischen Punkt weiterhin Null, geht aber für den Fall großer  $\kappa$  in das Band über. Auch tritt hier wieder ein Levelcrossing auf<sup>9</sup>. Betrachten wir das gleiche System bei veränderlichem  $\kappa_d$ , aber konstantem  $\kappa = 3$ , so ergeben sich keine Überraschungen: Die Frequenzen steigen mit der demagnetisierenden Energie an, die Goldstone-Mode hierbei mit der erwarteten  $\sqrt{K_d}$ -Abhängigkeit, wie in Abb. 5.8 zu sehen ist.

Zusammenfassend läßt sich also sagen, daß die Ergebnisse von Niez durch unsere Methode hervorragend bestätigt und erweitert werden, sowohl für große Austauschwech-

<sup>7</sup>Zur Herleitung desselben siehe Anhang A.2.

<sup>8</sup>Im Falle von 8 Gitterplätzen wurde mit festen Randspins gerechnet, da noch negative Eigenwerte auftraten.

<sup>9</sup>Die Farbwechsel kommen durch die aufsteigende Sortierung im Datenfile zustande.

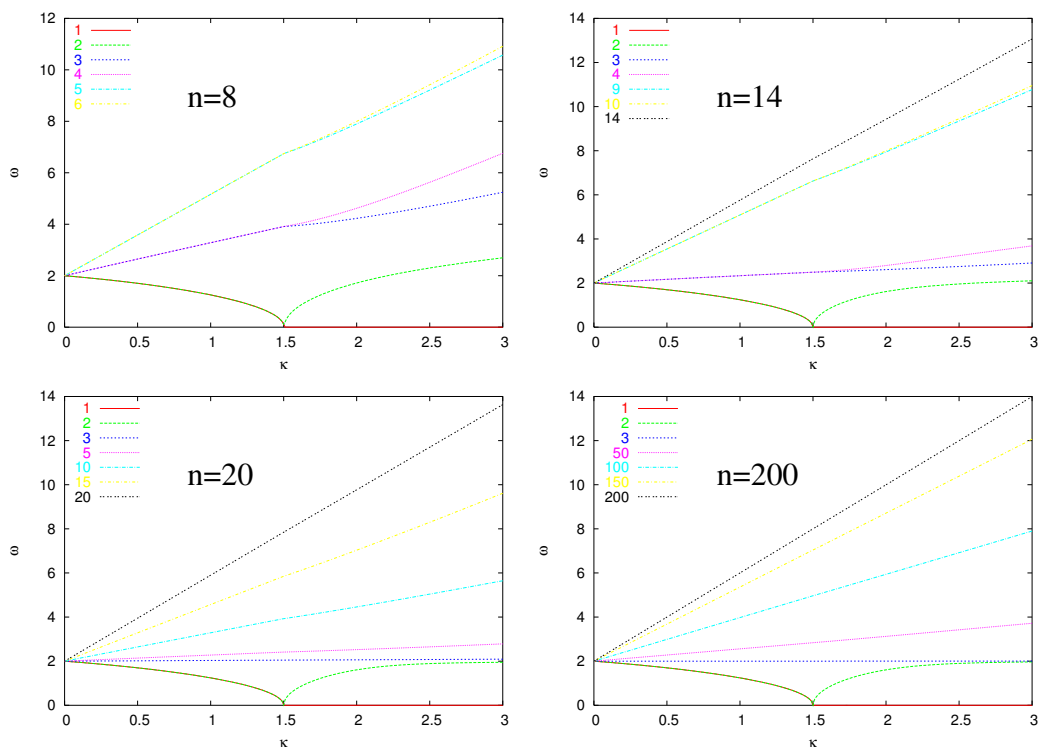


Abbildung 5.6: Moden ohne demagnetisierendes Feld für Systeme verschiedener Größen. Bei kleinen Systemen dominieren noch finite size-Effekte die höheren Moden. Je größer das System wird, desto näher kommt man der Bandstruktur.

selwirkung als auch für endliche Systeme. Bevor wir nun Form- und Energiekorrekturen zur Domänenwand betrachten, wollen wir uns analytisch mit dem Zerfall in Band- und zwei lokalisierte Moden befassen.

### 5.3.2 Lokalisierte Moden und Bandmoden

Einen guten Einstieg zu einem analytischen Ansatz bezüglich der Bandstruktur und lokalisierten Moden bietet das Geršgorin-Theorem (LT85).

#### Geršgorin-Theorem

Es sei  $A$  eine komplexe  $n \times n$ -Matrix und  $a_{jk}$  die Elemente von  $A$ ,  $j, k = 1 \dots n$ , ferner definieren wir

$$\rho_j = \sum'_k |a_{jk}|,$$

wo  $\sum'_k$  die Summe über alle  $k = 1 \dots n$  sei mit  $j \neq k$  (also die Summe über alle Nicht-diagonalelemente einer Zeile). Dann liegt jeder Eigenwert von  $A$  in mindestens einer

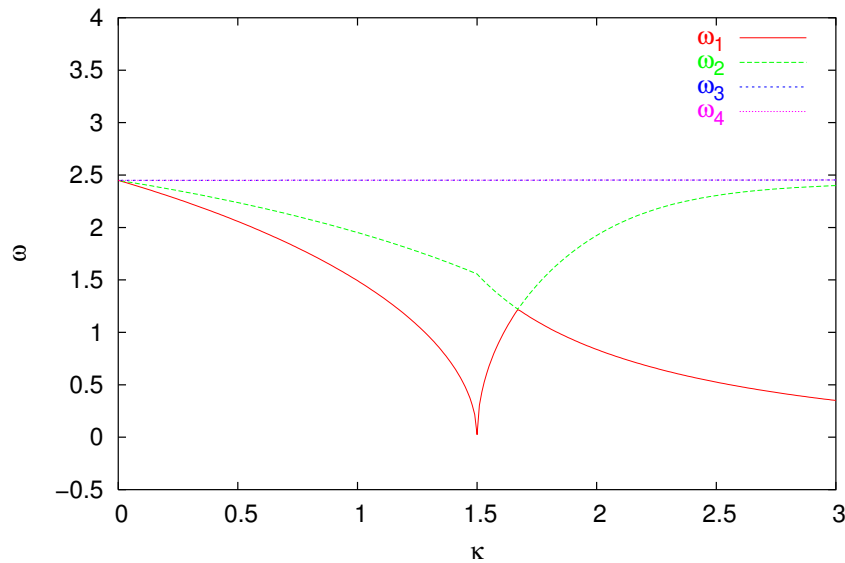


Abbildung 5.7: Die niedrigsten Moden für 200 Spins bei einem demagnetisierenden  $\kappa_d = 1$ .  $\omega_3$  und  $\omega_4$  unterscheiden sich auf dieser Größenskala sehr wenig, daher ist  $\omega_3$  unter  $\omega_4$  kaum zu erkennen.

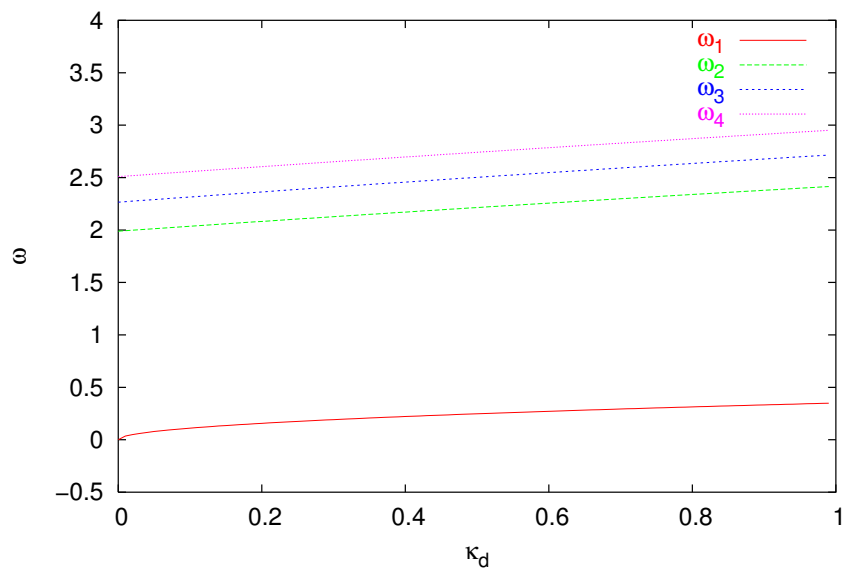


Abbildung 5.8: Magnonenmoden für veränderliches  $\kappa_d$ . Bemerkenswert ist die Wurzelabhängigkeit der niedrigsten Mode.

der Scheiben

$$\{z : |z - a_{jj}| \leq \rho_j\}, \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

in der komplexen  $z$ -Ebene.

Weiterhin gilt: Ein Satz aus  $m$  Scheiben, die keinen Punkt gemeinsam haben mit den

verbleibenden  $n - m$  Scheiben, enthalten  $m$  und nur genau  $m$  Eigenwerte von  $A$ .

### Anwendung des Theorems auf den Ising-Bereich

Im Falle nicht verdrehter Randbedingungen, also für das freie Magnonenspektrum, ist das Geršgorin-Theorem direkt anwendbar. Hier sind  $M$  und  $N$  die gleichen Matrizen, modulo  $2K$  ergeben sich die Elemente  $m_{11} = 1 + \frac{\kappa}{2} = m_{nn}$ ,  $m_{ii} = 1 + \kappa$  sonst, und  $-\frac{\kappa}{2}$  auf den Nebendiagonalen. Anwendung des Theorems führt für beide Matrizen zu

$$\begin{aligned} j = 1 : & \quad a_{11} = 1 + \frac{\kappa}{2} & \rho_1 &= \frac{\kappa}{2} \\ j = n : & \quad a_{nn} = 1 + \frac{\kappa}{2} & \rho_n &= \frac{\kappa}{2} \\ \text{sonst} & \quad a_{ii} = 1 + \kappa & \rho_i &= \kappa. \end{aligned}$$

Die Geršgorinscheiben ergeben sich im Fall von 1, n zu

$$\begin{aligned} (1) \quad & |z - 1 - \frac{\kappa}{2}| > 0 \\ & z - 1 - \frac{\kappa}{2} \leq \frac{\kappa}{2} \quad \Rightarrow z \leq 1 + \kappa \\ (2) \quad & |z - 1 - \frac{\kappa}{2}| < 0 \\ & -z + 1 + \frac{\kappa}{2} \leq \frac{\kappa}{2} \quad \Rightarrow z \geq 1 \end{aligned}$$

und sonst

$$\begin{aligned} (1) \quad & z - 1 - \kappa \leq \kappa \quad \Rightarrow z \leq 1 + 2\kappa \\ (2) \quad & -z + 1 + \kappa \leq \kappa \quad \Rightarrow z \geq 1. \end{aligned} \tag{5.11}$$

Die oberen zwei Scheiben sind in den unteren enthalten, und man erkennt sofort, daß es sich bei den allgemeinen Bedingungen (5.11) um die Bandkanten des freien Magnonenbandes handelt.

Im Isingfalle, also unterhalb des kritischen  $\kappa$ , ändern sich zwei Dinge. Zum einen erhalten wir in  $N$  wechselnde Vorzeichen auf der Nebendiagonale. Dies hat keinen Effekt, da  $\rho$  eine Betragssumme ist. Weiterhin treten an der Position der Domänenwand auf der Diagonale genau zwei abweichende Elemente  $a_{n/2, n/2} = 1 = a_{n/2+1, n/2+1}$  auf. Wir erhalten also wieder die Bandbedingungen (5.11), zusätzlich aber noch

$$\begin{aligned} (1) \quad & z - 1 \leq \kappa \quad \Rightarrow z \leq 1 + \kappa \\ (2) \quad & -z + 1 \leq \kappa \quad \Rightarrow z \geq 1 - \kappa. \end{aligned} \tag{5.12}$$

Die neu erhaltene Bedingung (5.12) erlaubt zwei Frequenzen, aus dem Band abzuweichen, und genau dies zeigen auch unsere numerischen Ergebnisse.

Oberhalb des kritischen Punktes liefert das Geršgorin-Theorem nicht auf solche einfache Weise die Antwort. Nach den hier folgenden Bedingungen könnten fast alle Frequenzen aus dem Band abweichen, aber auch im Band enthalten sein. Jedoch ist natürlich auch hier die Goldstone-Mode enthalten. Da diese Gleichungen nicht sonderlich erleuchtend sind, seien sie hier weggelassen. Um die Aufspaltung in Band und lokale Moden auch oberhalb des kritischen Punktes zu zeigen, müssen andere Methoden angewandt werden.



### Oberhalb des kritischen Punktes

Oberhalb des kritischen Punktes verkompliziert sich die Struktur der Matrizen, so daß kein einfachen oder offensichtlicher Beweis gefunden wurde. Für  $\kappa \rightarrow \infty$  erhält man in der einfachsten Näherungslösung nur das Spektrum einer freien Spinkette, so daß der Teufel hier sprichwörtlich im Detail liegt: Es sind die kleinen Störungen der Ordnung  $\kappa^0$ , die die lokalisierte Mode bestimmen. Man könnte sich zum Beweis also einen störungstheoretischen Ansatz vorstellen.

## 5.4 Fluktuationskorrekturen zu Energie und Magnetisierung

Ein Ansatz von Antoulas *et al.* bzw. Cantieni und Schilling (ASB76; CS80) ermöglichte in den späten siebziger Jahren eine erste Berechnung von Fluktuationskorrekturen an der Energie und dem Erwartungswert der Magnetisierung in z-Richtung. Es wurde hierbei ein Variationsansatz benutzt, dessen Ergebnisse nun (zumindest qualitativ) mit den unsrigen verglichen werden sollen. Des weiteren geben die in diesem Kapitel gewonnenen Graphen einen sehr schönen Einblick in die unterliegende Physik.

### 5.4.1 Korrekturen zum Erwartungswert der Magnetisierung

Der Effekt der im letzten Abschnitt berechneten Magnonenmoden auf den Erwartungswert der z-Komponente des Spins kann auch für beliebig große Systeme bequem im Rahmen unseres Formalismus betrachtet werden.

Dazu betrachten wir nun zunächst die Form der Rücktransformation der in Kapitel 4.2.4 hergeleiteten Bogoliubov-Transformation. Wir sind interessiert in den Erwartungswert

$$\langle 0 | s_i^z | 0 \rangle_b = \langle 0 | -S + n_i | 0 \rangle_b ,$$

wobei  $n_i = a_i^\dagger a_i$  wieder der Zähloperator in den ursprünglichen Erzeugern und Vernichtern sei;  $|0 \rangle_b$  symbolisiere den Grundzustand, in dem keine Magnonen, die durch die  $b_i^\dagger$  erzeugt werden, vorhanden seien. Es soll also  $n_i$  in den Erzeugern und Vernichten  $b$  dargestellt werden. Wir verwenden die untere Formel in Gleichung (4.11), und betrachten dann die Rücktransformationen

$$\begin{aligned} p_i &= \sum_j O_{ij}^T \bar{p}_j = \sum_j O_{ji} \bar{p}_j \\ q_i &= \sum_j O_{ji} \bar{q}_j . \end{aligned}$$

Die Skalentransformation gehen ein via

$$\begin{aligned} p_i &= \sum_j O_{ji} \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} \bar{P}_j \\ q_i &= \sum_j O_{ji} \sqrt{\lambda_j} \bar{Q}_j . \end{aligned}$$

Sei nun  $\bar{O}$  die zur Diagonalisierung von  $N$  genutzte orthogonale Transformation, dann folgt mit

$$\begin{aligned}\bar{P}_i &= \sum_k \bar{O}_{ki} P_k \\ \bar{Q}_i &= \sum_k \bar{O}_{ki} Q_k\end{aligned}$$

schließlich

$$\begin{aligned}p_i &= \sum_{j,k} O_{ji} \bar{O}_{kj} \frac{1}{\sqrt{\lambda_j}} P_k \\ q_i &= \sum_{j,k} O_{ji} \bar{O}_{kj} \sqrt{\lambda_j} Q_j.\end{aligned}$$

Mit den Gleichungen (4.16), mit denen die bosonischen Operatoren  $b$  eingeführt worden waren, folgt

$$\begin{aligned}p_i^2 &= -\frac{\hbar}{2} \left[ \sum_{j,k} O_{ji} \bar{O}_{kj} \frac{\gamma_k^{1/4}}{\sqrt{\lambda_j}} (b_k - b_k^\dagger) \right]^2 \\ q_i^2 &= \frac{\hbar}{2} \left[ \sum_{j,k} O_{ji} \bar{O}_{kj} \frac{\sqrt{\lambda_j}}{\gamma_k^{1/4}} (b_k - b_k^\dagger) \right]^2.\end{aligned}$$

Es ist naheliegend, die Matrixelemente der Gesamttransformation zu

$$\begin{aligned}R_{ik} &= \sum_j O_{ji} \bar{O}_{kj} \frac{\gamma_k^{1/4}}{\sqrt{\lambda_j}} \\ R'_{ik} &= \sum_j O_{ji} \bar{O}_{kj} \frac{\sqrt{\lambda_j}}{\gamma_k^{1/4}}\end{aligned}\tag{5.13}$$

zu definieren. Da der Grundzustandserwartungswert gesucht ist, tragen nur Terme proportional zu  $b_l b_l^\dagger$  bei. Es ergibt sich für die jeweiligen Beiträge

$$\begin{aligned}p_{i,0}^2 &= \frac{\hbar}{2} \sum_k R_{ik}^2 b_k b_k^\dagger \\ q_{i,0}^2 &= \frac{\hbar}{2} \sum_k R'_{ik}{}^2 b_k b_k^\dagger.\end{aligned}\tag{5.14}$$

Es bleibt für den Grundzustand somit nur

$$\langle 0 | s_i^z | 0 \rangle_b = -S + \frac{1}{4} \sum_k (R_{ik}^2 + R'_{ik}{}^2) - \frac{1}{2} = -S + \Delta S$$

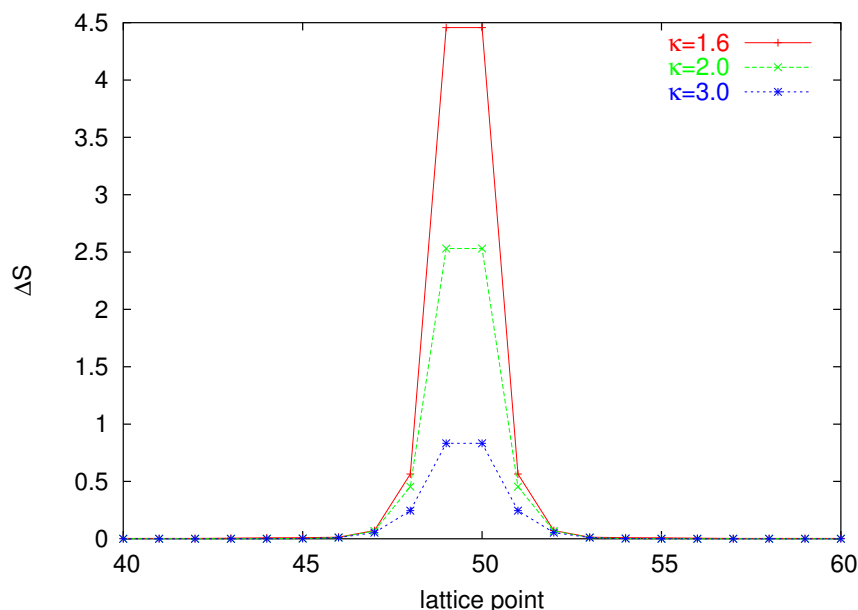


Abbildung 5.9: Die Abweichung der Magnitude der  $z$ -Komponente der Spins im Wintergedrehten System für verschiedene Werte von  $\kappa$ . Es sind nur die zentralen 20 Spins eines 100-Spin-Systems gezeigt.

zu bestimmen, da der Erwartungswert von  $b_k b_k^\dagger$  im Grundzustand 1 ist. Dies läßt sich numerisch ohne Probleme durchführen. Ergebnisse für verschiedene Werte von  $\kappa$  sehen wir in Abbildung 5.9. Gezeigt ist dort der Wert  $\Delta S$  gegen den Gitterplatz in einem System aus 100 Gitterplätzen. Die Abweichung in  $z$ -Richtung im Wintergedrehten System entspricht im Originalsystem also einer Abnahme der gemessenen Magnitude der Magnetisierung an den Gitterplätzen. Wie auch Antoulas erkennen wir, daß die Abweichungen in der Mitte der Wand am größten sind. Sie nehmen oberhalb des kritischen Punktes mit zunehmendem  $\kappa$  wieder ab. Ein weiterer bemerkenswerter Effekt ist die Tatsache, daß es auch zu Randeffekten kommen kann. Diese sind in Abb. 5.10 dargestellt. Bei einem  $\kappa$  von 1.6 ist am Rand eine Struktur zu erkennen, die - im Gegensatz zum unkorrelierten Rauschen der Numerik bei 2 und 3 - durchaus korreliert ist. Dieser Effekt ist jedoch sehr klein im Vergleich zu den Abweichungen der Zentralspins.

