

Institut für Theoretische Physik

Universität zu Köln

**Chirale Magneten in dünnen Schichten:  
Einfluss der Magnetfeldorientierung auf magnetische Strukturen**



Bachelorarbeit  
Erstprüfer Prof. Dr. Achim Rosch

Eingereicht von Jan Müller  
Matrikelnummer 5035678

Juli 2012, Köln



Institut für Theoretische Physik

Universität zu Köln

**Chirale Magneten in dünnen Schichten:  
Einfluss der Magnetfeldorientierung auf magnetische Strukturen**



Bachelorarbeit  
Erstprüfer Prof. Dr. Achim Rosch

Eingereicht von Jan Müller  
Matrikelnummer 5035678

Juli 2012, Köln



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Motivation</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Monte-Carlo-Algorithmus</b>	<b>9</b>
2.1	Simulated Annealing . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Diskretisierung des Hamiltonian</b>	<b>10</b>
3.1	Anisotropien . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>14</b>
4.1	Einfluss der Randbedingungen . . . . .	14
4.2	Einfluss der Abkühlrate . . . . .	18
4.3	Einfluss von Anisotropien . . . . .	18
4.4	Simulation der magnetischen Strukturen . . . . .	22
4.4.1	mit externem Magnetfeld in $[1,1]$ -Richtung . . . . .	22
4.4.2	mit externem Magnetfeld in $[1,0]$ -Richtung . . . . .	26
4.4.3	Analyse und Vergleich der Ergebnisse . . . . .	28
4.5	Analyse des Phasenübergangs . . . . .	28
4.6	Vergleich der freien Energien der unterschiedlichen Phasen . . . . .	30
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>33</b>
	<b>Literatur</b>	<b>35</b>
	<b>Anhang</b>	<b>37</b>



## 1 Einleitung und Motivation

Als chiral bezeichnet man Kristallstrukturen, die keine Inversionssymmetrien vorweisen. Ein Material mit dieser Eigenschaft ist MnSi, welches in einer kubischen B20-Struktur kristallisieren kann, siehe Abbildung 1.1, und ferromagnetisch ist [1]. Bei der Darstellung der freien Energie  $G$

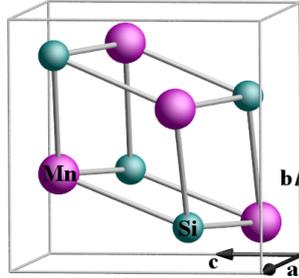


Abbildung 1.1: Einheitszelle von MnSi [2]

$\exp(-G) = \int \mathcal{D}\mathbf{M} \exp(-F[\mathbf{M}])$  von MnSi können daher Terme im Funktional  $F$  auftreten, die linear im Gradienten sind und somit nicht inversionssymmetrisch. Als zusätzlicher Term wird daher die Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung mit dem Wechselwirkungsparameter  $K > 0$  hinzugefügt [3]. Somit ergibt sich das nicht inversionssymmetrische Funktional der freien Energie  $F$ :

$$F[\mathbf{M}] = \int d\mathbf{r} \left[ a(T)\mathbf{M}^2(\mathbf{r}) + b\mathbf{M}^4(\mathbf{r}) + \frac{J}{2} [\nabla\mathbf{M}(\mathbf{r})]^2 + K\mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot [\nabla \times \mathbf{M}(\mathbf{r})] - \mathbf{B} \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) \right] \quad (1.1)$$

wobei  $a(T)$  und  $b$  Parameter aus der Landau-Entwicklung,  $J$  aus der ferromagnetischen Spin-Spin-Wechselwirkung und  $\mathbf{B}$  das externe Magnetfeld sind. Ohne externes Magnetfeld  $\mathbf{B}$  bildet sich als Grundzustand des Systems eine helische Ordnung der Spins entlang eines Ausbreitungsvektors  $\mathbf{Q}_H$ , welcher durch die Anisotropien des Systems festgelegt wird. Diese Phase konnte mittels Neutronenstreuung an MnSi nachgewiesen werden [3]. Im Experiment wurde