Betrachten wir nun die Korrekturen in Abhängigkeit der Wechselwirkung, Abb. 5.11 Die Abweichung bei  $\kappa = 0$  ist Null. Dieser Punkt entspricht dem Limes unendliche großer Anisotropie bei fester Austauschwechselwirkung, oder einfach der Austauschwechselwirkung gegen Null bei endlichem  $K$ . Der quantenmechanische Grundzustand entspricht dem klassischen Grundzustand; die Spins sind in ihrer Position fixiert<sup>10</sup>. Mit zunehmendem  $\kappa$  nimmt auch die Abweichung zu, zum kritischen Punkt hin divergiert sie wie zu erwarten aufgrund der großen Fluktuation. Mit zunehmender Austausch-

<sup>10</sup>Diese Aussage ist natürlich nur bis auf die quantenmechanische Unbestimmtheit richtig, die immer vorliegt. Jeder quantenmechanische Spin präzediert in einer klassischen Vorstellung, da der Operator  $\mathbf{S}^2$  den Eigenwert  $S(S+1)$  hat.

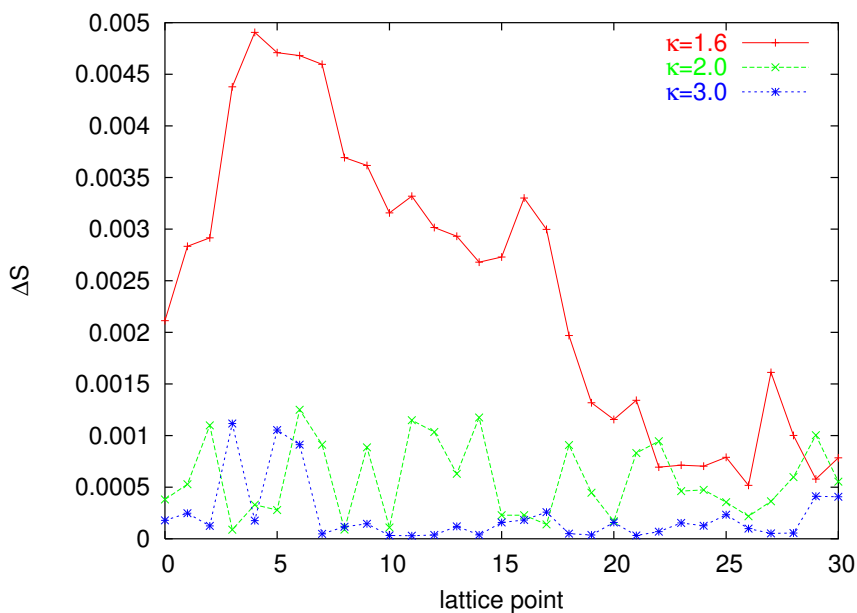


Abbildung 5.10: Die Abweichung der Magnitude der  $z$ -Komponente der Spins im Winter-gedrehten System für verschiedene Werte von  $\kappa$ . Hier sind die Gitterplätze am Rand dargestellt.

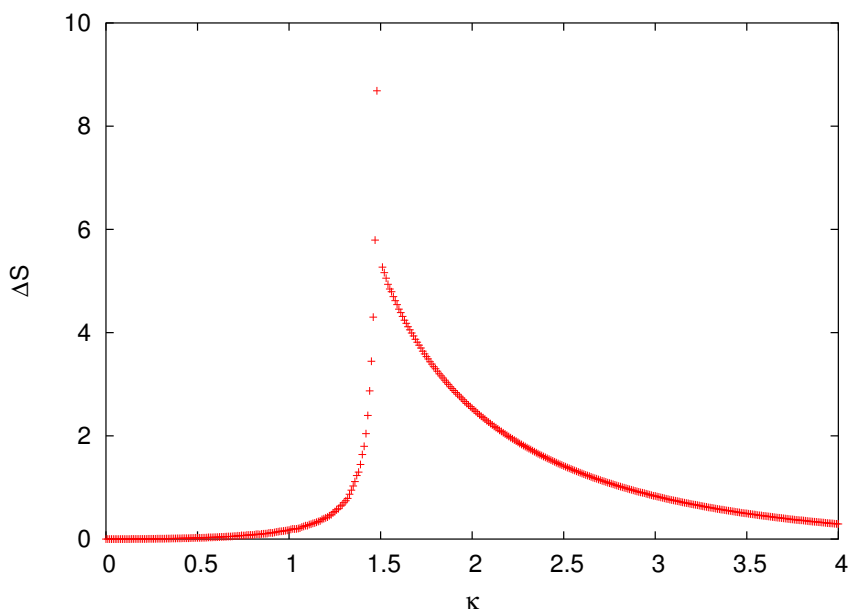


Abbildung 5.11: Die Fluktuationskorrekturen an den Zentralspins bei veränderlichem  $\kappa$ . Zur Diskussion siehe den Text.

wechselwirkung nähert sie sich langsam dem Heisenberg-Modell an, also wieder der

Null. Im Limes unendlicher Austauschwechselwirkung bzw. der Abwesenheit einer Anisotropie ist wiederum die klassische Lösung gleich der quantenmechanischen, die Spins werden hier im kürzestmöglichen Abstand fixiert. Es sei angemerkt, daß diese Übereinstimmung nicht bedeutet, daß keinerlei Magnonen mehr auftreten können. Sie tragen nur nicht zur Grundzustandsenergie bei. Nullpunktsschwingungen im Sinne des harmonischen Oszillators treten nur durch das Zusammenspiel beider Wechselwirkungen auf, die in Konkurrenz treten. Im Fall ausgeschalteter Austauschwechselwirkung kann man direkt aus Gleichung (4.6) ersehen, daß der Hamiltonoperator diagonal wird. Man erhält, wie schon in der Diskussion der Anregungsmoden gesehen, aufgrund der Unabhängigkeit der Spins  $n$  entartete Anregungen. Im Fall eines Heisenberg-Modelles ohne Anisotropie kann der Hamilton-Operator durch eine Fourier-Transformation diagonalisiert werden. Für einen Überblick sei (Nol86b) empfohlen.

### 5.4.2 Die Schwankungsquadrate der x und y-Komponenten

Auch die Schwankungsquadrate in x- und y-Richtung lassen sich mit Hilfe der Überlegungen des vorherigen Abschnitts bestimmen. Es wurde bereits in Abschnitt 4.2.3 erwähnt, daß  $p$  und  $q$  linear mit  $s^x$  und  $s^y$  verknüpft sind, so daß für die Operatorquadrate offenbar

$$\begin{aligned}(s_i^x)^2 &= \hbar S q_i^2 \\ (s_i^y)^2 &= \hbar S p_i^2\end{aligned}$$

gilt. Damit lassen sich aber sofort wieder die Gleichungen (5.13) und (5.14) anwenden, und wir erhalten für die Erwartungswerte

$$\begin{aligned}\langle 0 | (s_i^x)^2 | 0 \rangle_b &= \frac{\hbar^2 S}{2} \sum_k R'_{ik}{}^2 \\ \langle 0 | (s_i^y)^2 | 0 \rangle_b &= \frac{\hbar^2 S}{2} \sum_k R_{ik}{}^2.\end{aligned}$$

Die numerischen Ergebnisse zu diesen wurden ebenfalls berechnet. Zunächst sei angemerkt, daß der numerische Untergrund aufgrund der Unsicherheit bei der Bestimmung der Eigenwerte (besonders bei  $\kappa_d = 0$ , wenn ein Eigenwert Null wird), der schon bei der Behandlung von  $s_i^z$  seinen sichtbaren Niederschlag fand, hier auch auftritt, insbesondere da diese Größen eine insgesamt schon kleine Abweichung von ihrem Wert im System unabhängiger Spins bei  $\kappa = 0$  von  $S\hbar/2$  aufweisen. Dennoch lassen sich die relevanten qualitativen Aussagen treffen.

In einer Betrachtung der Abhängigkeit vom Gitterplatz zeigt sich, wie zu erwarten, ein ähnliches Verhalten wie im Fall von  $\langle s_z \rangle$ , die Werte weichen am zentralen Spin am meisten von  $S\hbar/2$  ab. Wir beginnen unsere Diskussion mit den Graphen der Ergebnisse am zentralen Spin eines Systems aus 50 Gitterplätzen sowohl für den x- als auch den y-Fall, Abb. 5.12 respektive Abb. 5.13. Im y-Fall sieht man für  $\kappa_d = 0$  deutlich, wie der

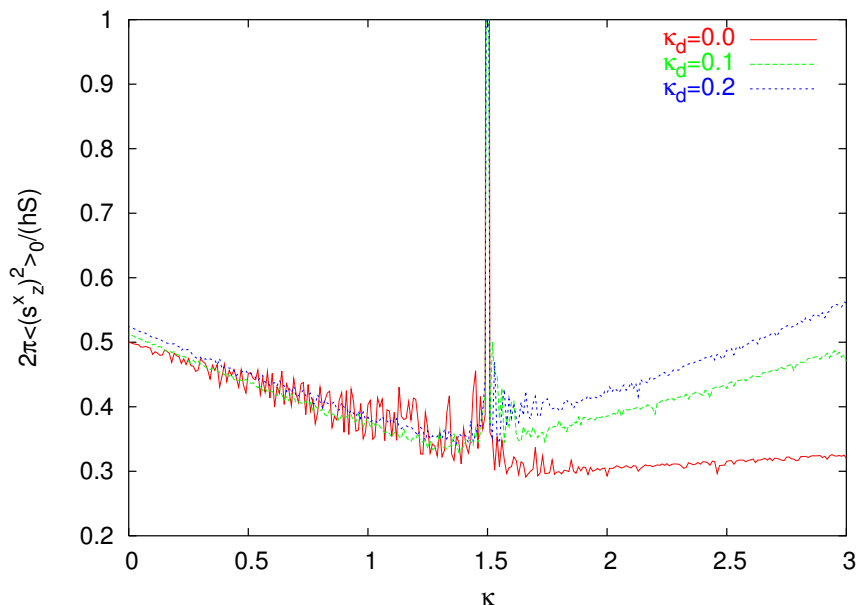


Abbildung 5.12: Das Schwankungsquadrat der  $x$ -Komponente des Spins für verschiedene Werte von  $\kappa_d$  gegen  $\kappa$  aufgetragen. Es wurde durch  $\hbar$  und  $S$  geteilt. Die Systemgröße betrug 50 Gitterplätze.

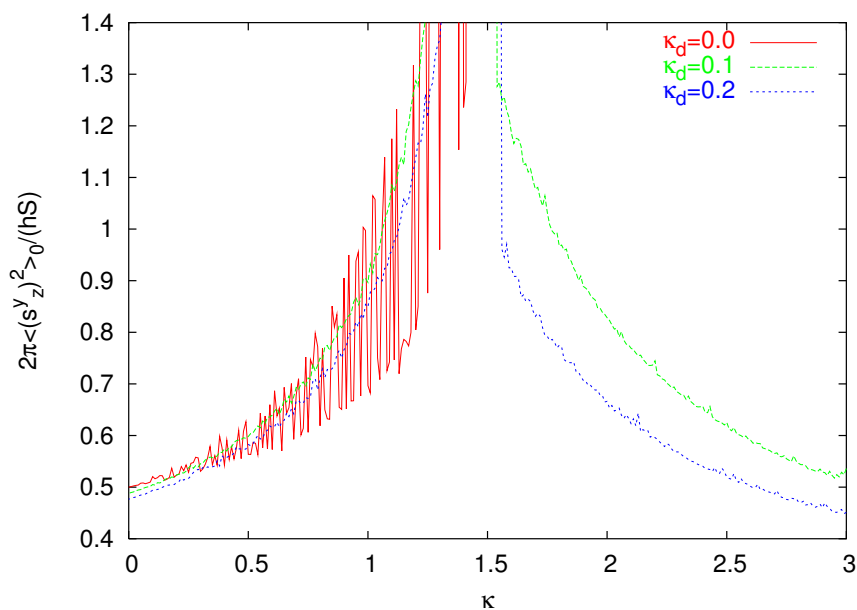


Abbildung 5.13: Das Schwankungsquadrat der  $y$ -Komponente des Spins für verschiedene Werte von  $\kappa_d$  gegen  $\kappa$  aufgetragen. Es wurde durch  $\hbar$  und  $S$  geteilt. Die Systemgröße betrug 50 Gitterplätze.

Wert zum kritischen Punkt hin divergiert und aufgrund der Goldstone-Mode selbst numerisch bei extrem großen Werten bleibt. Mit Einschalten des demagnetisierenden Feldes ist das Schwankungsquadrat generell niedriger, doch erreicht die Goldstone-Mode am kritischen Punkt weiterhin ihren niedrigsten Wert, so daß das Schwankungsquadrat dort am höchsten bleibt. Es bleibt aber festzuhalten, daß es über den gesamten Parameterbereich zu starken Abweichungen in y-Richtung kommt, da selbst die gehobene Goldstone-Mode die energetisch günstigste Anregung bleibt. Wie steil die den Phasenübergang verursachende Mode am kritischen Punkt gegen Null geht, äußert sich hier darin, daß das Schwankungsquadrat in x-Richtung zwar in allen Fällen am kritischen Punkt gegen unendlich geht, doch auf einem sehr viel schmalen Bereich Abweichungen aufweist als sein y-Pendant.

Ein direkter Vergleich für ein Beispiel ist in Abb. 5.14 dargestellt. Am Punkte  $\kappa = 0$

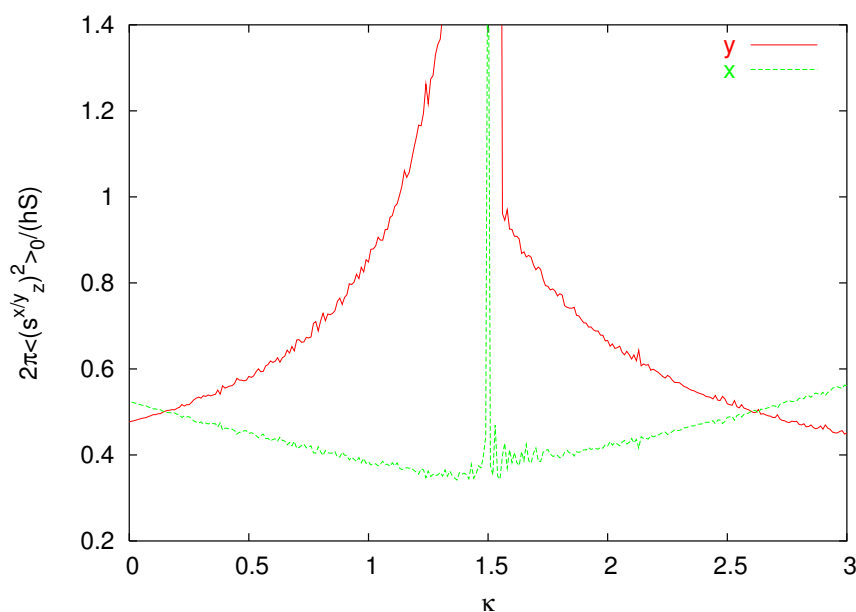


Abbildung 5.14: Vergleich der Schwankungsquadrate in x- und y-Richtung in einem System von 50 Gitterplätzen bei  $\kappa_d = 0.2$ .

erkennt man die Auswirkungen des demagnetisierenden Feldes. Die Schwankungen in x-Richtung verstärken sich zugunsten der Schwankungen in y-Richtung. Die gehobene Goldstone-Mode wird dann energetisch günstiger, und der y-Anteil erhöht sich wieder, hin zu dem breiten Maximum am kritischen Punkt. Deutlich sieht man den Unterschied zum schmalen Maximum im x-Anteil.

### 5.4.3 Korrekturen zur Energie

Wir wenden uns abschließend der Energiekorrektur zu. Den allgemeinen Verlauf derselben sehen wir in Abb. 5.15. Die für verschwindendes demagnetisierendes Feld ei-

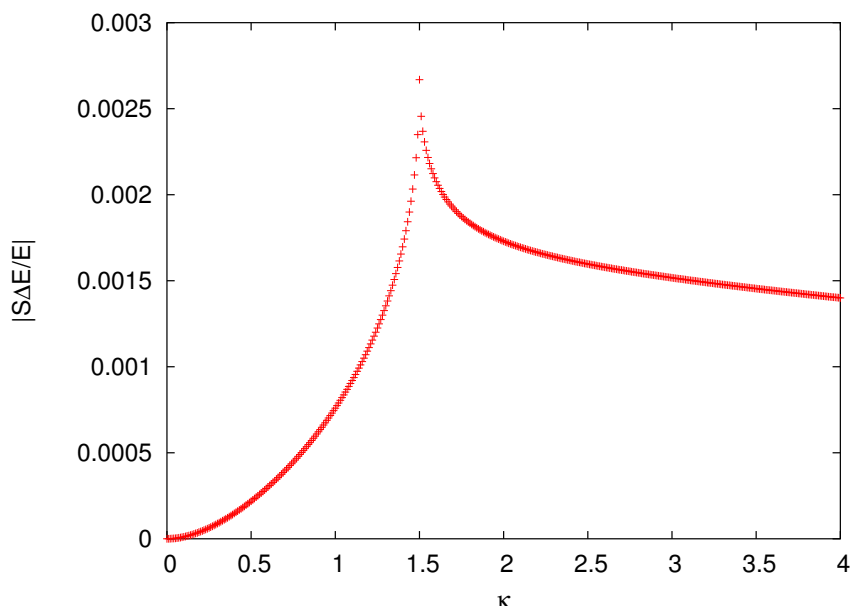


Abbildung 5.15: Die relative Korrektur zur klassischen Energie, skaliert mit  $S$ , ohne demagnetisierenden Anteil. Die Systemgröße beträgt 200 Spins.

gentlich negative Energiekorrektur ist hier im Betrag dargestellt. Für  $\kappa = 0$  ist sie wiederum Null, ebenso läuft sie für  $\kappa$  gegen unendlich wiederum (langsam) gegen Null. Die Gründe hierfür, nämlich die Gleichheit von klassischem und quantenmechanischem Grundzustand, wurden oben schon diskutiert. Interessant ist auch das Verhalten nahe des kritischen Punktes. Die Energiekorrektur divergiert im Gegensatz zur Korrektur zur Magnetisierung hier nicht, sondern zeigt von beiden Seiten ein Wurzelverhalten. Dieses kann man am Beispiel des 4-Spin-Falles auch schon analytisch am Verlauf der Anregungsmoden (5.5) und (5.7) beobachten.

Interessant wird das Verhalten mit Einführung des demagnetisierenden Feldes. Es wurde schon festgestellt, daß der demagnetisierende Anteil die quantenmechanische Energie nur erhöhen kann. Dies schlägt sich auch im Bilde nieder, siehe Abb. 5.16. Im Bereich niedriger  $\kappa$  wird die Korrektur nun positiv, da durch das Wechselspiel von demagnetisierender und Anisotropieenergie durchaus Auslenkungen in  $x$ -Richtung auftreten können. An einem gewissen Punkt heben sich dann die Anteile aller Wechselwirkungen auf, die Korrektur durchquert die Null. Im Betragsgraphen ist dies durch den Knick zu erkennen. Ein zweiter solcher Knick befindet sich bei hohen  $\kappa$ -Werten, er ist auf dem Graphen nur im Falle  $\kappa_d = 0.02$  zu sehen. Diese Punkte verschieben sich mit steigender Demagnetisierung, bis sie zusammenlaufen und schließlich die gesamte Korrektur positiv ist.

Mit dieser Diskussion wollen wir nun dieses Kapitel verlassen und uns den Formkorrekturen der Domänenwand zuwenden.



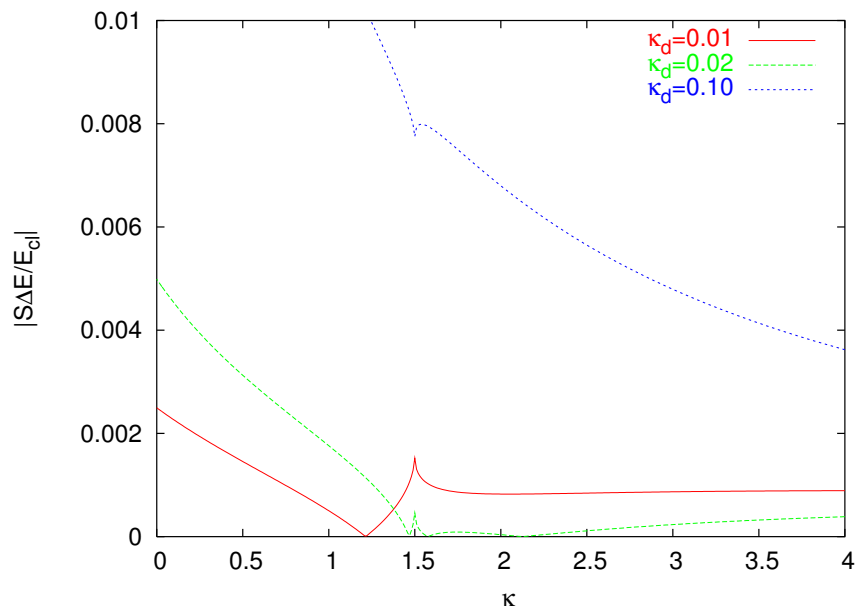


Abbildung 5.16: *Relative Energiekorrektur für verschiedene Werte von  $\kappa_d$  gegen  $\kappa$ , skaliert mit  $S$ .*



# 6 Quantenmechanische Formkorrekturen der Domänenwand

Quantenmechanische Anregungsmoden im klassischen Grundzustand induzieren eine Korrektur zu sowohl Energie als auch Amplitude der z-Komponente des Spins durch Anregungen. Diese Effekte haben wir beide beobachtet, sie wurden auch in frühen Arbeiten schon von Antoulas *et al.* sowie Cantieni und Schilling thematisiert, die ein Variationsprinzip verwendeten (ASB76; CS80).

In diesem Kapitel wollen wir eine Frage stellen, die in der Literatur noch unbehandelt ist. Bestimmt werden soll, ob auch Korrekturen zur Form der Wand auftreten, also Änderungen der Auslenkungswinkel in der x-z-Ebene. Diese Frage läßt sich erst dann zufriedenstellend beantworten, wenn bestimmt ist, unter welchen Umständen diese berechnet werden können – es sei nur an die Goldstone-Mode und die Fluktuationen nahe des kritischen Punktes gedacht. Nachdem diese Aspekte geklärt wurden, berechnen wir numerisch die auftretenden Korrekturen sowohl in der Form der Wand als auch in der Energie der Wand. Dies geschieht, indem wir den quantenmechanischen Ausdruck für die Energie in den klassischen Winkeln als Parameter minimieren, wie schon besprochen mit Hilfe der Powell-Minimierung. Es tritt eine Verschiebung des kritischen Punktes auf, der wir uns widmen werden. Ein anderer interessanter Effekt ist die qualitative Veränderung des Verhaltens der quantenmechanischen Wand mit steigender demagnetisierender Energie, die schon in Kapitel 5 Erwähnung fand.

Abschließend werden die Größenordnung dieser Effekte und die passenden Korrekturen für die in Kapitel 2 diskutierten Experimente besprochen, wobei wir einen Vergleich mit Kapitel 3.5 bilden werden. Damit schließt sich dann der Kreis dieser Arbeit.

## 6.1 Gültigkeit der 1/S-Näherung

Die 1/S-Näherung ist, wie schon gesagt, eine Entwicklung um einen klassischen Zustand, in dem alle Spins maximal in positiver z-Richtung ausgelenkt sind. Dieser Zustand konnte durch die Winter-Drehung erreicht werden, wobei allerdings vorerst die Tatsache außer Acht gelassen wurde, daß der klassische Zustand nicht genau definiert war – es gibt ja keinen Energieunterschied zwischen Bloch- und Néel-Wänden. Deswegen muß bezweifelt werden, daß dieser Ausgangspunkt der Richtige für die Entwicklung war. Hätte nicht vielmehr eine Konfiguration gewählt werden müssen, in der der Azimutalwinkel maximal unbestimmt ist? Daß dieses außer Acht gelassen wurde, zeigte sich an der Existenz der Goldstone-Mode. Jene ist es auch, die eine Untersuchung der Energielandschaft nahe des klassischen Minimums unmöglich macht, da es

sich bei der entsprechenden Frequenz um einen Nulldurchgang handelt. In der Folge treten negative Eigenwerte der  $S^y$  zugeordneten Matrix  $M$  auf. Ziel der nun folgenden Analyse ist es, festzustellen, wie dieses Verhalten zu interpretieren ist, und inwieweit die Einführung eines demagnetisierenden Feldes eine Berechnung erlauben kann.

### 6.1.1 Negative Eigenwerte in $M$

Die Bedeutung eines negativen Eigenwertes in  $M$  erklärt sich durch die Betrachtung der Konsequenzen für den harmonischen Oszillator. Eine Diagonalisierung führt weiterhin zu reellen Eigenwerten, doch ist die Struktur des Hamilton-Operators mit

$$H = -p^2 + \omega^2 q^2$$

nun derart, daß der Grundzustand eine unendliche negative Energie wegen des Vorzeichens von  $p^2$  impliziert. Für die quantenmechanische Energie bedeutet das, daß eine kleine Abweichung von der klassischen Position zum Abstürzen in ein (im wahrsten Sinne des Wortes) bodenloses Loch führt. Die Ausgangskonfiguration unserer Entwicklung war für diesen Zweck in dem Modell ohne demagnetisierende Energie nicht geeignet. Letztere kann das Problem lösen, doch müssen wir sehr wohl überlegen, unter welchen Umständen dies physikalisch sinnvolle Ergebnisse liefert. In Abb. 6.1 sind

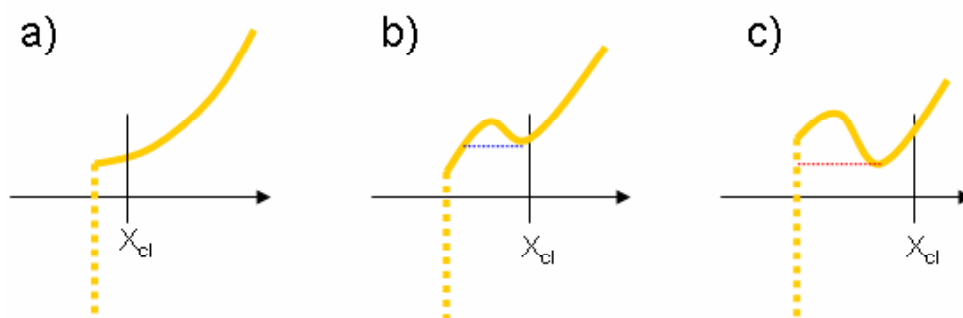


Abbildung 6.1: Drei Möglichkeiten zum Verhalten der quantenmechanischen Grundzustandsenergie (gold) in Abhängigkeit von äußeren Parametern (hier den Winkeln). Die Stelle, an der die Energie betragsmäßig gegen die negative Unendlichkeit divergiert, ist durch die gepunktete goldene Linie symbolisiert.  $x_{cl}$  markiert die klassische Lösung, die gestrichelte Linie deutet die Möglichkeit oder Unmöglichkeit eines Tunnelprozesses aus dem lokalen Minimum an.

drei mögliche Fälle dargestellt, hier zur Vereinfachung Energien in Abhängigkeit von einer Variablen. Im ersten Fall einer extrem kleinen Anhebung der Goldstone-Mode ist noch kein Minimum zu sehen. Das System würde weiterhin in die „Divergenzkatastrophe“ rutschen. Im zweiten Fall reicht die Magnitude der stabilisierenden Energie aus, um ein leicht verschobenes Minimum ausfindig zu machen. Dieses liegt jedoch energetisch oberhalb der Stelle, an der die Energiekurve nach unten abbricht. Man kann

sich hier Tunnelprozesse vorstellen. Selbst wenn diese mit  $\exp(-S)$  skalieren, ist das Minimum doch nur auf bestimmten Zeitskalen stabil. Der dritte dargestellte Fall ist der Idealfall. Das Minimum liegt energetisch tiefer als der Rand des Gültigkeitsbereiches der Entwicklung, ein Tunneln ist somit unmöglich, da es keinen Zustand gleicher Energie auf der anderen Seite der Barriere gibt. In den numerischen Untersuchungen stellte Fall 3 das Kriterium dar, nach dem über die Existenz einer stabilen Lösung entschieden wurde.

### 6.1.2 Negative Eigenwerte in $N$

Die Mode, die den Phasenübergang ermöglicht, erweist sich als ein schwierigeres, aber erwartetes Problem. Innerhalb der sogenannten Ginzburg-Region um einen kritischen Punkt sind die Fluktuationen so groß, daß sich keine Aussage über den Zustand des Systems treffen läßt. Diese wird durch das Verhalten dieser Phasenübergangsmode beschrieben, wie man im Beispiel des Vierspinnfalles schon erkennen kann. In Abb.

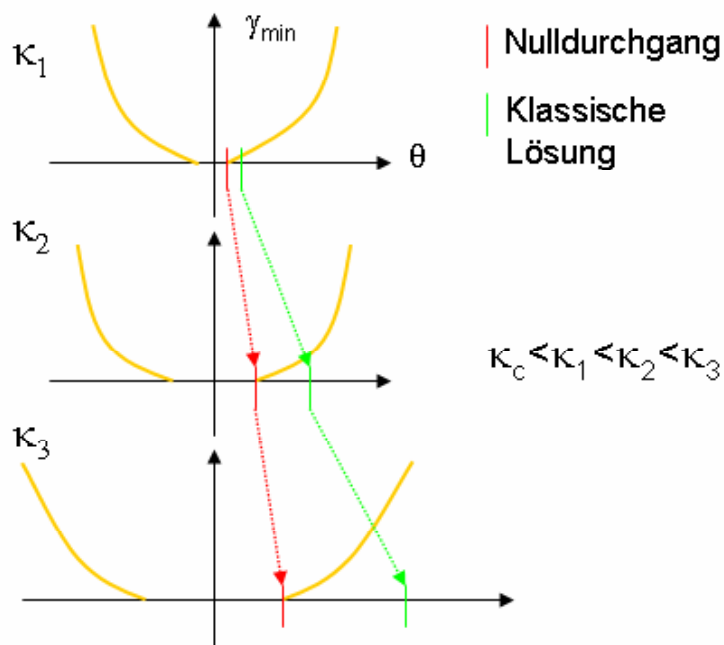


Abbildung 6.2: Das Verhalten des niedrigsten Eigenwertes von  $N$  (gold) in Abhängigkeit von den Winkeln und die Lage des klassischen Grundzustandes (grün) für verschiedene Werte von  $\kappa$ . Zur Verdeutlichung der Gültigkeit des Modells ist der negative Anteil von  $\gamma_{min}$  nicht gezeigt.

6.2 sind die Veränderung des klassischen Minimums und die der Position des Nulldurchgangs des niedrigsten  $N$ -Eigenwertes aufgetragen. Am kritischen Punkt liegen beide Werte übereinander. Der Bereich, in dem der Eigenwert negativ wird, vergrößert sich mit zunehmendem  $\kappa$ , doch vergrößert sich auch der Abstand zwischen klassi-

scher Lösung und Nullstellen. Dies ist eine direkte Versinnbildlichung des Ginzburg-Bereiches – das *mean field*-Modell liefert nicht mehr die richtige Beschreibung des kritischen Verhaltens und ist somit der falsche Ansatz.

Allerdings ist hier etwas Vorsicht geboten im Bezug auf Landau-Ginzburg-Theorie, denn ihre Anwendung ist in diesem Falle nicht trivial. Dies hat vor allem zwei Gründe: zum einen stellt sie Fluktuationen bezüglich eines globalen Ordnungsparameters durch einen Übergang zu einem lokalen Ordnungsparameter dar. In diesem Fall, vergleiche Kapitel 2, ist der Ordnungsparameter per se schon lokal, da die Abweichung der Winkel nicht uniform ist. Der zweite Grund ist die Tatsache, daß der lokale Ordnungsparameter in einem Kontinuumsmodell beschrieben wird (NO98), da nahe des kritischen Punkte die Korrelationslängen unendlich groß werden, und somit die Gitterabstände hiergegen klein. Der diskrete Kontext dieser Arbeit sollte jedoch erhalten bleiben, so daß man die Konzepte auf diesen Fall übertragen muß.

Der qualitative Aspekt der Theorie trifft hier voll und ganz zu, so daß die müßige Rechnung uns nicht weiter erhellen kann und hier übergangen sein mag. Eine quantitative Abschätzung der Größe des Ginzburg-Bereiches werden wir im Abschnitt 6.3 geben.

## 6.2 Der quantenmechanische Grundzustand

Zu Anfang dieses Abschnitts sei gleich ein Kommentar zu unseren numerischen Möglichkeiten gemacht. Da, wie in Kapitel 4.3 schon beschrieben, der nicht sonderlich effektive Powellsche Algorithmus verwendet wird, sind die Rechenzeiten bei großen Systemen (größer als etwa 50 Gitterplätze) enorm hoch. Eine Parallelisierung des Programmablaufes könnte bei einer späteren Optimierung schnellere Laufzeiten und somit die Behandlung größerer Systeme ermöglichen<sup>1</sup>. Eine weitere Verbesserungsmöglichkeit wäre eine umfassende Analyse der Richtungen, in die die Minima abweichen, und eine Einstellung der Richtungsmatrix darauf. In der folgenden Diskussion werden wir uns auf kleinere Systeme beschränken müssen, doch solange schmale Wände betrachtet werden, ist diese Betrachtung sicherlich physikalisch sinnvoll und richtig.

### 6.2.1 Korrekturen für feste Werte der Parameter

Zunächst wollen wir einen Blick auf die Korrekturen für feste Werte der Wechselwirkungsparameter werfen, damit wir eine erste Abschätzung zu ihrer Größe machen können. Als Beispiel betrachten wir ein System aus 40 Spins bei einem  $\kappa$  von 1.8,  $\kappa_d$  von 0.1 und  $S$  von 15, Abb. 6.3. Dieser Graph zeigt die absoluten Werte der Winkel gegen den Gitterplatz aufgetragen. Aufgrund der Symmetrie der Winkel ist nur eine Seite der Domänenwand aufgetragen, der Gitterplatz 20 ist also einer der zentralen Spins. Es fallen sofort zwei Dinge auf, nämlich zum einen, daß die Korrekturen nicht sonderlich groß sind, zum anderen weichen die zentralen Spins eindeutig zu kleineren Werten hin ab, die Wand scheint schmäler zu werden. Um eine qualitativere Aussage treffen zu

---

<sup>1</sup>Allerdings würde damit der gesamte Rechenaufwand steigen, da Parallelisierung in diesem Falle vor allem bedeutet, die Richtungsgradienten des Powell-Verfahrens möglichst alle simultan zu ermitteln.

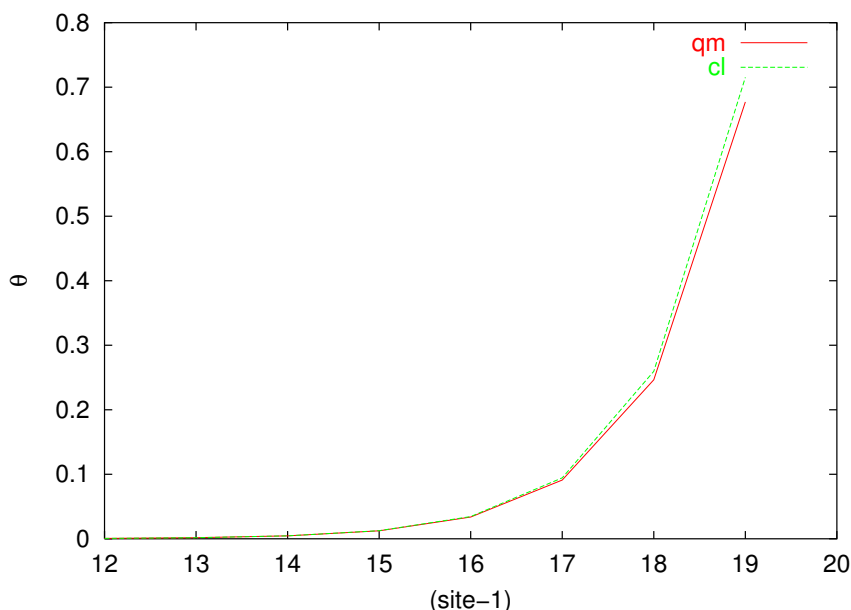


Abbildung 6.3: *Klassische Winkel (grün) und quantenmechanische Winkel (rot), absolute Werte, gegen Gitterplatz.*

können, plotten wir ab jetzt die relativen Korrekturen zu den einzelnen Winkeln, wie in Abbildung 6.4 zu sehen. Überraschenderweise zeigt sich nun sofort, daß nicht alle Winkel zu kleineren Werten hin korrigiert werden. Die Winkel vor dem 16. Gitterplatz zeigen eine positive Korrektur, ihr Wert erhöht sich. Offensichtlich wird die Form der Wand im Zuge der Korrektur verzerrt. Die (mathematische) Ursache hierfür finden wir, indem wir Korrekturen bei verschiedenen Parameterwerten vergleichen.

Wir beginnen mit den Korrekturen für verschiedene Werte von  $S$ , zu sehen in Abb. 6.5. Mit steigendem Spin sinkt, wie zu erwarten, die Magnitude der Korrektur, der Nulldurchgang jedoch bleibt unverändert. Dem leicht geänderten Verhalten an den äußeren Gitterplätzen ist wenig Bedeutung beizumessen, da diese Winkel sehr klein sind und numerische Schwankungen eher zum Tragen kommen.

Als nächstes betrachten wir den Effekt für verschiedene Werte von  $\kappa$ , dargestellt in Abb. 6.6. Hier sehen wir deutliche Veränderungen, sowohl in Magnitude der Korrektur als auch in der Position des Nulldurchgangs. Daß die quantenmechanischen Korrekturen in der Nähe des kritischen Punktes am größten werden, ist aufgrund der Ergebnisse und Diskussionen der vorherigen Kapitel nicht unerwartet. Offenbar ist es aber so, daß, je näher man dem kritischen Punkt kommt, desto eher alle Winkel zu einer Ising-Wand hin abweichen. Diesen Zusammenhang werden wir im nächsten Abschnitt noch diskutieren, wenn wir Korrekturen an einzelnen Winkeln für variable Wechselwirkungsparameter plotten.

Das  $\kappa$ -Verhalten ist eng verzahnt mit dem Verhalten bei veränderlicher demagnetisierender Energie. Dieses zeigt Abb. 6.7. Bemerkenswerterweise sinkt mit  $\kappa_d$  auch die Zahl der Winkel, deren Wert sich vergrößert. Zusammenfassend kann man die Vermu-

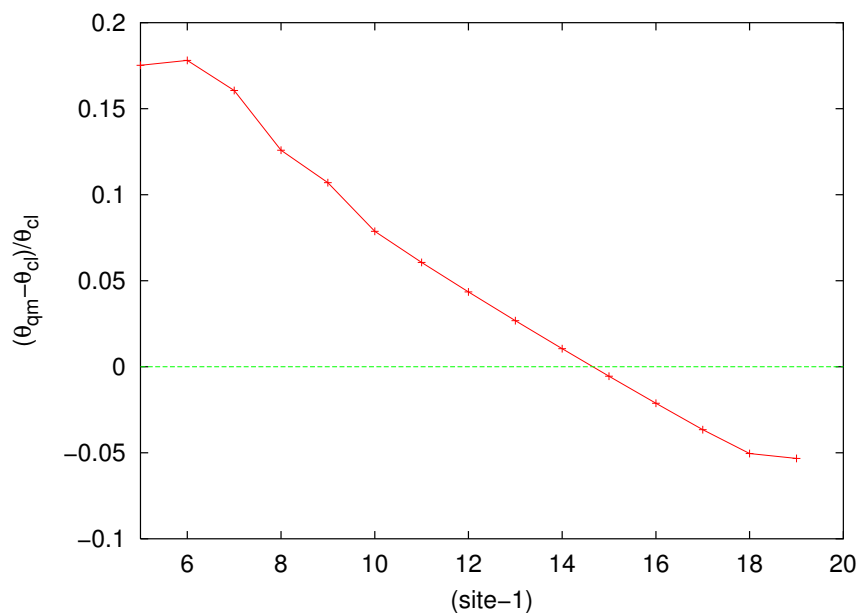


Abbildung 6.4: Die relative Korrektur pro Gitterplatz für  $\kappa = 1.8$ ,  $\kappa_d = 0.1$  und  $S = 15$ . Interessant ist, daß die Korrektur in verschiedene Richtungen wirkt, abhängig vom Gitterplatz.

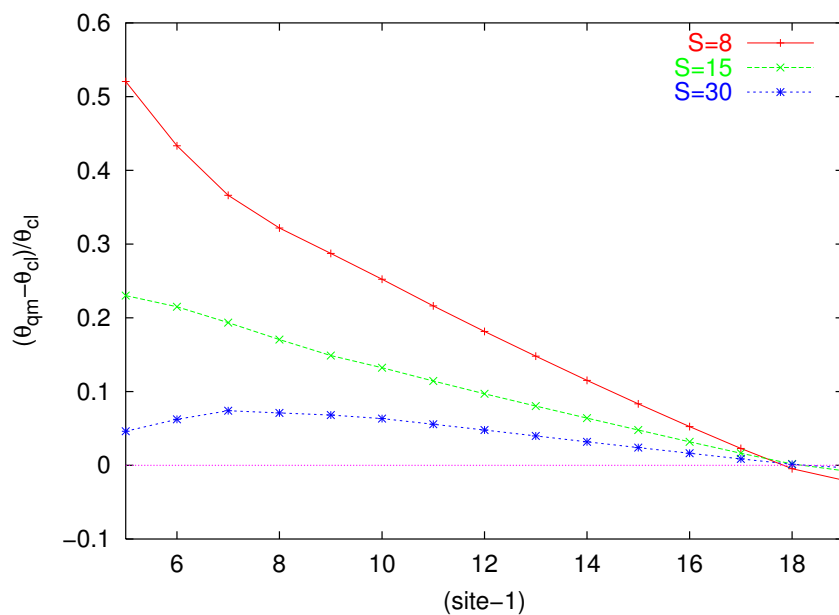


Abbildung 6.5: Die relativen Korrekturen für  $\kappa = 2$ ,  $\kappa_d = 0.1$  bei verschiedenen Spinwerten.

tung äußern, daß in den beiden Limites  $\kappa_d \rightarrow 0$  und  $\kappa \rightarrow \kappa_c$ , die uns beide nicht direkt



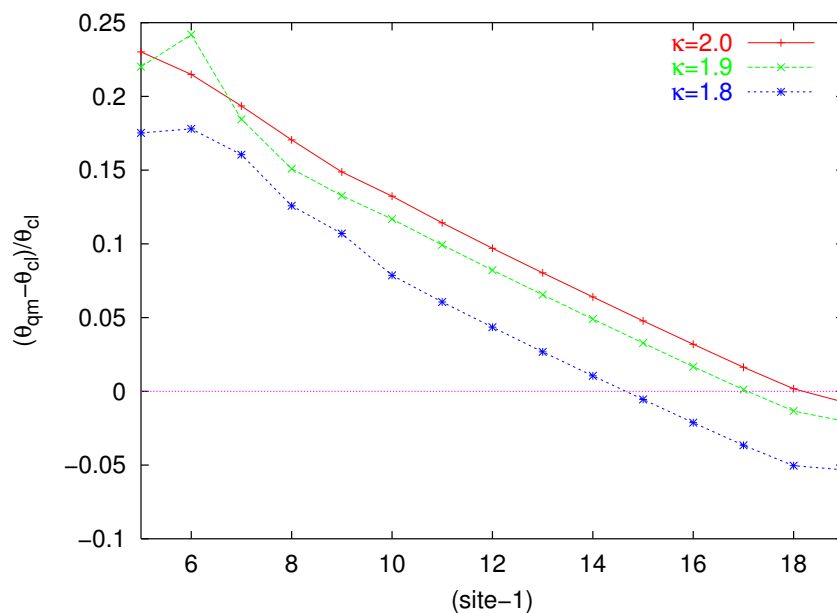


Abbildung 6.6: Die relativen Korrekturen bei  $\kappa_d = 0.1$ ,  $S = 15$  für verschiedene Werte von  $\kappa$ .