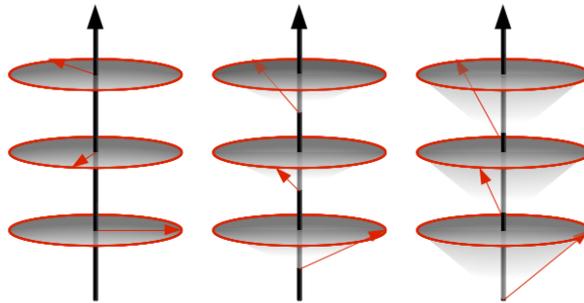


Abbildung 1.2: Vergleich von helischen (links) zu konischen (mittig und rechts) Spinkonfigurationen (rote Pfeile) relativ zum Ausbreitungsvektor  $\mathbf{Q}$ .

Die rechte Abbildung zeigt die Orientierung unter stärkeren Magnetfeldern verglichen mit mittlerer Abbildung

außerdem die Existenz einer konischen Phase nachgewiesen. Diese unterscheidet sich von der helischen Phase einerseits durch die Richtung ihres Ausbreitungsvektors  $\mathbf{Q}_K$ . Für magnetische Felder  $\mathbf{B} > 0$  gilt  $\mathbf{Q}_K \parallel \mathbf{B}$ . Andererseits sind die Spins in der konischen Phase nicht senkrecht

zu  $\mathbf{Q}$  orientiert (siehe Abbildung 1.2), sondern zusätzlich um einen festen Winkel in Richtung des Magnetfeldes, welcher von diesem abhängig ist. Eine weitere nachgewiesene Phase ist die

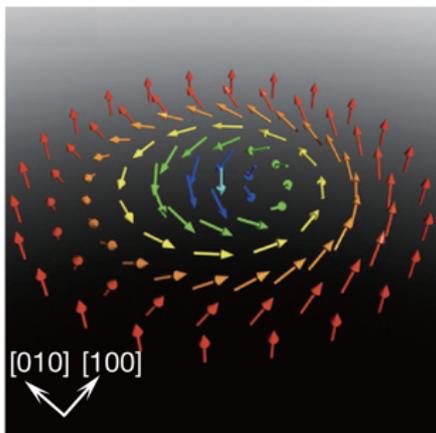


Abbildung 1.3: Schematische Darstellung der Spins eines Skyrmions bei Magnetfeld in  $[0,0,1]$ -Richtung [4]

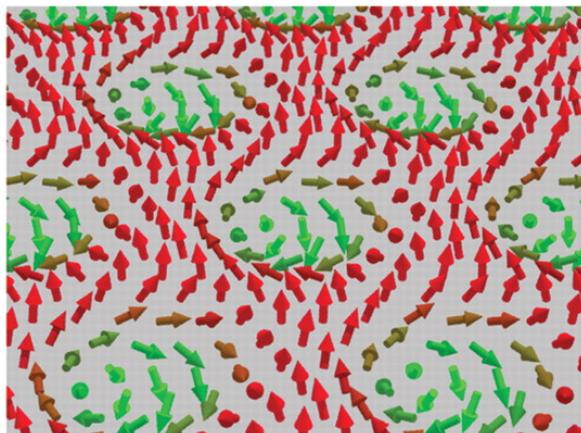


Abbildung 1.4: Schematische Darstellung von Skyrmionen auf einem Kristallgitter für ein Magnetfeld senkrecht zur Skyrmionenebene in Richtung der roten Spins [3]

Skyrmionphase, siehe Abbildungen 1.3 und 1.4, auch A-Phase genannt [3]. Diese wird in guter Näherung durch drei Helizes aufgespannt, deren Richtungsvektoren  $\mathbf{q}_i \perp \mathbf{B}$  jeweils  $120^\circ$  zueinander ausgerichtet sind und die gleiche Länge haben [1].