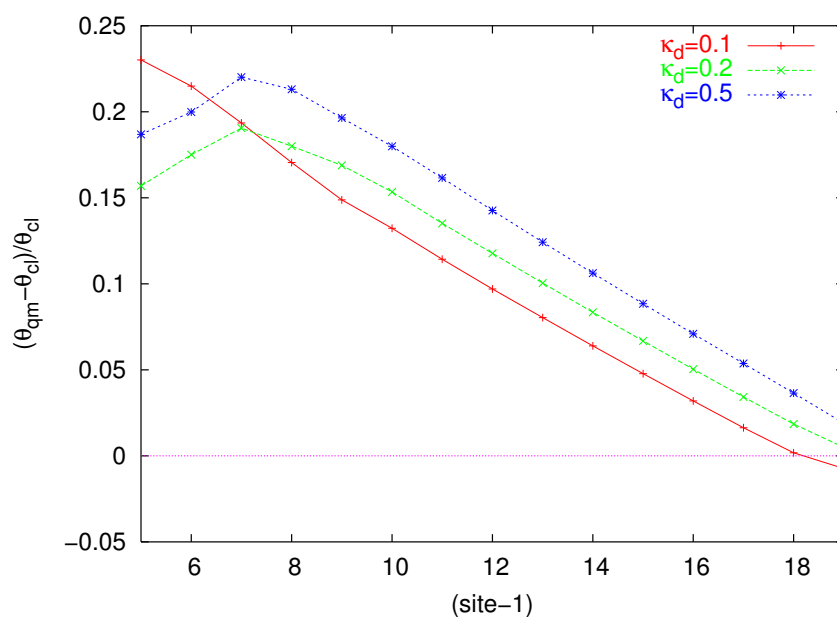


Abbildung 6.7: Die relativen Korrekturen bei  $\kappa = 2$ ,  $S = 15$  für verschiedene Werte von  $\kappa_d$ .

zugänglich sind, eine reine Absenkung des Winkel, die auch die Ordnungsparameter sind, eintritt, und somit ein höherer kritischer Punkt antizipiert wird.

## 6.2.2 Parameterabhängigkeit

In den folgenden Untersuchungen werden Systeme mit 30 Gitterplätzen betrachtet. Dies ist darin begründet, daß diese sehr oft ausgewertet wurden und nur auf diese Weise akzeptable Programmlaufzeiten erreicht wurden. Zunächst wollen wir uns dem einfachsten Fall zuwenden, veränderlichem Spin. Da wir eine  $1/S$ -Entwicklung betrachten, erwarten wir, daß sich im Limes großer  $S$  die klassische Lösung einstellt, unabhängig von der Tatsache, in welche Richtung der Winkel aufgrund der Korrekturen abweicht. Wir betrachten daher die Abbildungen 6.8 und 6.9, die die Abweichung des Winkels

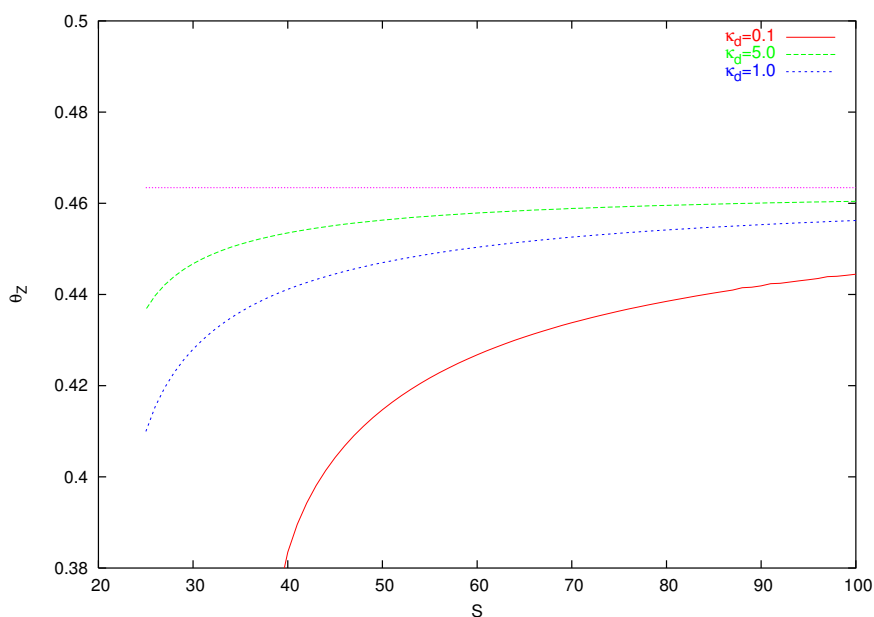


Abbildung 6.8: Der zentrale Winkel in einem System mit 30 Gitterplätzen,  $\kappa = 1.6$ , gegen den Spin für verschiedene Werte der demagnetisierenden Energie. Die klassische Lösung ist in violett angedeutet.

des Zentralspins, hier  $\theta_{15}$ , gegen  $S$  aufgetragen zeigen<sup>2</sup>. Beide Graphen demonstrieren sehr deutlich die Konvergenz zur klassischen Lösung, doch fallen dem geübten Auge sofort weitere Konsequenzen unserer Diskussion aus dem vorherigen Abschnitt auf. Der direkte Vergleich beider Graphen zeigt, daß der innerste Winkel selbst bei großen Werten von  $\kappa_d$  nahe des kritischen Punktes, bei  $\kappa = 1.6$ , immer zu kleineren Werten hin korrigiert wird. Bei  $\kappa = 1.7$  hingegen kann mit großem  $\kappa_d$  auch bei diesem innersten Winkel eine Abweichung nach oben auftreten. Daraus folgt, daß es für jedes  $\kappa_d$  einen Punkt  $\kappa_0$  geben muß, an dem die Korrektur dieses inneren Winkels im Betrag Null ist. Für die blaue Linie,  $\kappa_d = 1$ , liegt dieser Punkt offenbar nahe  $\kappa = 1.7$ , denn die Abweichungen sind schon minimal.

Bestätigt sich diese These, wenn wir veränderliches  $\kappa$  betrachten? Die Antwort ist ja.

<sup>2</sup>Zur besseren Übersichtlichkeit wurde der Ginzburg-Bereich in diesen Graphen nicht geplottet. Es gibt natürlich durchaus ein  $\Delta S_G$ , einen Bereich, in dem keine Lösung gefunden werden kann.

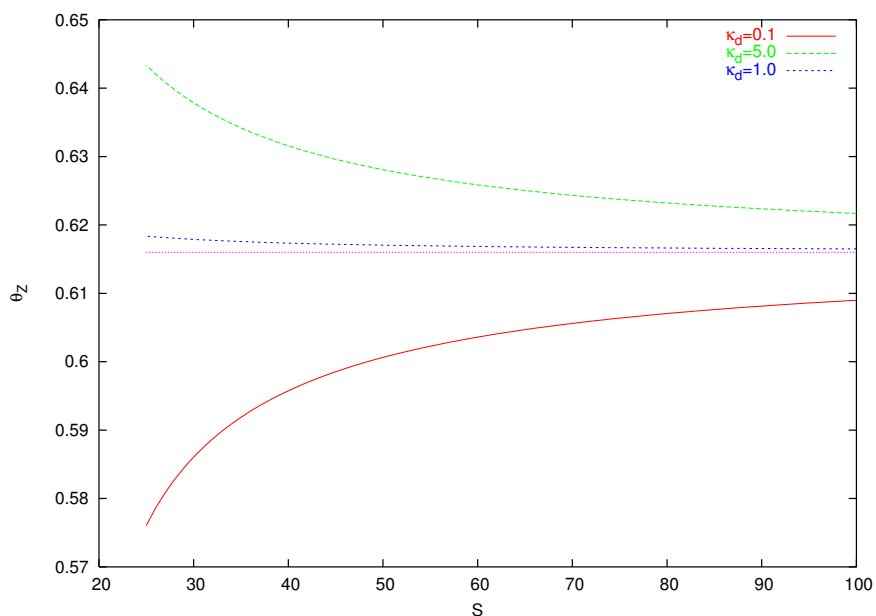


Abbildung 6.9: Der zentrale Winkel in einem System mit 30 Gitterplätzen,  $\kappa = 1.7$ , gegen den Spin für verschiedene Werte der demagnetisierenden Energie. Die klassische Lösung ist in violett angedeutet.

In Abb. 6.10 ist wieder der zentrale Winkel in der quantenmechanischen Lösung auf-

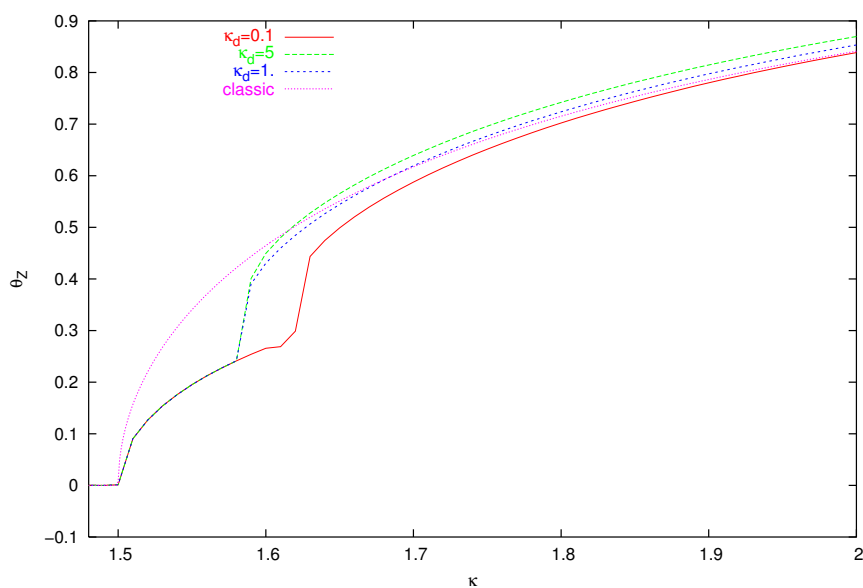


Abbildung 6.10: Der zentrale Winkel in einem System mit 30 Gitterplätzen,  $S = 30$ , gegen  $\kappa$  für verschiedene Werte der demagnetisierenden Energie.

getragen, diesmal in Abhängigkeit von  $\kappa$ . Betrachtet man die Kurven im Vergleich zur

klassischen Lösung, in violett gezeichnet, so erkennt man eindeutig die Schnittpunkte mit den einzelnen Kurven. Für  $\kappa_d = 0.1$  liegt dieser etwas rechts außerhalb des Graphen. Diese Schnittpunkte sind, wie schon aus der Betrachtung der einzelnen Abweichungen im vorherigen Abschnitt ersichtlich, für jeden Winkel verschieden. Es gibt also keinen Punkt, an dem für die gesamte Spinkette keine quantenmechanische Korrektur auftritt. Auch in diesen Graphen zu erkennen ist der Ginzburg-Bereich durch das „Abknicken“ der Kurven. Die Fortsetzung der Kurve kommt durch die Behandlung der Singularität der quantenmechanischen Energie bei Auftreten eines negativen Eigenwertes in  $M$  oder  $N$  zustande. Es wurde numerisch eine Energiebarriere an der Stelle geschaffen, an der der negative Eigenwert auftritt, so daß das Ergebnis der Powell-Minimierung in dieser Konfiguration exakt diese Stelle angibt. Eine wichtige Bemerkung ist hier angebracht. Wie vielleicht auffällt, unterscheiden sich die Abknickstellen für  $\kappa_d = 1$  und  $\kappa_d = 5$  kaum. Das ist einfach zu erklären. Für kleinere  $\kappa_d$  messen wir natürlich noch immer die in Abschnitt 6.1.1 diskutierten negativen  $M$ -Eigenwerte. Ist die Energiekurve aber genügend gehoben, wird der Punkt, an dem diese Auftreten, über den Punkt hinausgeschoben, an dem die negativen  $N$ -Eigenwerte auftreten – den Rand des (eigentlichen) Ginzburg-Bereiches, auf dessen Position die demagnetisierende Energie keinerlei Einfluß haben kann. Sie verändert nur die Matrix  $M$ .

Der gesamte Ginzburg-Bereich setzt sich also aus dem durch die azimuthalen Fluktuationen bestimmten Bereich und dem durch die Fluktuationen am kritischen Punkt bestimmten Bereich zusammen. Nur die Größe des ersteren kann durch  $\kappa_d$  manipuliert werden.

Als letztes betrachten wir noch die Abhängigkeit von  $\kappa_d$ , Abb. 6.11. Dieser Graph wiederholt in deutlicher Weise noch einmal, was eben diskutiert wurde. Bei sehr niedrigen Werten von  $\kappa_d$  erkennt man, von der klassischen Lösung her schnell abfallend, wie die demagnetisierende Energie den Nullpunkt des niedrigsten Eigenwertes von  $M$  verschiebt, bis schließlich der Nulldurchgang der niedrigsten Mode von  $N$  erreicht wird. Dort verharrt sie dann. Schließlich hat sich ein Minimum ausgebildet, daß den Anforderungen von Sektion 6.1.1 entspricht, und wir erhalten eine physikalisch sinnvolle Lösung, die nach unten vom klassischen Winkel abweicht. Schließlich, auf dem Graphen leider nicht mehr zu erkennen, wird sie diese kreuzen.

Zusammenfassend läßt sich also neben der trivialen Feststellung, daß mit zunehmendem Spin die Korrekturen kleiner werden, also das System den klassischen Limes korrekt wiedergibt, statuieren, daß oberhalb (und nur oberhalb, das zeigen auch die numerischen Ergebnisse) des kritischen Punktes ein Einschalten des demagnetisierenden Effekts immer eine Vergrößerung der Winkel im Vergleich zum Falle ohne Demagnetisierung mit sich bringt. Mit  $\kappa$  treten (oberhalb des kritischen Punktes) negative Abweichungen der Winkel auf. Diese Abweichungen sind extrem stark nahe des kritischen Punktes, so daß das demagnetisierende Feld hier im erlaubten Bereich immer zu schwach ist, diese in den positiven Bereich zu heben. Da der Betrag der negativen Abweichungen jedoch mit größerem  $\kappa$  immer kleiner wird (und schließlich verschwindet), tritt mit endlichem  $\kappa_d$  für jeden Winkel an einer bestimmten Stelle  $\kappa_{i,0}$  eine Aufhebung der positiven und der negativen Korrekturen auf. Somit ist das Verhalten phänomenologisch verstanden.

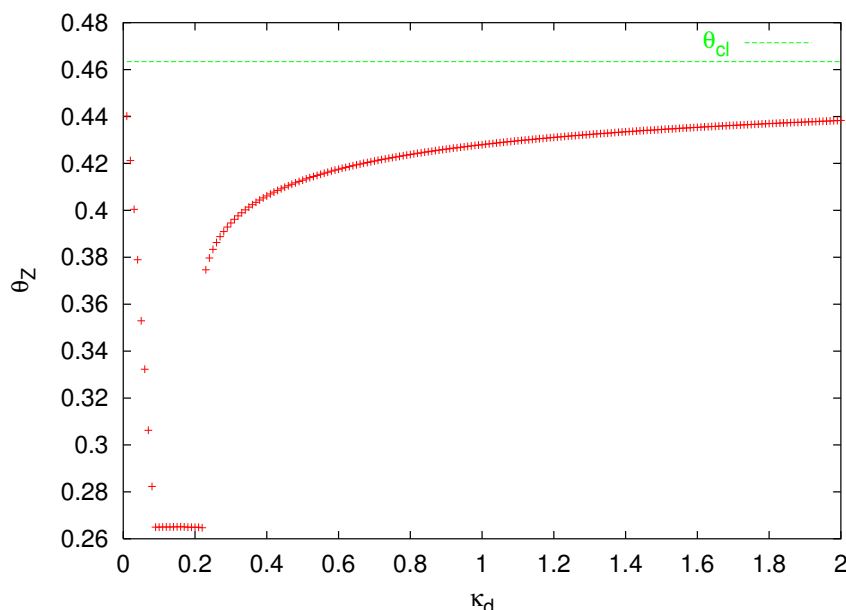


Abbildung 6.11: Die Abhängigkeit des Zentralwinkels von  $\kappa_d$  im quantenmechanischen Fall und Vergleich mit der klassischen Lösung (grüne Linie). Die Parameter hier sind  $S = 30$  und  $\kappa = 2$ .

Doch die wichtige und durchaus berechtigte Frage, die sich hier stellt, ist die nach der physikalischen Interpretation des Beobachteten. Die intuitive Vorstellung, daß Magnonen (und somit auch Nullpunktsschwingungen) im Ising-Falle energetisch günstiger angeregt werden können, wird hier nicht widerlegt – zum kritischen Punkt hin bemerkt man ein Verhalten, daß genau diese Tendenz zeigt, und, wie durch Extrapolation im nächsten Abschnitt gezeigt wird, verschiebt sich der kritische Punkt tatsächlich hin zu höheren Werten. Dennoch ist *ad hoc* vollkommen unklar, warum bei breiteren Wänden die Erhöhung der Energie einer Auslenkung in *y-Richtung* eine breitere Wand in der *x-z-Ebene* zur Folge haben sollte.

An dieser Stelle kann nur eine durchaus plausible Theorie angebracht werden. Die demagnetisierende Energie friert einen Freiheitsgrad des Systems in zunehmendem Maße ein. Wir betrachten nun die beiden Zentralwinkel der (schmalen) Domänenwand. Diese schließen den größten Winkel miteinander ein. Dies ist ungünstig für die Austauschenergie. Ist die Bewegung in *y-Richtung* nicht eingeschränkt, so wird die resultierende Austauschkraft dazu tendieren, die beiden Spins durch Drehung in der *y-Ebene* näher zueinander zu drehen. Zur Verdeutlichung können wir hierzu Abb. 6.12 betrachten. Die beiden Teilbilder zeigen eine Aufsicht auf die *x-z-Ebene* und die *x-y-Ebene*. Die oberste Domänenwand ist der Ising-Fall. Darunter sehen wir den Néel-Fall, alle Auslenkungen finden in der *x-z-Ebene* statt, der Winkel zwischen den beiden Zentralspins ist sehr groß. Es fällt auf, daß die Winkel in der *x-y-Ebene* parallel liegen. Vergrößert man nun, wie oben erwähnt, die *y-Komponente*, so stellt sich Wand C ein: Die Projektion auf die *x-y-Ebene* der Parallelität wird größer, die auf die *x-z-Ebene* kleiner.

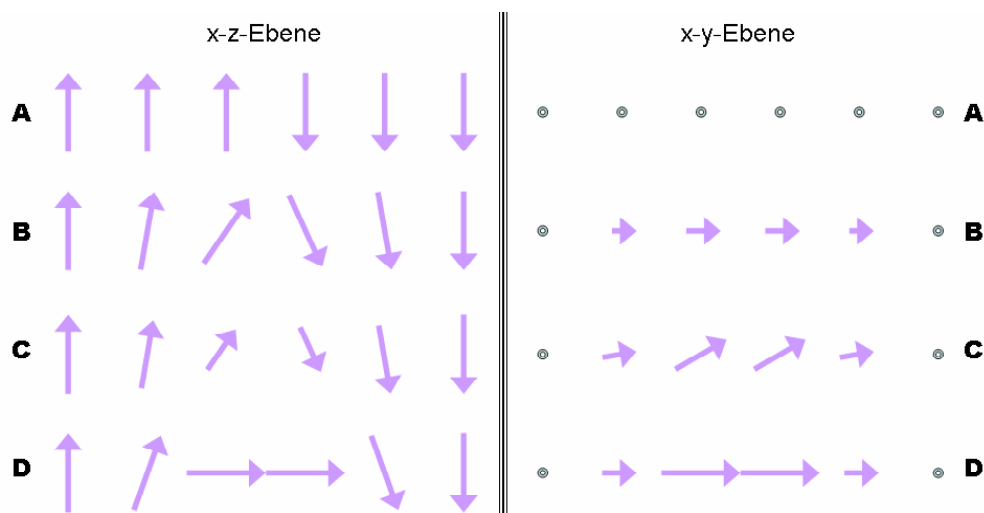


Abbildung 6.12: Eine mögliche Erklärung der breiteren Wände in Gegenwart der demagnetisierenden Energie. Siehe Text.

Lokal liegen die inneren Winkel nun eher parallel. Dieser Prozeß wird mit steigender Demagnetisierung unterdrückt. Die Konsequenz ist, daß die Kraft zur Parallelstellung nun in der Ebene wirkt und nicht mehr isotrop in dem Sinne, daß diese Abweichungen in positiver oder negativer  $y$ -Richtung erfolgen können, und somit  $\langle S^x \rangle$  gleich bliebe. Sie wirkt *nur* zu breiteren Wänden hin. Der Extremfall ist als Wandtyp D in der Abbildung zu sehen.

Leider eignet sich unser Modell schlecht, einen Beweis für diese Theorie zu führen. Interessant wäre eine Betrachtung von Domänenwänden in einem XY-Modell.

### 6.3 Quantenkritisches Verhalten

Der visuelle Eindruck der Kurven 6.10 legt die Interpretation nahe, daß sich der kritische Punkt zu größeren Werten von  $\kappa$  hin verschiebt und durchaus in seiner Lage auch vom demagnetisierenden Feld abhängig ist. Nun soll versucht werden, diesen Zusammenhang durch geeignete Fits in eine numerische Aussage zusammenzufassen.

#### Auswahl der Fitfunktion

Zur Auswahl der Fitfunktion bieten sich zwei Herangehensweisen an. Zum einen ist uns noch aus Abschnitt 5.2 bekannt, daß der innerste Spin im klassischen Vierplatzmodell einer Arkuskosinusabhängigkeit folgt. Daher ist unser erster Ansatz für eine Fitfunktion

$$\theta_1^f(\kappa) = \arccos\left(\frac{\kappa a_1}{\kappa - b_1}\right), \quad (6.1)$$

wobei  $a_1$  und  $b_1$  die Fitparameter sind. Diese Wahl bietet den Vorteil, daß sie zum einen grob dem Kurvenverlauf entspricht, zum anderen ihre Nullstelle einfach zu

$$\kappa_{c,1} = \frac{b_1}{a_1 - 1} \quad (6.2)$$

folgt.

Die andere Option wäre eine Polynomialfit. Dessen Vorteil ist die Flexibilität, in genügend hoher Ordnung beliebig genau die Funktion zu beschreiben. Der Nachteil des Ansatzes ist die etwas kompliziertere Bestimmbarkeit der Nullstellen und natürlich die Tatsache, daß ein Fit über den kompletten  $\kappa$ -Bereich eine sehr hohe Ordnung benötigen würde. Dieses Problem wurde dadurch gelöst, daß wir das Verhalten nur lokal für  $\kappa \in [1.5, 2]$  beschreiben und bis zu sechster Ordnung gehen, also

$$\theta_2^f(\kappa) = a_2x^6 + b_2x^5 + c_2x^4 + d_2x^3 + e_2x^2 + f_2x + g. \quad (6.3)$$

Beide Ansätze liefern ein ähnliches  $\chi^2$  in Ordnung von  $10^{-5}$ , so daß sie beide mit ihren Resultaten diskutiert werden sollen.

Wir betrachten zunächst Beispielfits in Abb. 6.13. Da der Polynomialfit (6.3), gezeich-

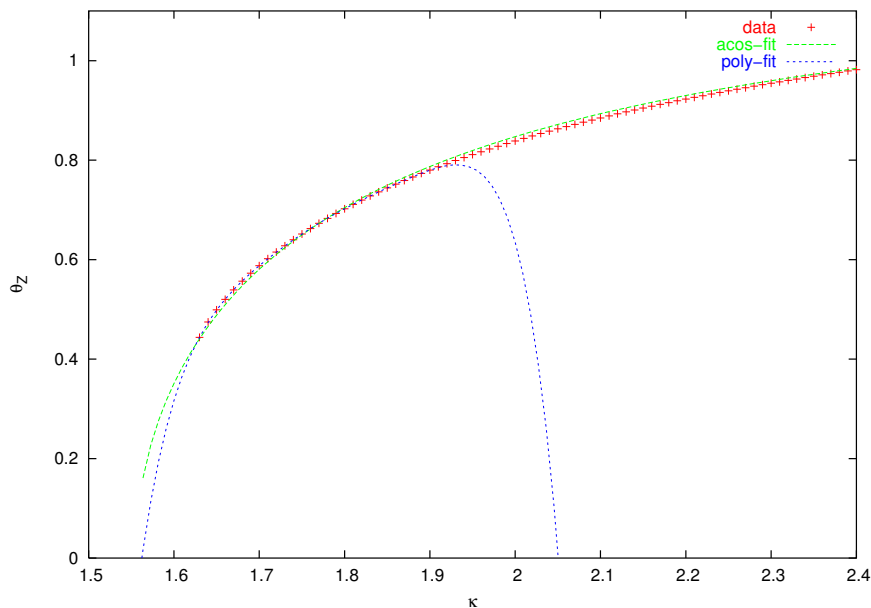


Abbildung 6.13: Direkter Vergleich der Fits.

net in blau, die besten Resultate nur dann liefert, wenn man nur die etwa 370 Fitpunkte im  $\kappa$ -Bereich zwischen 1.63 und 2.0 betrachtet, folgt er oberhalb des Bereiches kaum noch den Meßpunkten. Im betrachteten Bereich scheint er diese jedoch exakt zu durchlaufen. Dies zeigt uns sowohl die Vor- wie auch die Nachteile dieses Fitverfahrens: Es liefert eine gute Beschreibung, kann aber schon wenig außerhalb des betrachteten Bereiches unberechenbares Verhalten zeigen.

Der Arkuskosinusfit, Gl. (6.1), in grün gehalten, beschreibt das allgemeine Verhalten des Winkels besser, zeigt aber im Detail gewisse Abweichungen in der Krümmung. Es bleibt jedoch anzumerken, daß der Fehler in den Parametern hier kleiner ist als beim Polynomialfit. Daher wird auch der Fehler in einer Abschätzung des kritischen Punktes hier kleiner sein.

Eine weitere Fehlerursache ist natürlich die, daß für kleine  $\kappa_d$  der Ginzburg-Bereich immer größer wird, also in der Nähe des kritischen Punktes weniger numerische Daten verfügbar sind. Auch dies ist in unsere Fehlerabschätzung eingegangen.

Kommen wir nun zunächst zu den Daten in Abhängigkeit von  $\kappa_d$ . Ergebnisse für eine Systemgröße von 30 Gitterplätzen sind in den Abbildungen 6.14 und 6.15 zu sehen.

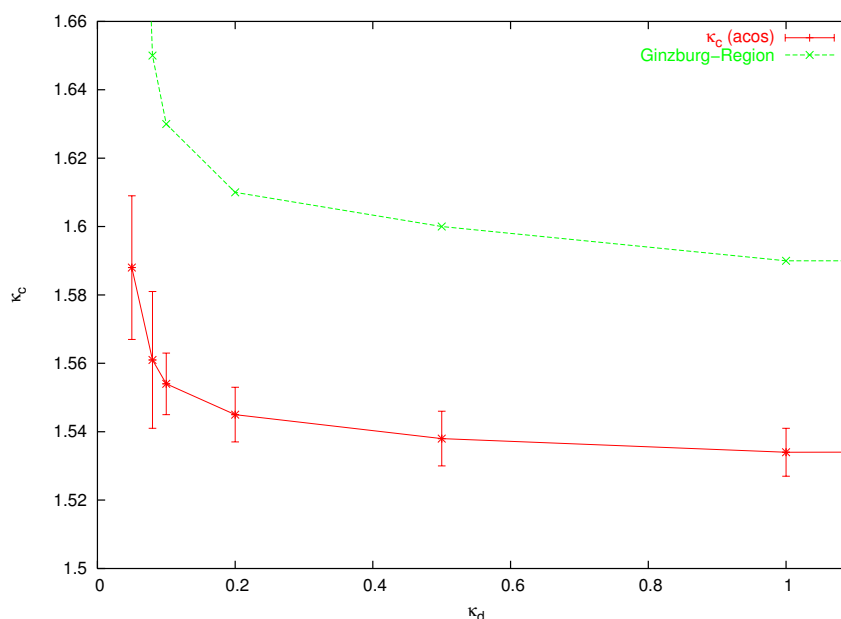


Abbildung 6.14: Fits nach dem Arkuskosinus für verschiedene Werte von  $\kappa_d$ . Aufgetragen sind in rot die gewonnenen Werte für das quantenmechanische  $\kappa_c$ , in grün die obere Grenze der Ginzburg-Region.

Der Spin wurde hierbei auf 30 angesetzt. Zum Vergleich sind auch die oberen Grenzen der Ginzburg-Region im Graph angegeben (grün). Bis auf die unterschiedlichen Fehler zeigen beide Graphen miteinander vereinbares Verhalten. Mit größer werdender Demagnetisierung scheint sich der kritische Punkt in der Nähe von etwa 1.53 einzupendeln. Interessant ist das Verhalten für kleinere  $\kappa_d$ : Der kritische Punkt läuft immer schneller auf Werte zu, die sogar schon in der Nähe von 1.6 liegen. Eine Abschätzung zu  $\kappa_d = 0$  ist schwierig, vielleicht sogar unmöglich, da die Ginzburg-Region ebenso schnell anwächst und keine festen Aussagen mehr zu treffen sind. In diesem Bereich wird das in dieser Arbeit verwendete Modell nicht mehr anwendbar.

In Abhängigkeit vom Spin geschieht nichts unerwartetes, je größer der Spin wird, desto mehr verschiebt sich der kritische Punkt zum klassischen Falle hin. Der Vollständigkeit halber ist dieses Verhalten in Abb. 6.16 zu sehen, hier nur für den Arkuskosinusfall.



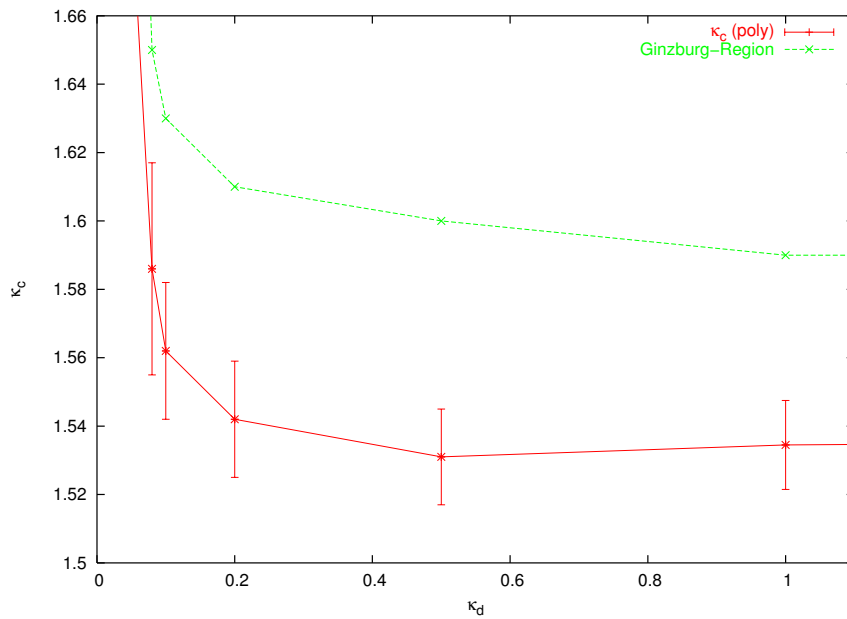


Abbildung 6.15: Fits nach dem Polynom 6. Ordnung für verschiedene Werte von  $\kappa_d$ . Aufgetragen sind in rot die gewonnenen Werte für das quantenmechanische  $\kappa_c$ , in grün die obere Grenze der Ginzburg-Region.

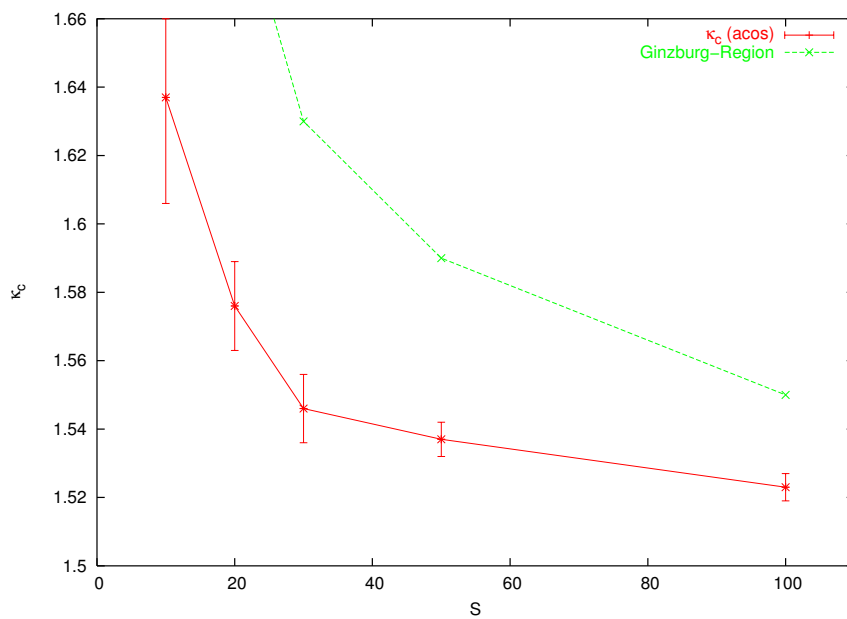


Abbildung 6.16: Fits nach dem Arkuskosinus für verschiedene Werte des Spins. Aufgetragen sind in rot die gewonnenen Werte für das quantenmechanische  $\kappa_c$ , in grün die obere Grenze der Ginzburg-Region.

## 6.4 Magnonen und Korrekturen im quantenmechanischen Grundzustand

Zum Abschluß dieser Dissertation soll noch betrachtet werden, wie stark die Frequenzen der Magnonen und die Fluktuationskorrekturen in der Energie vom Falle des klassischen Grundzustandes abweichen. Die Struktur dieser Abweichungen wird sich als hochinteressant herausstellen – tatsächlich geben sie uns den Hinweis, daß eine weitere Symmetrie des Systems bislang nicht behandelt wurde: Die Position der Domänenwand. Diese wird sich aber nicht als Problem herausstellen.

### 6.4.1 Abweichung der Magnonenfrequenzen

Die Betrachtung der Abweichungen zu den einzelnen Moden stellt am ehesten heraus, wie sich der quantenmechanische Grundzustand darstellt. Wir werden im folgenden nur die relativen Korrekturen (im Vergleich zu den Moden im klassischen Grundzustand) betrachten, da große Abweichungen nur in der Nähe des kritischen Punktes und im Bereich kleiner Peierls-Barrieren auftreten.

Wir betrachten daher zunächst die Abweichungen der beiden niedrigsten Moden nahe des kritischen Punktes im Beispiel des Systems aus 30 Spins. Diese sind in Abb. 6.17 in

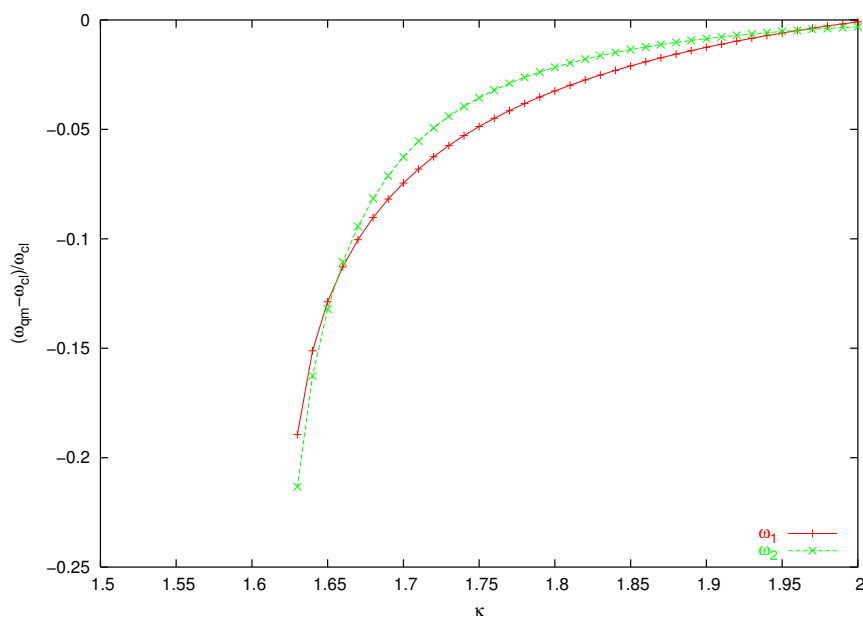


Abbildung 6.17: Korrekturen zu den beiden niedrigsten (lokalen Moden) in einem System aus 30 Gitterplätzen,  $S = 30$ ,  $\kappa_d = 0.1$ , nahe des kritischen Punktes.

Abhängigkeit von  $\kappa$  geplottet. Wir stellen keinerlei überraschendes Verhalten fest: Nahe des kritischen Punktes zeigen die beiden lokalisierten Moden große Abweichungen, wobei die den Phasenübergang bestimmende Mode die größten Korrekturen aufweist.

Für die höheren Moden, das Band, stellen wir fest, daß die Korrekturen um zwei Größenordnungen kleiner sind. Beispiele dafür sieht man in Abbildung 6.18, die im gleichen

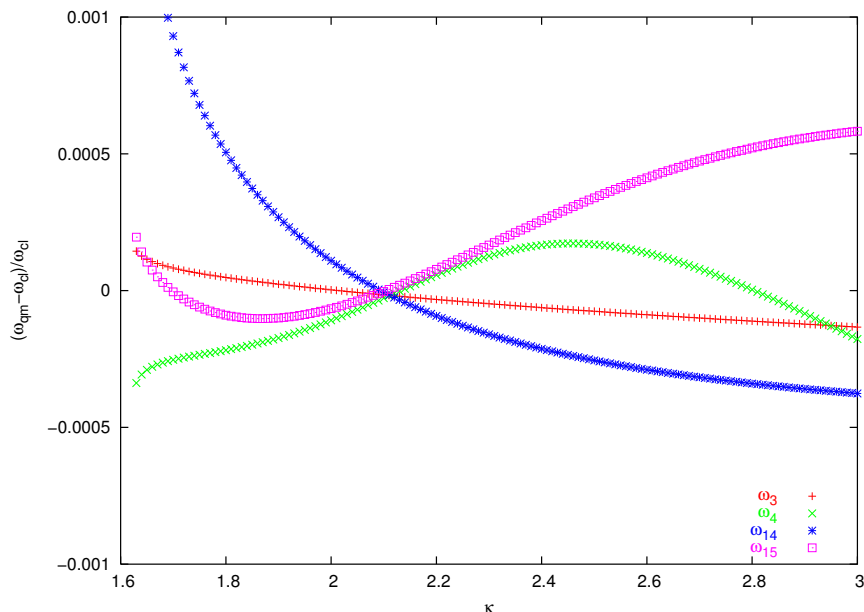


Abbildung 6.18: Korrekturen zu den höheren Anregungsmoden in einem System aus 30 Gitterplätzen,  $S = 30$ ,  $\kappa_d = 0.1$ . Die Abweichungen sind extrem gering.

System aufgenommen wurde. Beachtenswert ist die Veränderung der Größenskala auf der Abszisse. Die Korrekturen erreichen hier Werte von maximal einem Promille nahe des kritischen Punktes, wo auch diese Korrekturen am größten sind.

Interessanter wird das Bild, wenn wir größere Werte von  $\kappa$  betrachten. Im System aus 30 Gitterplätzen stellen wir einen Zusammenbruch unserer Näherung bei  $\kappa = 4$  fest: Eine der Anregungsmoden wird hier (innerhalb der Genauigkeit des Powellschen Algorithmus) Null. Haben wir es wieder mit einer gebrochenen Symmetrie zu tun? Die Antwort darauf lautet: Im thermodynamischen Limes ja. Die Lösung hier ist die, daß es die *Position* der Domänenwand ist, die nicht klar definiert ist. Das Auftreten dieses Effektes erst bei hohen Werten von  $\kappa$  ist damit zu begründen, daß erst dort die Barrierenhöhe im Peierls-Potential hinreichend absinkt und in die Größenordnung der Quantenkorrekturen kommt. In der Kontinuumstheorie des thermodynamischen Limes bei  $\kappa \rightarrow \infty$  ist dies tatsächlich ein kontinuierliche Symmetrie, die die Existenz einer Goldstone-Mode rechtfertigt. In unserem Falle kommt diese Mode nur (zu) nahe an Null. Die Richtigkeit dieser Theorie läßt sich durch Betrachtung aller „Puzzlestücke“ erschließen.