Die Existenz einer Skyrmionphase ist analytisch nicht direkt offensichtlich, da in einer Mean-Field Näherung für die freie Energie  $G$  die Skyrmionphase nur meta-stabil neben einer vorteilhafteren konischen Phase ist. Ergänzt man jedoch die Mean-Field Näherung um Fluktuationen, so lässt sich die freie Energie schreiben als

$$G \approx F[\mathbf{M}_0] + \frac{1}{2} \log \det \left( \frac{\delta^2 F}{\delta \mathbf{M} \delta \mathbf{M}} \right) \Big|_{\mathbf{M}_0}, \quad (1.2)$$

wobei  $\mathbf{M}_0$  die konische oder skyrmionische Struktur aus der Mean-Field Näherung ist [3]. Mit diesen Fluktuationen folgt, dass es Bereiche im Phasenraum gibt, in denen die Skyrmionstruktur die energetisch günstigste und somit eine stabile Grundzustandskonfiguration ist, vergleiche Abbildungen 1.5 und 1.6.

Auch in dünnen Schichten bildet sich eine Skyrmionphase als Grundzustand aus, mit der Einschränkung, dass die Richtung des Magnetfeldes eine relevante Rolle spielt. Da die Schichten dünn sind, Skyrmionen sich also nur in der Ebene ausbilden können, folgt eine nicht zu vernachlässigende Abhängigkeit der Strukturordnung vom Winkel zwischen Kristallebene und externem Magnetfeld. Bei Magnetfeldern  $\mathbf{B}$ , die parallel zur Ebene verlaufen, sind Skyrmionen durch die Winkelabhängigkeit benachteiligt, da sie sich mangels Raum nicht mit  $\mathbf{q}_i \perp \mathbf{B}$  bilden können. Für konische Strukturen gilt genau der umgekehrte Fall: Der Ausbreitungsvektor  $\mathbf{Q}$  kann sich nur in der Ebene ausrichten, wodurch parallel zur Ebene verlaufende Magnetfelder vorteilhaft und senkrecht zur Ebene verlaufende Magnetfelder nachteilhaft sind, da sich konische Strukturen in diese Richtung nicht bilden können. Für beide Phasen ist die Länge des Wellenvektors  $\mathbf{k}$  in zweidimensionalen Kristallsystemen bestimmt durch  $\tan(k) = \frac{K}{J}$  [5]. Experimentell konnte nachgewiesen werden [4], dass somit die konische Phase für senkrecht zur Ebene angelegte Ma-

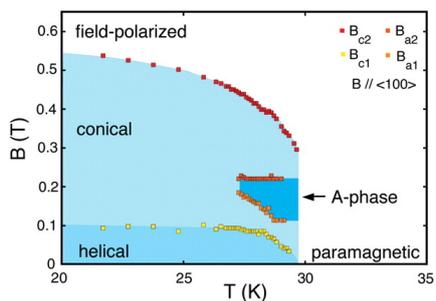


Abbildung 1.5: Experimentell mit Neutronenstreuung bestimmtes Phasendiagramm von MnSi-Kristallen [3]

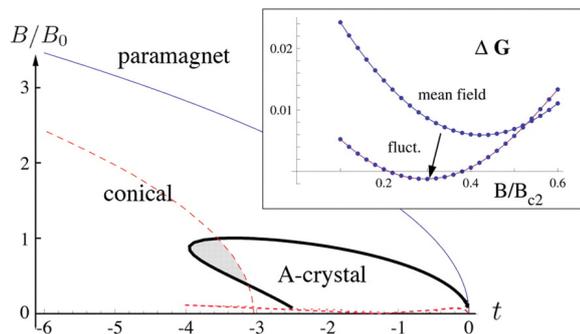


Abbildung 1.6: Theoretisches Phasendiagramm von MnSi-Kristallen unter Einbezug von Fluktuationen [3]