- Zunächst betrachten wir den Verlauf der niedrigsten Mode für zwei verschieden große Systeme unter ansonsten gleichen Parametern ( $S = 30, \kappa_d = 0.1$ ), Abb. 6.19. Es ist offensichtlich, daß sich der Bereich der Absenkung der niedrigsten Mode, der zunächst nur bei schmalen Wänden kritisch wird, in größeren Systemen

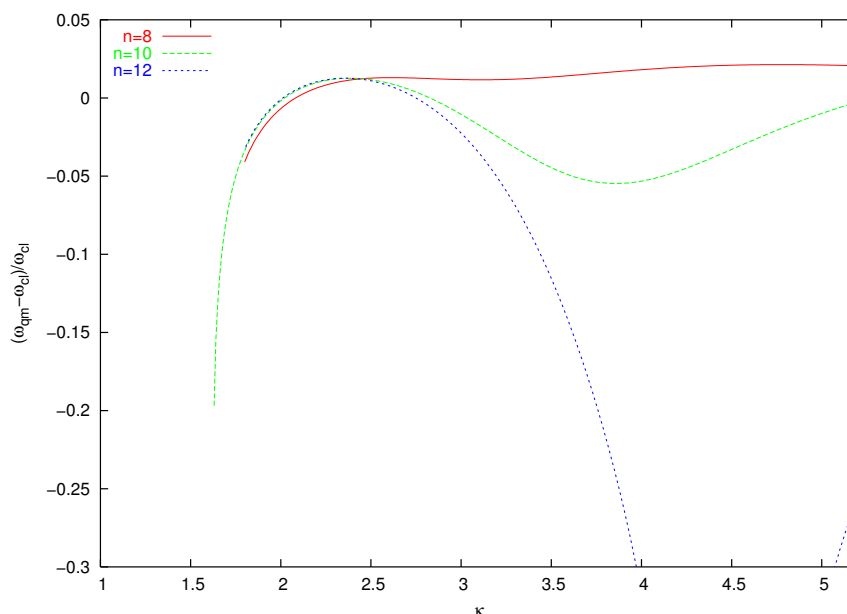


Abbildung 6.19: Verlauf der Korrektur der niedrigsten (lokalen) Moden für größere Werte von  $\kappa$  in relativ kleinen Systemen. Besonders bemerkenswert ist, wie schnell sich die im Text beschriebene „instabile“ Region ausbildet.

sowohl ausdehnt als auch ein niedrigeres Minimum aufweist. Die Begründung hierfür ist, daß schmale Domänenwände sich in kleinen Systemen tatsächlich verschieben lassen, ohne daß die Randeﬀekte die Symmetrie in diesem (anderen) lokalen Minimum zu sehr erhöhen, daß dieses mehr gewählt würde. Werden die Wände breiter, tritt aber gerade dieser Erhöhungseﬀekt massiv ein, und das Problem verschwindet. Sind nun mehr Gitterplätze vorhanden, sinkt zum einen der Energieunterschied zwischen den lokalen Maxima bei den schmalen Wänden derart, daß die Mode noch mehr abgesenkt wird. Zum anderen wird er bei breiteren Wänden klein genug, als daß diese auch verschoben werden könnten.

- Die Peierls-Barriere zwischen den Minima fällt nach den Betrachtungen in Kapitel 3 extrem schnell ab, siehe auch Abb. 3.11. Damit liegt die Barrierenhöhe im Bereich von  $\kappa = 4$  bereits längst im Bereich der quantenmechanischen Korrekturen.
- Diese neue Goldstone-Mode findet ihren Ursprung in einem Nulleigenwert der Matrix  $N$ . Diese ist  $s_x$  zugeordnet, und auch eine weitere Untersuchung der Mode deutet darauf hin, daß der Eigenwert  $\langle s_x \rangle$  hier maximal unbestimmt ist. Dies weist auf die Spinﬂips hin, die für die Verschiebung der Wand nötig sind.
- Für unterschiedliche demagnetisierende Energie sehen wir einen Plot in Abb. 6.20. Der Eﬀekt wird mit steigender demagnetisierender Energie verschärft. Wir hatten jedoch festgestellt, daß eine Art Quetschung der Präzession bei Erhöhung

von  $\kappa_d$  auftritt, die die  $s_x$ -Fluktuationen erhöht - also ein Flippen von Spins einfacher macht.

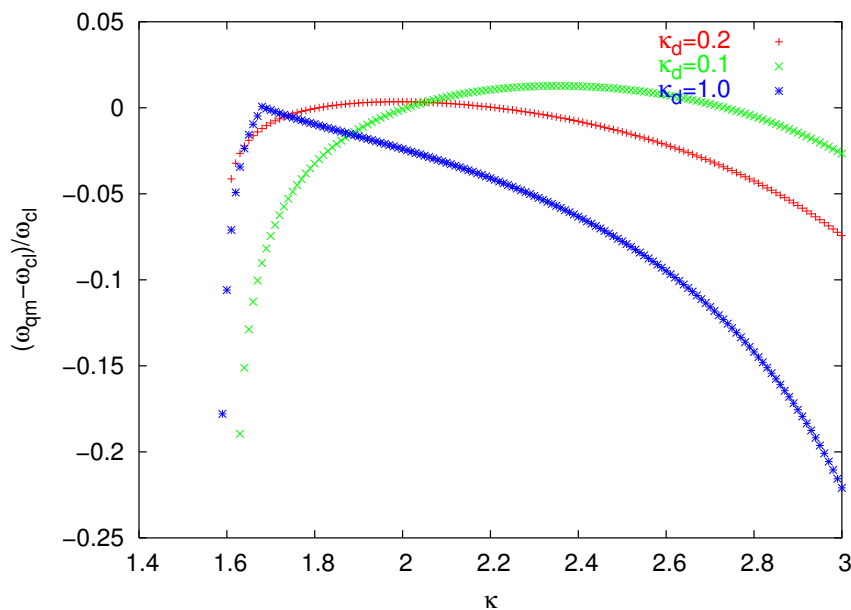


Abbildung 6.20: Die Korrektur zur niedrigsten Anregungsmode für verschiedene Werte der demagnetisierenden Energie in einem System aus 10 Spins,  $S = 30$ , in Abhängigkeit von  $\kappa$ .

Diese Fast-Symmetrie kann durch ein künstlich hinzugefügtes Barrierenpotential gebrochen werden. Diesen Weg wollen wir nicht beschreiten, da unser ganzes Modell dann eher zu einem theoretisch-künstlichen Modell hin verändert wird, dessen Interpretation vielleicht nicht immer klar ist. Daher wird in der Numerik einfach diese niedrige Mode aus der Betrachtung entfernt, da sie ohnehin nur einen verschwindend kleinen Beitrag zur Gesamtenergie liefert. Damit frieren wir die Diffusion ein.

### 6.4.2 Abweichung der Energie

Damit wollen wir die Betrachtung der Moden verlassen und einen Blick auf die Energiekorrekturen werfen. Ein Beispiel hierfür sehen wir in Abb. 6.21. Geplottet ist die Abweichung der quantenmechanischen Energie im quantenmechanischen Grundzustand von der quantenmechanischen Energie im klassischen Grundzustand. Die Korrekturen sind insgesamt extrem klein, nur am kritischen Punkt treten Werte bis zu 1% am Rande des Ginzburg-Bereiches auf.

Mit den quantenmechanischen Grundzuständen und der dortigen Energie bewaffnet sind wir nun bereit, Korrekturen zu Experimenten zu diskutieren.

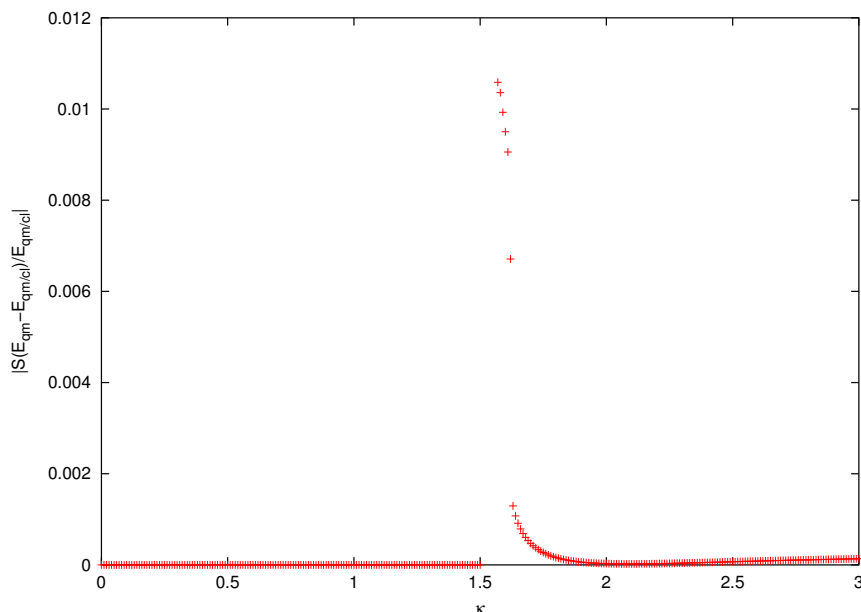


Abbildung 6.21: Die relative Korrektur der quantenmechanischen Energie im quantenmechanischen Grundzustand zur quantenmechanischen Energie im klassischen Grundzustand für ein System von 30 Spins,  $S = 30$ ,  $\kappa_d = 0.1$ .

## 6.5 Korrekturen zum Experiment

Um eine Korrektur für das in Kapitel 2 besprochene Experiment herzuleiten, sind wir vor mindestens ein größeres Problem gestellt: Die *out-of-plane*-Anisotropie, also das, was wir als demagnetisierendes Feld eingeführt haben, wurde bislang für die Monolagen noch nicht bestimmt. Es kann also nur eine tendenzielle Aussage gemacht werden. Mit dem Wissen, daß in der Doppellage schon die leichte Richtung aus der Schichtebene heraus zeigt, kann man zumindest aussagen, daß die demagnetisierende Energie der Monolage nicht all zu groß sein sollte. Diese Fragestellung ist natürlich extrem relevant, denn, denken wir zurück an Kapitel 3, so haben wir dort ein korrigiertes  $\kappa$  zu 4 bestimmt. Dies liegt für sehr kleine demagnetisierende Felder gerade in dem Bereich, in dem der Übergang von einer Verschmälerung der Wand zu einer Verbreiterung der Wand vorliegt. Ohne ein genaueres Wissen um die Demagnetisierung ist also schon eine qualitative Aussage darüber, ob und wie die in Abschnitt 3.5 hergeleiteten Korrekturen modifiziert werden müssen, hier nicht möglich.

Wir wollen dennoch zunächst kurz die Konsequenzen umreißen, die sich aus den bislang bestimmten Korrekturen ergeben, und danach ein (wenn auch fiktives) Beispiel betrachten. Zunächst gibt es einen Bereich, in dem die Wände durch die quantenmechanischen Effekte schmaler werden, die Breite der Wand ist kleiner. Nach (3.7) ist die Breite im Kontinuumsmodell proportional der Wurzel aus  $\kappa$ . Die Messung ergibt also ein noch kleineres  $\kappa$ , so daß das Ergebnis im Gegensatz zum wahren Wert, vergleichen wir mit Abb. 3.5, noch mehr verfälscht wird. In diesem Fall wird die quantenmechani-

sche Formkorrektur eine größere Abweichung der Kontinuumstheorie auslösen. Ab einem weiteren Punkt auf der  $\kappa$ -Achse wird die Wand im ganzen breiter, so daß man ein höheres  $\kappa$  messen würde. Dies würde die Abweichungen vom Kontinuumsmodell wiederum verkleinern und vielleicht bei sehr großen  $\kappa$  dann aufheben.

Im Bezug auf die Energie kann man natürlich ähnliche Betrachtungen anstellen, da auch diese Korrektur, abhängig von den Parametern, größer oder kleiner als Null sein kann.

Zusammenfassend läßt sich also sagen, daß die Quantenkorrekturen keinerlei globale Abweichung in eine bestimmte Richtung voraussagen. Ihre Größe und Art hängt vollkommen von den speziellen Materialparametern ab. Nur für fest bestimmte Parameter läßt sich eine eindeutige Aussage machen. Ein solche Wahl von Parametern wollen wir nun quantitativ betrachten. Es wurde wiederum ein System aus 30 Spins gewählt, ein demagnetisierendes Feld von  $\kappa_d = 0.1$  und ein Spin von 15. In Abb. 6.22 ist das erweiterte Bild zu Abb. 3.5 zu sehen. Zunächst ist zu bemerken, daß unterhalb von  $\kappa = 1.8$

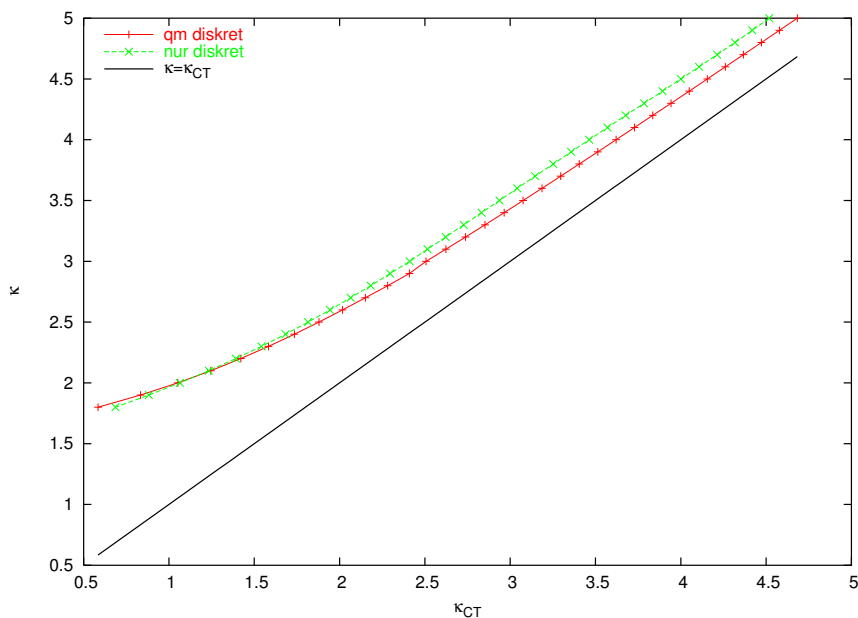


Abbildung 6.22: Korrekturen zu  $\kappa$  aufgrund der diskreten Struktur und der Quantenkorrekturen für ein Beispielsystem mit  $S = 15$ ,  $\kappa_d = 0.1$ . Aufgetragen ist wiederum  $\kappa$  gegen  $\kappa_{CT}$ .

aufgrund der Ginzburg-Region keinerlei Ergebnisse im quantenmechanischen Fall vorliegen.

Die Quantenkorrekturen (rot) sind auf keinen Fall zu vernachlässigen, und ihr Verlauf bestätigt die eben qualitativ angesprochene Tendenz. Nahe des kritischen Punktes weicht die Kurve nach unten von der rein diskreten Korrektur (grün) ab, kreuzt sie dann bei etwa 2.05 und ergibt dann Werte, die näher am wirklichen Wert von  $\kappa$  liegen. Dieses Annäherungsverhalten verstärkt sich bei größeren Werten von  $\kappa$  noch, allerdings müssen wir beachten, daß wir ein System von nur 30 Spins betrachten: Ab

einem bestimmten Punkt lassen die Effekte der endlichen Größe des Systems keinerlei verlässlichen Fit zu. Man sieht also in diesem System dem Punkt nicht, an dem die im Kontinuumsmodell bestimmten Werte nach oben vom echten Wert abweichen würden. Dazu müßten größere Systeme betrachtet werden, was prinzipiell auch möglich ist, aber mehr Rechenleistung erfordert.



# 7 Zusammenfassung

Dieses abschließende Kapitel soll sowohl kurz zusammenfassen, welche Ergebnisse in der Arbeit erzielt wurden als auch einen Ausblick geben auf das, was noch kommen mag.

## 7.1 Was erreicht wurde...

In dieser Arbeit wurden die Gitterkorrekturen zum Verhalten der Blochwand zusammengetragen, überarbeitet und durch neueste Ergebnisse ergänzt. Inspiration hierzu gaben vor allem das in Kapitel 2 beschriebene Experiment wie auch die in der Einleitung erwähnte Literatur, die zeigt, daß Domänenwände ein brandaktuelles Forschungsgebiet darstellen. Zunächst wurde hierzu das klassische System betrachtet. Wir haben die Kontinuumsnäherung wiederholt und mit Hilfe der Landautheorie gezeigt, daß im diskreten Gittermodell abhängig vom Verhältnis von Austauschwechselwirkung und Anisotropie ein struktureller Phasenübergang zwischen einer Ising-artigen und einer ausgedehnten Domänenwand stattfindet. Der kritische Punkt wurde sowohl für endliche Systeme als auch im thermodynamischen Limes bestimmt und das kritische Verhalten nahe des Phasenübergangs ausgewertet. Mit Hilfe dieser Informationen gelang es, eindeutige Korrekturen zu den im Experiment mit Hilfe von Kontinuumstheorie ausgewerteten Wechselwirkungskonstanten herzuleiten.

Ebenfalls im klassischen Fall wurde die Mobilität der Domänenwand untersucht. Die Form und Höhe der Peierls-Barriere wurde mit und ohne äußeres Feld bestimmt, indem eine speziell für mikromagnetische Systeme entwickelte Methode für diesen Fall implementiert werden konnte.

Für den bislang wenig untersuchten quantenmechanischen Fall wurde eine  $1/S$ -Näherung im Winter-gedrehten System betrachtet. Es wurde gezeigt, daß sich der so entwickelte Hamiltonoperator auf eine quadratische Form reduzieren läßt. Für diese wurde ein effizientes und numerisch implementierbares Lösungsverfahren entwickelt. Mit Hilfe objektorientierter Programmierung wurden Klassen erstellt und optimiert, die dieses Verfahren zur Anwendung bringen.

Durch dieses Programmpaket sowie analytische Methoden konnten zunächst Ergebnisse früherer Untersuchungen bestätigt und erweitert werden. Die Anregungsmoden (Magnonen) der Domänenwand wurden bestimmt und analysiert. Ihre Auswirkungen zeigen sich in Fluktuationskorrekturen und Energiekorrekturen, die eine Absenkung der Energie und niedrigere gemessene Magnetisierung vor allem im Zentrum der Wand voraussagen. Weiterhin wurde dem Hamilton-Operator eine demagnetisierende Energie hinzugefügt, die die im ursprünglichen System enthaltene kontinuierliche Azimuthal-

symmetrie bricht und die daraus entstehende Goldstone-Mode hebt. Durch Analyse der Moden wurden diese in ihrer Wirkung untersucht und die den Phasenübergang treibende Mode wurde identifiziert.

Schließlich wurde der vorhandene numerische und analytische Rahmen erfolgreich genutzt, um eine Korrektur zur Wandform zu errechnen, also die quantenmechanische Energie in den Winkeln als Parameter zu minimieren. Es wurden klare Grenzen gezeigt, innerhalb derer das Modell Anwendung finden kann. Die Korrekturen zur Wandform wiesen ein hochinteressantes Verhalten auf. Im Ising-Bereich gibt es, wie zu erwarten war, keinerlei Formkorrekturen. Oberhalb und nahe des kritischen Punktes tritt eine starke Abweichung in Richtung einer Ising-Wand auf. Durch Extrapolation in den Ginzburg-Bereich der starken Fluktuationen konnte gezeigt werden, daß der quantenmechanische kritische Punkt nach oben abweicht. Das System verweilt für einen größeren Parameterbereich im Ising-artigen Zustand.

Die demagnetisierende Energie erhöht die Fluktuationen in der x-Richtung, während die in y-Richtung abnehmen. Mit Hilfe eines intuitiven und plausiblen Modells wurde gezeigt, daß die demagnetisierende Energie dazu tendiert, breitere Wände zu erzeugen. Daher ergibt sich ein qualitativ wechselndes Gesamtbild der Korrekturen. Nahe des kritischen Punktes, wie oben erwähnt, werden schmalere Wände erwartet. Der Einfluß dieser Fluktuationen nimmt zu höherer Austauschwechselwirkung hin ab, so daß der verbreiternde Einfluß des demagnetisierenden Feldes zunimmt. Man erhält zunächst einen verzerrten Zwischentyp Wand, in dem die äußeren Spins zu einer breiteren, die inneren aber zu einer schmaleren Wand hin abweichen. Schließlich setzen sich die Korrekturen aufgrund der Demagnetisierung durch, und die Wand wird im ganzen breiter<sup>1</sup>. Im Rahmen der Untersuchung der Moden zeigte sich, daß bei höheren Verhältnissen von Austausch- und Anisotropiewechselwirkungen zum thermodynamischen Limes hin eine weitere Goldstone-Mode auftritt. Die hierzu gehörige Symmetrie ist die Position der Domänenwand. Aufgrund der in Kapitel 3 bestimmten Energiebarriere konnte gezeigt werden, daß diese Wandposition im quantenmechanischen Fall leicht verschiebbar ist, die Größe der benötigten Energie kommt in den Bereich der Fluktuationskorrektur. Es wurden Wege diskutiert, diesen ungewollten Effekt bei der Betrachtung der Wandform auszuschließen.

Abschließend konnte nur festgestellt werden, daß die Korrekturen für das Experiment wegen der schon qualitativ unterschiedlichen Korrekturen aufgrund des Unwissens um den Wert der demagnetisierenden Energie nicht konkret berechnet werden konnten. Für letzteren liegen leider noch keine Meßergebnisse für Monolagen Eisen auf Wolfram[110] vor<sup>2</sup>.

---

<sup>1</sup>Breite läßt sich hier auf zweierlei Arten definieren. Zum einen kann auch im quantenmechanischen Fall durch den Arkuskosinusfit die klassische Definition benutzt werden. Eine unabhängige Definition im Sinne einer gewichteten Summe ist auch möglich.

<sup>2</sup>Diese Messung stellt sich als nicht einfach heraus, wie in einem Gespräch mit Herrn Dipl.-Phys. Prutzer zu erfahren war.

## 7.2 ... und ein Ausblick

Vieles bleibt offen, was im Zeitrahmen dieser Arbeit leider nicht in Angriff genommen werden konnte.

Im Bereich der Mobilität der Spins wäre es hochinteressant, die Diffusion der Wand beziehungsweise ihre Bewegung in einem Magnetfeld mit Hilfe der Ideen von Garanin zu untersuchen, um unsere Berechnung des Peierlspotentials weitergehend zu nutzen. Aber auch das Buch der Quantenmechanik ist noch längst nicht zu Ende geschrieben. Es bleibt beispielsweise die Frage zu stellen, ob es eine Entwicklung gibt, die auch die Betrachtung kleinerer Systeme konsistent ermöglicht. Auch sind höhere Korrekturen sicherlich interessant. Man könnte beispielweise Terme höherer Ordnung in den Hamiltonoperator einfließen lassen.

Ein hehres Ziel ist auch die Erweiterung des Modells um ein magnetisches Feld. Es war im Verlauf dieser Arbeit in der Diskussion, das Magnetfeld semiklassisch einzuführen, da der quantenmechanische Ausdruck in der  $1/S$ -Entwicklung nach der Winter-Drehung zu in den Erzeugern und Vernichtern linearen Termen führt. Sieht man das Magnetfeld aber als eine Form der Variation der Anisotropie, so läßt sich vielleicht ein Ansatz finden, der das Verhalten der Wand in Anwesenheit eines Feldes näherungsweise liefert. Eine Erweiterung in mehreren Dimensionen wäre auch von Vorteil. Man könnte dort nicht nur die Entwicklung der Bloch-Wand studieren, sondern auch kompliziertere zweidimensionale Phänomene, wie zum Beispiel die Vortexwand.

Auch die Mobilität, von einem quantenmechanischen Standpunkt aus betrachtet, wäre ein großes Forschungsgebiet. Die Bestimmung der Peierlsbarriere könnte innerhalb des selben Formalismus wie in Kapitel 3 auch im quantenmechanischen Fall untersucht werden, wenn es gelänge, einen Ausdruck zu finden, der nicht nur in der Nähe der klassischen Lösung Gültigkeit besitzt. Dies würde aber vermutlich einen komplett anderen Ansatz erfordern.

Einen solchem Ansatz könnten beispielsweise die *spin coherent state*-Pfadintegrale darstellen. Theorien zur Auswertung dieser Integrale waren erst kürzlich in der Literatur vertreten, da „*a number of unsatisfactory points and mysteries where the path integral in coherent states is concerned*“ (Koc95) auftreten. Diese hängen hauptsächlich mit dem Raum zusammen, auf welchem das Pfadintegral definiert wird, und sind hochgradig nichttrivial. Die von Kochetov und Solari (Sol87) entdeckte, bislang nicht beachtete, Zusatzphase stellte viele ältere Standardartikel, wie zum Beispiel (Kla79), in Frage. In letzter Zeit gab es einige Artikel, die mit Hilfe der Zusatzphase „bessere“ Ergebnisse (SPG00; PAMB02) vorweisen konnten, so daß in baldiger Zeit vielleicht auch die Blochwand in diesem Formalismus bearbeitet werden kann, selbst wenn dieser mathematisch mit größter Vorsicht zu behandeln ist.

Zum Abschluß seien noch der Gilbert-Dämpfung ein paar Worte gewidmet, auch wenn sie nicht in direktem Zusammenhang zu dieser Arbeit steht. Sie ist eines der Mysterien, die in der „Spinwelt“ noch bleiben, und es wäre auch hochinteressant, den Magnetostruktionsansatz dahingehend zu untersuchen.

Wall: *Thus have I, Wall, my part discharged so;  
And, being done, thus Wall away doth go.*

— William Shakespeare  
*A Midsummer Night's Dream*  
III 1, 253f

# A Das Tight Binding Modell

Im Allgemeinen beschreibt das Tight Binding Modell (TBM) den Grenzfall, in dem die Elektronen einzelner Atome nicht mehr als isoliert angesehen werden können, da ihre Wellenfunktionen zu überlappen beginnen, aber noch nicht hinreichend, als das man Translationsinvarianz annehmen könnte. Die Periodizität des Kernpotentials ist also nicht vernachlässigbar, wie es in einem Elektronengasmodell oder Jellium der Fall wäre.

Anwendung findet das TBM vor allen zur Beschreibung von Übergangsmetallen und Isolatoren. In dieser Arbeit sind es allerdings eher mathematische Entsprechungen, die den Einsatz dieses Modells motivieren.

## A.1 Lösung des Modells

Wir wollen hier kurz die Lösung des TBM mit Dirichlet-Randbedingung in dem einfachen Fall skizzieren, der uns die Nullstellen der Chebyshev-Polynome liefert. Dazu betrachten wir folgenden Hamiltonian:

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} t(|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|) + \sum_{i=1}^L \varepsilon_i |i\rangle\langle i|.$$

Eine häufige Wahl ist  $t = -1$  und  $\varepsilon_i = 2$ , die wir auch hier verwenden wollen<sup>1</sup>. Erfüllt werden muß die Schrödinger-Gleichung  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ . Wir wählen den Ansatz

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^L \Psi_j |j\rangle$$

und erhalten

$$\begin{aligned} H|\Psi\rangle &= - \sum_{i=1}^{L-1} (|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|) \sum_{j=1}^L \Psi_j |j\rangle + 2 \sum_{i,j=1}^L \Psi_j |i\rangle\langle i|j\rangle \\ &= \sum_{i=1}^L (-\Psi_{i+1} - \Psi_{i-1} + 2\Psi_i) |i\rangle. \end{aligned}$$

Dabei haben wir die Randbedingungen folgendermaßen eingeführt:

$$\Psi_0 = 0 = \Psi_{L+1}.$$

---

<sup>1</sup>Ihren Ursprung hat die Wahl in der Ähnlichkeit zu einer Laplace-artigen zweiten Ableitung.

Koeffizientenvergleich in der Schrödinger-Gleichung und der Ansatz  $\Psi_i = \sin ki$  ergeben

$$\begin{aligned} 2 \sin ki - \sin(i+1)k - \sin(i-1)k &= E \sin ki \\ 2 \sin ki - \sin ki \cos k - \cos ki \sin k - \sin ki \cos k + \cos ki \sin k &= E \sin ki \\ 2 \sin ki(1 - \cos k) &= E \sin ki . \end{aligned}$$

Es folgt also

$$E = 2(1 - \cos k)$$

und mit Hilfe der zweiten Randbedingung

$$0 \stackrel{!}{=} \sin(L+1)k \quad \Rightarrow \quad k = \frac{n\pi}{L+1} .$$

Es fehlt noch die Normierung

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 1 .$$

Diese ist für unsere Zwecke nicht sehr ergiebig, daher soll sie an dieser Stelle ausgelassen werden.

## A.2 Anregungen der freien eindimensionalen Spinkette

Die Berechnung der Anregungen der freien eindimensionalen Spinkette lassen sich auch auf eine Form des TBM zurückführen, die wir hier kurz herleiten und lösen wollen.

Wir starten mit dem Hamilton-Operator für Heisenberg-Spins mit Anisotropie (4.2), doch betrachten wir nun ein System, dem keinerlei Randbedingungen auferlegt sind. Dieser Hamilton-Operator läßt sich leicht umschreiben zu

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{n-1} \left( \frac{1}{2} S_i^+ S_{i+1}^- + \frac{1}{2} S_i^- S_{i+1}^+ + S_i^z S_{i+1}^z \right) - K \sum_{i=1}^n (S_i^z)^2 .$$

Auch hier führen wir eine Holstein-Primakoff-Transformation in niedrigster Ordnung,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} S^z &= -S + n \\ \frac{1}{\hbar} S^- &= \sqrt{2S} a \\ \frac{1}{\hbar} S^+ &= \sqrt{2S} a^\dagger , \end{aligned}$$

siehe Anhang B, durch und erhalten bis in quadratische Ordnung

$$\mathcal{H} = \hbar^2 S^2 \left( E_0 - \frac{J}{S} \sum_i^{n-1} \left( a_i^\dagger a_{i+1} + a_{i+1}^\dagger a_i - n_i - n_{i+1} \right) + \frac{2K}{S} \sum_{i=1}^n n_i \right)$$

Analog unserer Diskussion in Kapitel 5 halten wir nun wieder die Spins 1 und  $n$  fest, also

$$\langle n_1 \rangle = 0 = \langle n_n \rangle ,$$

so daß sie nur als Ankopplung vorhanden sind. Dies ist analog der Bedingungen von Niez *et al.* (NAFL78).

Wir definieren ein „Hüpfen“

$$t = -\frac{J}{S}$$

und eine „Onsite-Energie“

$$\varepsilon_i = \frac{1}{S}(2J + 2K) = \varepsilon \quad \forall i \in \{2, \dots, n-1\} .$$

Transformieren wir nun die additive Konstante  $E_0$  heraus und benutzen wir wieder die bra-ket-Schreibweise, so erhalten wir den Tight Binding Hamiltonoperator:

$$\frac{H_1}{\hbar^2 S^2} = t \sum_{i=2}^{n-3} (|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|) + \varepsilon \sum_{i=2}^{n-1} |i\rangle\langle i|$$

Dieses Problem läßt sich auf die selbe Art und Weise lösen wie das erstere, man erhält als Energieeigenwerte in Einheiten von  $S$  und  $2K$

$$E' = \frac{SE}{2K} = 1 + \kappa(1 - \cos k) \tag{A.1}$$

wobei  $k = \frac{a\pi}{n-1}$  mit natürlicher Zahl  $a$ , so daß sich im Limes  $n \rightarrow \infty$  ein Anregungsband ergibt, dessen Bandkanten bei 1 und  $1 + 2\kappa$  liegen. Eine Darstellung der Lösung sieht man auch in Abb. A.1. Für  $\kappa = 0$ , also keinerlei Wechselwirkung zwischen den Elektronen, zerfällt das System natürlich in  $n$  unabhängige Spins, es gibt nur noch eine  $n$ -fach degenerierte Mode. Diese spaltet sich dann linear mit  $\kappa$  auf.

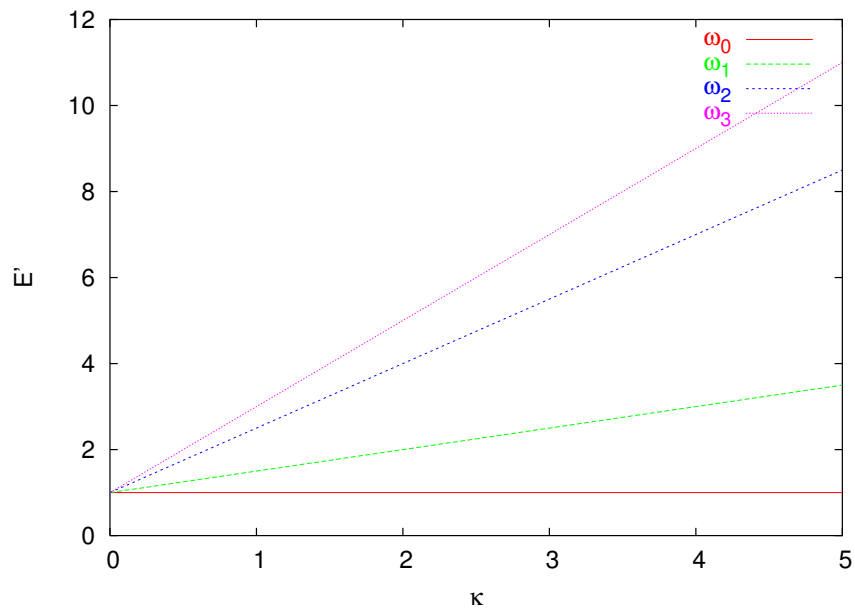


Abbildung A.1: Die Anregungsmoden der freien eindimensionalen Spinkette. Im thermodynamischen Limes ergibt sich ein Band mit wohldefinierten Bandkanten.



## B Die Holstein-Primakoff-Transformation

Zunächst möchten wir für alle Interessierten auf das Paper verweisen, in dem historisch diese Transformation eingeführt wurde (HP40). Was ist nun die Holstein-Primakoff-Transformation (HPT)? Zunächst einmal ist klar, daß wir im klassischen Grenzfalle eines jeden Heisenberg- oder Spinmodells, in dem der Spin gegen unendlich strebt, jede kollektive Anregung als eine Welle oder eine Überlagerung von Wellen beschreiben können. Dies ist eine Analogie zu den Phononen, hier werden allerdings die Gitterbausteine von ihren Gleichgewichtspositionen ausgelenkt.

Die Anregungen in einem magnetischen System nennt man Spinwellen, und wie bei den Phononen nimmt man an, daß es eine kleinste Quantisierungseinheit gibt, die wir Magnon nennen wollen. Phononen verhalten sich wie Teilchen, also kann man vermuten, daß auch Magnonen in einem Bild der zweiten Quantisierung beschrieben werden können. Deshalb versucht man, den Hamilton-Operator des (ggf. erweiterten) Heisenberg-Modells mit Hilfe geeigneter Transformationen in diesem Sinne umzuformulieren. Eine (und die am häufigsten verwendete) Möglichkeit ist hierbei die HPT. Deren Definition und was sie auszeichnet, soll hier kurz zusammengefaßt werden.

Man geht aus von

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar}S^z &= -S + n \\ \frac{1}{\hbar}S^- &= \sqrt{2S}\phi(n)a \\ \frac{1}{\hbar}S^+ &= \sqrt{2S}a^\dagger\phi(n).\end{aligned}$$

Hierbei sind  $S^\pm$  die Leiteroperatoren, und es ist

$$n = a^\dagger a \quad \text{und} \quad \phi(n) = \sqrt{1 - \frac{n}{2S}}.$$

An dieser Stelle müssen schon mehrere Bemerkungen gemacht werden. Zum einen wird dieser Formalismus offensichtlich unphysikalisch, sobald mehr als  $2S$  Deviationen erzeugt werden. Die Eigenwerte des Zähleroperators  $n$  sollten also bei konkreten Rechnungen immer in der Menge  $\{0, 1, 2, \dots, 2S\}$  enthalten sein.

Zum anderen sehen wir recht schnell, setzen wir die Spinvertauschungsrelationen an, daß  $a$  und  $a^\dagger$  offenbar Bose-Operatoren sind:

$$\begin{aligned}[a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{ij} \\ [a_i, a_j] &= [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0.\end{aligned}$$

Die Definition dieser Operatoren scheint fast natürlich, betrachtet man die Wirkung der Auf- und Absteigeoperatoren auf Wellenfunktionen(HP40).

Was dennoch zuerst auffällt ist, daß die Funktion  $\phi$  konkrete Berechnungen ob ihrer Form sehr erschweren, wenn nicht unmöglich machen wird. Man entwickelt daher die Wurzel zu

$$\begin{aligned}\phi(n_i) &= 1 - \frac{n_i}{4S} - \frac{n_i^2}{32S^2} - \dots \\ &= 1 - \left(1 - \sqrt{1 - \frac{1}{2S}}\right)n_i - \dots\end{aligned}$$

wobei die letzte Zeile durch Umschreibung von  $n_i^j$  auf Normalordnung erreicht werden kann, z. B.

$$n_i^2 = n_i + (a_i^\dagger)^2 a_i^2 .$$

Die Frage, die man sich nun stellen muß, ist sicherlich, unter welchen Umständen man diese Reihenentwicklung (die unter dem Namen 1/S-Entwicklung bekannt ist) abbrechen darf. Der Limes großer  $S$  wird im allgemeinen auch als der klassische Limes bezeichnet.

Für unser Problem der quantenmechanischen Korrekturen zur Bloch-Wand ist er hervorragend geeignet.

# C Einblick in die numerischen Lösungen

In diesem Anhang werden die Header der entsprechenden Bibliotheken veröffentlicht und teilweise diskutiert. Der komplette Code ist auf den Rechnern unserer Arbeitsgruppe vorhanden und kann bei Bedarf gerne weiterverwendet/erweitert/verändert werden.

## C.1 Die „klassische Klasse“

Diese Klasse hat zwei Ziele: Zum einen Beschreibung der Spinkette im klassischen Zustand, inklusive natürlich Minimierung und Energien, zum anderen stellt sie alle systembeschreibenden Parameter (Winkel, Energie, Wechselwirkungsparameter, Feld) und die daraus abgeleiteten Größen (z. B. jene zur Berechnung der Matrizen im quantenmechanischen Fall) zur Verfügung. Es gibt sie in zwei Varianten: Mit und ohne Unterstützung eines magnetischen Feldes. Die Header<sup>1</sup> ändern sich hier wenig; es kommen einige Funktionen zum Bestimmen der Wandposition und verschieben derselben hinzu. Intern ist es so, daß im Standardfalle von einer Symmetrie der Domänenwand gegenüber Spiegelung an der Wandmitte ausgegangen wird, bei Vorhandensein eines Magnetfeldes wird diese Symmetrie jedoch gebrochen. Letzteres heißt aber auch, daß doppelt so viele freie Parameter in die Minimierung eingehen, was das System etwas verlangsamt.

```
class punkt_C{  
  
private:  
    // constants needed for minimization  
    static const double TOL;  
    static const double CGOLD;  
    static const double ZEPS;  
    static const double GOLD;  
    static const double GLIMIT;  
    static const double TINY;
```

---

<sup>1</sup>Ein sogenannter Header ist die Schnittstelle einer Klasse zum Rest eines Programmes. Er enthält alle Informationen, die der Anwender der Klasse benötigt, also die öffentlichen (*public*) Funktionen und welche Variablenformate sie benötigen. Hier geben wir etwas mehr Einblick und zeigen auch die sogenannten privaten Funktionen und Variablen, auf die von außerhalb der Klasse nicht zugegriffen werden kann.

```
static const int ITMAX;
static const double EPS;

int ncom;
//global variables needed by linmin and subs
vector<double> pcom;
vector<double> xicom;

double kappa,kappa_d,b; //parameters

// effective systems size (number of independent angles)
long size;

public:
long size(){return size;}
vector<double> p; //angles

//constructor
punkt_C(const long spins,const double ki = 1.,
        bool secure=false, const double kdi = 0.,
        const double bi = 0.)
:kappa(ki),kappa_d(kdi),b(bi)
{if (secure) {secure_startup(spins);}
 else {startup(spins);}}
//empty constructor
punkt_C() {}
//classical energy
double eclassic();
//system status
void show_system_status();
//reset and get parameters
void set_kappa(const double kain);
void set_kappa_d(const double kadin=0.0);
void set_b(const double bi=0.0){b=bi;}
double get_kappa_d(){return kappa_d;}
double get_kappa() {return kappa;}

#ifdef QM_FUNC

//the matrix element functions
inline double A(int i);
inline double B(const int i) {return (-kappa/2.);}
inline double C(int i);
```

```

inline double D(int i);

//derivatives: dA_i/dTheta_j
inline double dA(int i,int j);
inline double dB(const int i,const int j) {return (0.);}
inline double dC(int i,int j);
inline double dD(int i,int j);

#endif

private:
double eclassic(vector<double> pos);
void secure_startup(const int init);
void startup(const int init);
void cleanup();
// variant: 0: ising, 1: linear (kappa infinite),
//           2: continuum
void startpunkt(const int init,const short variant);
vector<double> derivative();

//minimization algorithms
double fldim(const double x);
double brent(double &ax, double &bx, double &cx,
            const double tol, double &xmin);
void linmin(vector<double> &xi,vector<double> &p,
           double &fret);
void mnbrak(double &ax, double &bx, double &cx,
           double &fa, double &fb, double &fc);

// Minimierung
void minimize(double ftol,int &iter,double &fret);
};

```

Einige Bemerkungen zu manchen der Funktionen mögen von nutzen sein.

### Konstruktor

Offensichtlich gibt es zwei Arten, eine Instanz der Klasse zu erschaffen, nämlich „sicher“ und „nicht sicher“. Der Unterschied ist leicht erklärt. Die sichere Variante nutzt als Startkonfiguration den linearen Fall von unendlich großem  $\kappa$ , minimiert für  $\kappa = 1000$  und setzt diesen Parameter dann (unter sukzessiver Minimierung) langsam auf den Zielwert herab. Dieser Startvorgang dauert etwas länger, hat sich aber als viel genauer als die andere Variante erwiesen, in der direkt für das Zielverhältnis der Wechselwirkungen mit der Ausgangsbedingung aus dem Kontinuumsmodell minimiert wird.

### Die demagnetisierende Energie

Es ist historisch begründet, daß dieser Parameter (obwohl er keinerlei Einfluß auf den klassischen Fall hat) noch hier gespeichert ist. Es hat jedoch den Vorteil, daß man direkt wieder klassisch minimieren kann, wenn der Wert neu gesetzt wird. Es ist sinnvoll, dies zu tun, da dieser Parameter, beispielsweise wenn man den Ginzburg-Bereich verläßt, das System in eine stabile Lage überführen kann, in der dann neu quantenmechanisch minimiert wird – wieder von der klassischen Lösung aus.