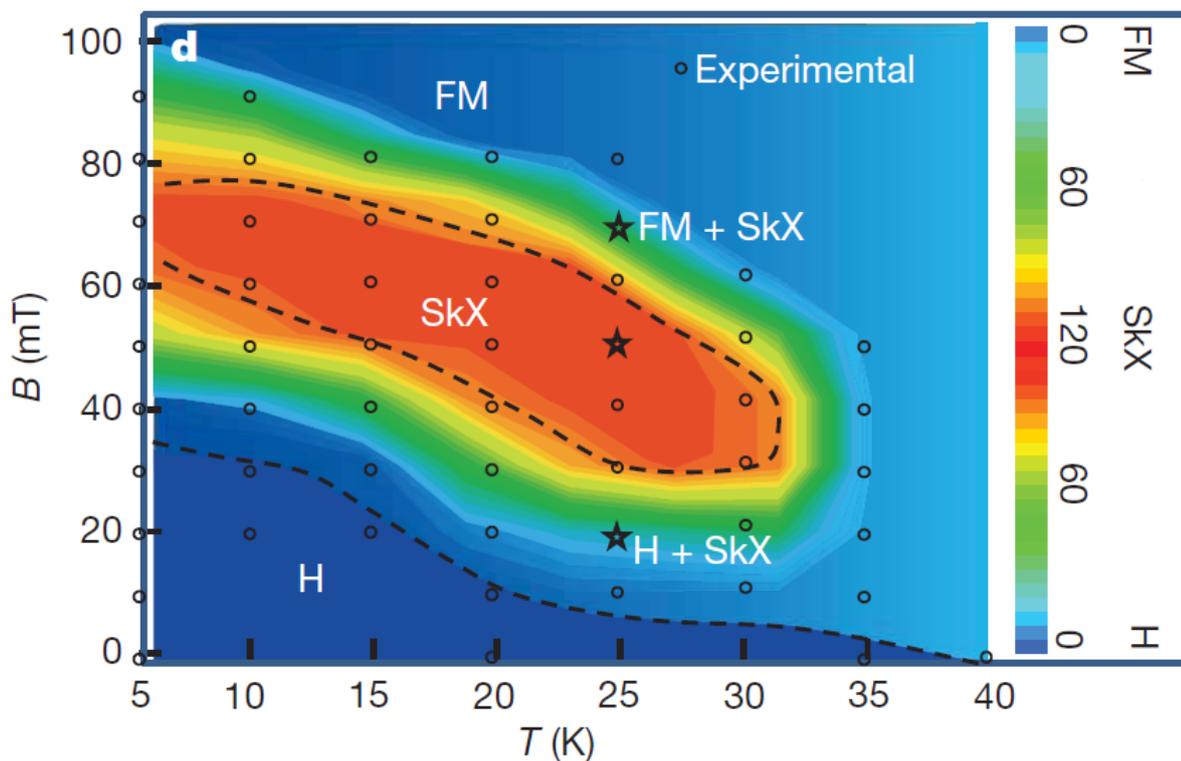


Abbildung 1.7: Experimentell mit Lorentz Transmission Electron Microscopie (TEM) bestimmtes Phasendiagramm von dünnen  $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}\text{Si}$ -Filmen mit senkrecht zur Oberfläche angelegtem Magnetfeld [4].  
 FM: ferromagnetische Struktur  
 SkX: Skyrmionstruktur  
 H: helische Struktur

gnetfelder instabil ist (siehe Abbildung 1.7). Messungen zur Bestimmung des Phasendiagramms 1.7 haben außerdem die Existenz von Mischphasen nachgewiesen, siehe Abbildung 1.8.

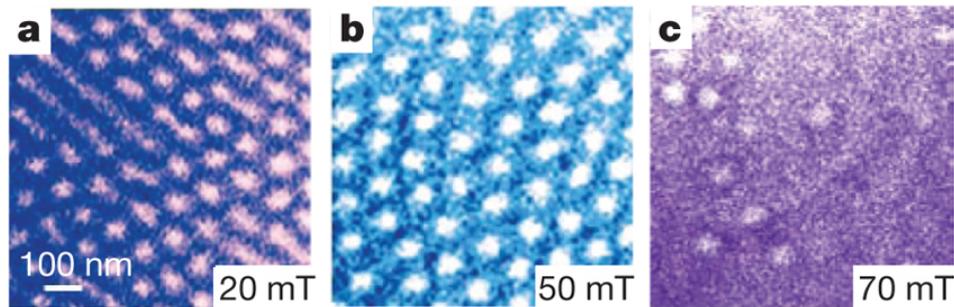


Abbildung 1.8: Experimentell mit Lorentz TEM gemessene [4] magnetischen Strukturen in dünnen Filmen von  $\text{Fe}_{0,5}\text{Co}_{0,5}\text{Si}$  zur Bestimmung des Phasendiagramms 1.7 bei senkrecht zum Film angelegtem magnetischem Felder, dortige Position gekennzeichnet mit einem Stern