### Die Ableitungen von $A, B, C, D$

Diese sind hauptsächlich für eine potentielle Implementation<sup>2</sup> der Feynman-Hellmann-Methode schon jetzt der Klasse hinzugefügt, aber im Moment unbenutzt.

## C.2 Die quantenmechanische Klasse

Dieser Klasse sieht man an, daß sie mit der Zeit gewachsen ist. Einige der Funktionen sind sicherlich nur für konkrete physikalische Hintergrundfragen interessant. Die Vielzahl der Möglichkeiten, die das Modell bietet, sind sicher noch nicht ganz ausgenutzt.

```
class punkt_QM {  
  
private:  
    // constants needed for minimization  
    static const double TOL;  
    static const double CGOLD;  
    static const double ZEPS;  
    static const double GOLD;  
    static const double GLIMIT;  
    static const double TINY;  
    static const int ITMAX;  
  
    //global variables needed by linmin and subs  
    int ncom;  
    vector<double> pcom;  
    vector<double> xicom;  
  
    punkt_C x;  
    bool randspinfest;  
    long S;  
  
public:
```

---

<sup>2</sup>Eine Implementation eines Algorithmus ist dessen konkrete Umsetzung in einer Programmiersprache.

```

//constructor
punkt_QM(const long spins,const double ki = 1.,
          bool secure=false, const double kdi = 0.,
          const double bi = 0.,const bool rsfi=false,
          const long Sin=1000);
//get modes
vector<double> get_niez();
//get qm minimum position (minimizes)
vector<double> get_minimum();
vector<double> get_minimum_droplowest();
//get deviations of z-component in current state
vector<double> get_state();
//get s_x^2 and s_y^2
vector<double> get_sxy_dev(const bool xy);
//test functionability of MTL
void test();
//set parameters
void set_kappa(const double kain){x.set_kappa(kain);}
void set_kd(const double kadin) {x.set_kappa_d(kadin);}
void set_spin(const long sin) {S=sin;}
// tries to variate the angles to see how M-EV evolves
void wackel();
// relation of angles
void angle_relation();
// eigenvalues of N, independent of M-diagonalization
void diag_N();
// angles...
vector<double> get_p(){return x.p;}
// status
void show_system_status();
double qmenergy() {return qm_energy(x.p,false);}
double eclassic() {return x.eclassic();}

private:
// transformation matrices of whole Bogoliubov
// transformation
void get_bogo(qm_matrix& momentumR,
              qm_matrix& positionR);

// the dl means "drop lowest"
vector<double> modes(bool& zeroev);
double qm_energy(vector<double> pos,const bool dl);

//minimization algorithms

```

```
double fldim(const double x,const bool dl);
double brent(double &ax, double &bx, double &cx,
             const double tol, double &xmin,const bool dl);
void linmin(vector<double> &xi,vector<double> &p,
            double &fret,const bool dl);
void mnbrak(double &ax, double &bx, double &cx,
            double &fa, double &fb, double &fc,
            const bool dl);

//minimization
void minimize(double ftol,int &iter,double &fret,
             const bool dl);
};
```

Die meisten hier erwähnten Funktionen sollten selbsterklärend sein, deshalb nur ein paar Worte zu jenen, die es nicht sind.

### *drop lowest*

Die Idee hierbei war, die beiden niedrigsten Eigenwerte nahe des kritischen Punktes zu vernachlässigen. Das ermöglicht die Bestimmung eines Minimums im Ginzburg-Bereich, ist aber physikalisch sehr fragwürdig, da gerade das Verhalten dieser beiden (lokalen!) Moden das System ausmacht.

### **Die Erwartungswerte der Abweichungen**

Hier ist eine Stelle, an der man gut zu Erweiterungen ansetzen könnte. Es ist im Prinzip kein Problem, die Erwartungswerte zum Beispiel auch in Zuständen mit Anregungen zu erhalten.



# Literaturverzeichnis

- [AAX<sup>+</sup>03] D. Atkinson, D. A. Allwood, G. Xiong, M. D. Cooke, C. C. Faulkner, and R. P. Cowburn, *Magnetic domain-wall dynamics in a submicrometre ferromagnetic structure*, *Nature Materials* **2** (2003), 85. 11
- [ABB<sup>+</sup>99] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, and D. Sorensen, *LAPACK user's guide*, SIAM, 1999. 53
- [ABHP89] E. V. Albano, K. Binder, D. W. Heermann, and W. Paul, *The Ising square lattice in a  $L \times M$  geometry: A model for the effect of surface steps on phase transitions in adsorbed monolayers*, *Z. Phys. B* **77** (1989), 445. 14, 15
- [AS72] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun (eds.), *Handbook of mathematical function*, Dover Publications, New York, 1972. 58
- [ASB76] A. Antoulas, R. Schilling, and W. Baltensperger, *Quantum mechanical corrections to the Bloch wall*, *Solid State Comm.* **18** (1976), 1435. 19, 77, 87
- [AXC<sup>+</sup>02] D. A. Allwood, G. Xiong, M. D. Cooke, C. C. Faulkner, D. Atkinson, N. Vernier, and R. P. Cowburn, *Submicrometer ferromagnetic NOT gate and shift register*, *Science* **296** (2002), 2003. 11
- [BBF<sup>+</sup>88] M. Balbich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices*, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988), 2472. 11
- [Blo32] F. Bloch, *Zur Theorie des Austauschproblems und der Remanenzerscheinung der Ferromagnetika*, *Z. Physik* **74** (1932), 295. 9
- [BM03] S. E. Barnes and S. Maekawa, *Current-driven domain wall motion in thin ferromagnetic wires*, *cond-mat preprint* **0311039** (2003), 1. 11
- [Bog58] N. N. Bogoliubov, *Sov. Phys. JETP* **7** (1958), 41. 50
- [Bro63] W. F. Brown, *Micromagnetics*, Interscience Publishers, 1963. 10, 21, 36
- [CH96] S. D. Cohen and A. C. Hindmarsh, *CVODE, a stiff/nonstiff ODE solver in C*, *Computers in Physics* **10** (1996), 138. 38

- [CS80] C. T. Cantieni and R. Schilling, *Quantum corrections for narrow domain walls*, J. Phys. C: Solid St. Phys. **13** (1980), 5263. 77, 87
- [CW00] R. P. Cowburn and M. E. Welland, *Room temperature magnetic quantum cellular automata*, Science **287** (2000), 1466. 11
- [Dit03] Rok Dittrich, *Finite element computation of energy barriers in magnetic systems*, Ph.D. thesis, Vienna University of Technology, 2003. 38
- [DSS<sup>+</sup>02] R. Dittrich, T. Schrefl, D. Suess, W. Scholz, H. Forster, and J. Fidler, *A path method for finding energy barriers and minimum energy paths in complex micromagnetic systems*, J. Magn. Magn. Mater. **250** (2002), L12. 38
- [EHG96] H.-J. Elmers, J. Hauschild, and U. Gradmann, *Critical behaviour of the uniaxial ferromagnetic monolayer Fe(110) on W(110)*, Phys. Rev. **B 54** (1996), 15224. 13
- [ELG89] H. J. Elmers, G. Liu, and U. Gradmann, *Magnetometry of the ferromagnetic monolayer Fe(110) on W(110) coated with Ag*, Phys. Rev. Let. **63** (1989), 566. 45
- [Elm98] H. J. Elmers, *Magnetization states in ultrathin films with laterally modulated anisotropies*, J. Magn. Mater. **185** (1998), 274. 33
- [Enz64] U. Enz, *Die Dynamik der Blochschen Wand*, Helv. Phys. Acta **37** (1964), 245. 36
- [Fey39] R. P. Feynman, *Forces in molecules*, Phys. Rev. **56** (1939), 340. 54
- [FF87] A. J. Freeman and C. L. Fu, *Strongly enhanced 2D magnetism at surfaces and interfaces*, J. Appl. Phys. **61** (1987), 3356. 45
- [Gar97] D. A. Garanin, *Fokker-Planck and Landau-Lifschitz-Bloch equations for classical ferromagnets*, Phys. Rev. **B 55** (1997), 3050. 43
- [Gar04] \_\_\_\_\_, *Private Kommunikation*, 2004. 43
- [Gil55] T. A. Gilbert, Armor Research Foundation Rep. No. 11, Chicago, IL., 1955. 36
- [GIP90] D. A. Garanin, V. V. Ishchenko, and L. V. Panina, *Dynamics of an ensemble of single-domain magnetic particles*, Theor. Math. Phys. (USSR) **82** (1990), 169. 43
- [GPL98] J. L. García-Palacios and F. J. Lázaro, *Langevin-dynamics study of the dynamical properties of small magnetic particles*, Phys. Rev. **B 58** (1998), 14937. 43

- [GSW62] J. Goldstone, A. Salam, and S. Weinberg, *Broken symmetries*, Phys. Rev. **127** (1962), 965. 61
- [Hau98] Jens Hauschild, *Morphologie und Magnetismus ultradünner Eisenfilme auf vizinalem Wolfram(110)*, Ph.D. thesis, TU Clausthal, 1998. 13
- [HEG98] J. Hauschild, H.-J. Elmers, and U. Gradmann, *Dipolar superferromagnetism in monolayer nanostripes of Fe(110) on vicinal W(110) surfaces*, Phys. Rev. **B 57** (1998), R677. 15
- [Hei02] M. Heide, *Private Kommunikation*, 2002. 33
- [HFF88] S. C. Hong, A. J. Freeman, and C. L. Fu, *Structural, electronic and magnetic properties of clean and Ag-covered Fe monolayers on W110*, Phys. Rev. **B 38** (1988), 12156. 14
- [HN00] D. Hinzke and U. Nowak, *Magnetic relaxation in a classical spin chain*, Phys. Rev. **B 61** (2000), 6734. 37
- [HNU00] D. Hinzke, U. Nowak, and K. D. Usadel, *Thermally activated magnetization reversal in classical spin chains*, in: Structure and Dynamics of Heterogeneous Systems (P. Entel and D. E. Wolf, eds.), World Scientific, Singapore, 2000, p. 331. 37
- [HP40] T. Holstein and H. Primakoff, *Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet*, Phys. Rev. **58** (1940), 1098. 117, 118
- [HS98] A. Hubert and R. Schäfer, *Magnetic domains*, Springer Verlag, 1998. 21
- [HTB90] P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec, *Reaction rate theory: 50 years after Kramers*, Rev. Mod. Phys. **62** (1990), 251. 43
- [Jon00] Philip Jonkers, *Quantum transport in disordered magnetoresistive systems*, Ph.D. thesis, Rijksuniversiteit Groningen, 2000. 10
- [KG56] C. Kittel and J. K. Galt, *Ferromagnetic domain theory*, Solid State Phys. **3** (1956), 437. 10
- [Kla79] J. R. Klauder, *Path integrals and stationary phase approximation*, Phys. Rev. D **19** (1979), 2349. 111
- [Koc95] E. A. Kochetov, *SU(2) coherent-state path integral*, J. Math. Phys. **36** (1995), 4667. 111
- [Kop98] P. Kopietz, *Spin conductance, dynamic spin stiffness, and spin diffusion in itinerant magnets*, Phys. Rev. **B 57** (1998), 7829. 37
- [KW41] H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part I*, Phys. Rev. **60** (1941), 252. 33

- [LC93] A. Lyberatos and R. W. Chantrell, *Thermal fluctuations in a pair of magnetostatically coupled particles*, J. Appl. Phys. **73** (1993), 6501. 37
- [LJ62] S. Lifson and J. L. Jackson, *On the self-diffusion of ions in a polyelectrolyte solution*, J. Chem. Phys. **36** (1962), 2410. 43
- [LL35] L. Landau and E. Lifschitz, *On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies*, Phys. Z. Sowjetunion **8** (1935), 153. 9, 36
- [LT85] Peter Lancaster and Miron Tismenetsky, *The theory of matrices*, Academic Press, London, 1985. 74
- [MF81] A. S. Mikhailov and R. M. Farzetdinova, *Quantum theory of spin-wave relaxation by two-level impurities*, Sov. Phys. JETP **53** (1981), 782. 36
- [MF83] ———, *Processes of spin-wave relaxation on paramagnetic impurities in antiferromagnets*, Sov. Phys. JETP **57** (1983), 109. 36
- [MP93] M. Müller and W. Paul, *Ordering kinetics in quasi-one-dimensional Ising systems*, J. Stat. Phys. **73** (1993), 209. 14
- [NAFL78] J. J. Niez, P. G. Averbuch, J. C. Fanton, and Lajzerowicz, *Magnetic excitations of a narrow Bloch wall. Effect of the pole field*, J. Phys. C: Solid State Phys. **11** (1978), 3715. 19, 55, 73, 115
- [NBB01] X. Nie, G. Bihlmayer, and S. Blügel, *Spin reorientation controlled by the degree of orbital moment quenching in films with large spin-orbit interaction: Fe/W(110)*, preprint (2001). 33
- [Née55] L. Néel, *Some theoretical aspects of rock-magnetism*, Adv. Phys. **4** (1955), 191. 10
- [NFA77] J. J. Niez, J. C. Fanton, and P. Averbuch, *Magnetic excitations through narrow domain walls*, Physica B **86-88** (1977), 1381. 55
- [NGD<sup>+</sup>03] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Dubonos, E. W. Hill, and I. V. Grigorieva, *Subatomic movements of a domain wall in the Peierls potential*, Nature **426** (2003), 812. 43
- [Nie76] J. J. Niez, *Localized modes of magnons in ferromagnetic materials with narrow domain walls*, J. Phys. C: Solid State Phys. **9** (1976), 2933. 55
- [NO98] John W. Negele and Henri Orland, *Quantum many-particle physics*, Perseus Books, 1998. 90
- [Nol86a] Wolfgang Nolting, *Quantentheorie des Magnetismus I*, Teubner, 1986. 9

- [Nol86b] ———, *Quantentheorie des Magnetismus, Band 2*, B. G. Teubner, 1986. 81
- [NTM03] Y. Nakatani, A. Thiaville, and J. Miltat, *Faster magnetic walls in rough wires*, *Nature Materials* **2** (2003), 521. 11
- [OMS<sup>+</sup>99] T. Ono, H. Miyajima, K. Shigeto, K. Mibu, N. Hosoi, and T. Shinjo, *Propagation of a magnetic domain wall in a submicrometer magnetic wire*, *Science* **284** (1999), 468. 11
- [PAMB02] M. Pletyukhov, Ch. Amann, M. Mehta, and M. Brack, *Semiclassical theory of spin-orbit interactions using spin coherent states*, *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002), 11660. 111
- [PE02] M. Pratzer and H. J. Elmers, *Lateral indirect exchange coupling in a two-dimensional nanostripe array*, *Phys. Rev.* **B 66** (2002), 033402. 14
- [PE03] ———, *Domain wall energy in quasi-one-dimensional Fe/W(110) nanostripes*, *Phys. Rev. B* **67** (2003), 094416. 12, 13, 33
- [PEB<sup>+</sup>01] M. Pratzer, H. J. Elmers, M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger, *Atomic-scale magnetic domain walls in quasi-one-dimensional Fe nanostripes*, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001), 127201. 12, 13, 33
- [Pie01] Oswald Pietzsch, *Magnetic imaging by spin-polarized scanning tunneling microscopy applied to ultrathin Fe/W(110) films*, Ph.D. thesis, Universität Hamburg, 2001. 13, 14
- [Pri98] G. A. Prinz, *Magnetoelectronics*, *Science* **282** (1998), 1660. 11
- [PTVF99] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, 1999. 32, 53, 54
- [SB00a] V. L. Safonov and H. Neal Bertram, *Impurity relaxation mechanism for dynamic magnetization reversal in a single domain grain*, *Phys. Rev.* **B 61** (2000), 14893. 36
- [SB00b] ———, *Intrinsic mechanism of nonlinear damping in magnetization reversal*, *J. Appl. Phys.* **87** (2000), 5508. 36
- [Sie99] Jeremy G. Siek, *A modern framework for portable high performance numerical linear algebra*, Master's thesis, University of Notre Dame, Indiana, 1999. 53
- [Sol87] H. G. Solari, *Semiclassical treatment of spin system by means of coherent states*, *J. Math. Phys.* **28** (1987), 1097. 111
- [SPG00] M. Stone, K.-S. Park, and A. Gang, *The semiclassical propagator for spin coherent states*, *J. Math. Phys.* **41** (2000), 8025. 111

- [SSG97] P. Sen, D. Stauffer, and U. Gradmann, *Metastability in Monte Carlo simulation of 2D Ising films and in Fe monolayer strips*, Physica A **245** (1997), 361. 15
- [SW95] D. K. Sodickson and J. S. Waugh, *Spin diffusion on a lattice: Classical simulations and spin coherent states*, Phys. Rev. B **52** (1995), 6467. 37
- [SW02] S. Sivasubramanian and A. Widom, *Radiation induced Landau-Lifschitz-Gilbert damping in ferromagnets*, ArXiv Condensed Matter e-prints (2002). 36
- [Tik77] V. Tikochinsky, *Transformation brackets for generalized Bogolyubov-boson transformations*, J. Math. Phys. **19** (1977), 270. 45, 50
- [TK03] G. Tatara and Hiroshi Kohno, *Theory of current-driven domain wall motion: a poorman's approach*, cond-mat preprint **0308464** (2003), 1. 11
- [TNM04] A. Thiaville, Y. Nakatani, and J. Miltat, *The physics of magnetic domain wall motion in nanostructures*, Verhandlungen der DPG (2004). 36
- [vdBZ71] J. J. van den Broek and H. Zijlstra, *Calculation of intrinsic coercivity of magnetic domain walls in perfect crystals*, IEEE Trans. Magn. **7** (1971), 226. 38, 40
- [Wan00] Xindong Wang, *On the microscopic origin of magnetic moment relaxation*, <http://epswww.epfl.ch/aps/meet/MAR00/baps/abs/S9450003.html>, 2000, (Abstract). 37
- [Was03] Rainer Waser (ed.), *Nanoelectronics and information technology*, Wiley-VCH, 2003. 11
- [Wei07] P. Weiss, *Hypothesis of the molecular field and ferromagnetism*, Journal de Physique **6** (1907), 661. 9
- [Win61] J. M. Winter, *Bloch Wall Excitation. Application to Nuclear Resonance in a Bloch Wall*, Phys. Rev. **124** (1961), 452. 47
- [Wol03] Stephen Wolfram, *The Mathematica Book, Fifth Edition*, Wolfram Media Inc., 2003. 32
- [Zij70] H. Zijlstra, *Coercivity and wall motion*, IEEE Trans. Magn. **6** (1970), 179. 38, 40

# Danksagung

Zu allererst möchte ich Herrn Prof. Dr. [REDACTED] meinen herzlichsten Dank aussprechen. Er stellte nicht nur das Thema für diese Arbeit und ließ mir den Spielraum für meine eigenen Themenwünsche, er war auch immer mit Rat und Tat zur Stelle, wenn es Probleme gab. Ohne seine Hilfe und Unterstützung wäre diese Arbeit niemals entstanden. Es war mir eine große Freude, in seiner Arbeitsgruppe promovieren zu dürfen.

Herrn Prof. Dr. [REDACTED] bin ich dankbar, daß er den Posten des Zweitkorrektors übernahm.

Auch meinen Zimmergenossen [REDACTED] und [REDACTED] danke ich für drei Jahre in einer hervorragenden Arbeitsatmosphäre. Trotzdem wir verschiedene Themen bearbeiteten, kamen viele fruchtbare Diskussionen zustande. Auch andere Mitglieder unserer Arbeitsgruppe, PD Dr. [REDACTED], Dr. [REDACTED] und Dr. [REDACTED] halfen durch ihre freundliche Bereitschaft, physikalische oder computerrelevante Fragen zu diskutieren, daß diese Arbeit Realität werden konnte. Frau [REDACTED] danke ich für ihre Hilfe in administrativen Fragen.

Herr Prof. Dr. [REDACTED] gab gewissermaßen die Initialzündung für diese Arbeit und war immer für mich da, wenn ich etwas über die experimentelle Seite des Fachgebietes wissen wollte. Dies gilt auch für seine Doktoranden [REDACTED] und [REDACTED], ohne die mir manch wichtige Information und Überlegung sicherlich entgangen wäre.

[REDACTED] aus der Gruppe von Herrn Prof. Dr. [REDACTED] stand mir in all der Zeit bei Problemen mit objektorientierter Programmierung oder LaTeX helfend zur Seite. Auch Dr. [REDACTED], [REDACTED], Dr. [REDACTED], Dr. [REDACTED], [REDACTED] und Dr. [REDACTED] möchte ich für aufschlußreiche Diskussionen danken.

Vor allem aber meinen Eltern [REDACTED] und [REDACTED] bin ich besonderen Dank schuldig. Sie haben mir das Studium und diese damit diese Dissertation erst ermöglicht, und mich mit ihrer Liebe und ihrem Glauben an mich wo sie nur konnten bestmöglichst unterstützt.

Zu allerletzt, aber am allermeisten, möchte ich meiner Freundin, [REDACTED] danken. Ohne ihre Liebe, die nun fast zu lang wie diese Arbeit meine Seele nährt und ihr Leben gibt, hätte ich dieses Werk vielleicht nicht vollenden können. Danke, daß es dich gibt.

*Ceterum statuo, Carthaginem deletam esse.*