a: Mischphase aus helischer und skyrmionische Struktur

b: reine Skyrmionstruktur

c: Mischphase aus ferromagnetischer und skyrmionischer Struktur

Bei Bevorzugung der Skyrmionphase unter senkrechten Magnetfeldern und der konischen Phase unter zur Ebene parallelen Magnetfeldern stellt sich nun die Frage, welche Struktur sich unter anderen Magnetfeldwinkeln in dünnen Schichten von chiralen Magneten ausbildet und ob neue Phasen zu erwarten sind. Dies soll in dieser Bachelorarbeit mittels Monte-Carlo-Simulationen von klassischen Systemen bei Temperatur  $T = 0\text{ K}$  untersucht werden.

## 2 Monte-Carlo-Algorithmus

Monte Carlo ist ein auf Zufallszahlen basierendes Verfahren um näherungsweise Lösungen für Systeme zu finden, die so groß sind, dass analytische Methoden zu viel Rechenzeit benötigen. Die Ergebnisse sind dadurch jedoch nicht exakt, sondern wahrscheinlichkeitsbedingt um die exakte Lösung gestreut.

Der in dieser Arbeit verwendete Metropolis-Algorithmus soll klassische Spinstrukturen gemäß der Verteilung  $p = \exp(-\beta E)$  generieren, damit über Simulated Annealing das freie Energie Funktional minimiert werden kann. Dazu wird zufällig eine Spinposition  $i$  ausgewählt und an dieser der Spinvektor  $\mathbf{s}_i$  in eine zufällige Richtung neu ausgerichtet  $\bar{\mathbf{s}}_i = R \mathbf{s}_i$ ,  $R \in \text{SO}_3$ , siehe Abbildung 2.9. Die Energie  $E_{n+1}$  dieses neuen Zustands  $\{\mathbf{s}_i\}_{n+1}$  wird berechnet und mit der

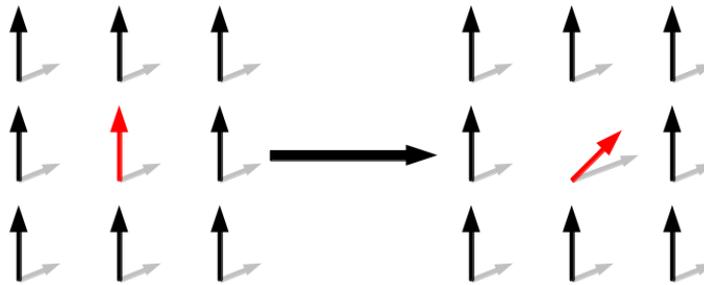


Abbildung 2.9: zufällige Neuorientierung eines zufällig ausgewählten klassischen Spins  $\mathbf{s}_i$  (rot)

Energie  $E_n$  des vorherigen Zustands  $\{\mathbf{s}_i\}_n$  verglichen. Falls der neue Zustand  $\{\mathbf{s}_i\}_{n+1}$  energetisch günstiger ist als der vorherige,  $E_{n+1} < E_n$ , so wird dieser als neuer Zustand des Systems akzeptiert. Um zu vermeiden, dass das System in einem lokalen Minimum des Zustandsraumes einfriert, werden nicht alle energetisch ungünstigeren Zustände verworfen, sondern mit einer Wahrscheinlichkeit  $p$  akzeptiert. Diese Wahrscheinlichkeit folgt aus der Statistischen Mechanik, wonach für zwei Zustände  $A$  und  $B$  eines Systems im Gleichgewicht die detailed balance gilt:

$$p(A) p(A \rightarrow B) = p(B) p(B \rightarrow A). \quad (2.3)$$

Unter der Annahme, dass die Energie des Zustands  $A$  kleiner ist als die des Zustands  $B$ ,  $E_A < E_B$ , folgt nach der obigen Akzeptanzregel für energetisch günstigere Systeme, dass die Übergangswahrscheinlichkeit des Systems  $B$  in das System  $A$  festgelegt ist durch  $p(B \rightarrow A) = 1$ ,  $B$  also immer in  $A$  übergeht. Für die Wahrscheinlichkeit der Verteilung  $p(X = A/B)$  gilt die statistische Boltzmannverteilung:

$$p(X) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_X} \quad (2.4)$$

mit der Zustandssumme  $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$  und der inversen Temperatur  $\beta = \frac{1}{T}$ . Somit folgt durch Umformen der detailed balance (2.3) die Übergangswahrscheinlichkeit des energetisch günstigeren in einen ungünstigeren Zustand:

$$p(A \rightarrow B) = \frac{p(B)}{p(A)} p(B \rightarrow A) = \frac{\frac{1}{Z} e^{-\beta E_B}}{\frac{1}{Z} e^{-\beta E_A}} = e^{-\beta(E_B - E_A)} \quad (2.5)$$

Das Verfahren wird iterativ nach dem Schema auf Abbildung 2.10 wiederholt.

Die erzeugten Zustände gehorchen der Verteilung  $p = \exp(-\beta E)$ . Für eine detaillierte Beschreibung siehe [6].

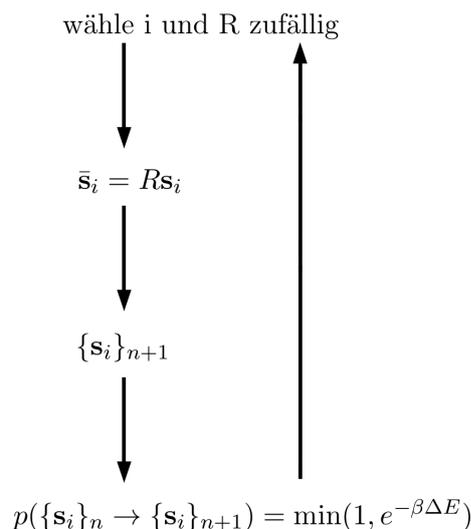


Abbildung 2.10: Schematischer Verlauf des Monte-Carlo-Algorithmus

## 2.1 Simulated Annealing

Bislang ist die Bedeutung des Parameters  $\beta = \frac{1}{T}$  vollkommen vernachlässigt worden. Analog zu seiner Bedeutung in der statistischen Mechanik als inverse Temperatur gilt für eine Vergrößerung von  $\beta \rightarrow \bar{\beta} = \beta(1 + \epsilon)$ ,  $\epsilon > 0$ , dass die Übergangswahrscheinlichkeit zu energetisch ungünstigeren Niveaus sinkt.

$$p(\bar{\beta}) = p(\beta(1 + \epsilon)) = e^{-\beta(1+\epsilon)\Delta E} = p(\beta)^{1+\epsilon} < p(\beta) \quad (2.6)$$

Das Simulated Annealing als eine Ergänzung zum Metropolis Algorithmus kühlt mit steigender Laufzeit das System herab, indem der Kontrollparameter  $\beta$  vergrößert wird. Auf diese Weise sinkt mit der Simulationsdauer die Übergangswahrscheinlichkeit zu energetisch ungünstigeren Niveaus, bis schließlich nur noch Verbesserungen des Energieniveaus zugelassen werden. So soll erreicht werden, dass zwar Potentialbarrieren im Zustandsraum überwunden werden können, die überwindbare Höhe aber mit der Laufzeit immer geringer wird, so dass bessere Konfigurationen mit der Zeit nicht mehr verworfen werden, siehe Abbildung 2.11. Durch diese Erweiterung des Monte-Carlo-Algorithmus soll der Grundzustand als Zustand niedrigster Energie gefunden werden. Für eine detaillierte Beschreibung siehe [6].

## 3 Diskretisierung des Hamiltonian

Bei der klassischen Betrachtung von magnetischen Strukturen chiraler Magneten werden quantenmechanische Drehimpulse und magnetische Momente durch klassische magnetische Momente angenähert. Diese magnetischen Momente, "Spins", befinden sich in dem hier angewandten Modell auf einem kubischen Gitter an festen Gitterplätzen und sind in ihrer Länge festgelegt, können sich aber frei im Raum orientieren.

Durch die Diskretisierung der Magnetisierung auf ortsgebundene Spins wird ein Wechsel des Ordnungsparameters vollzogen

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) \longrightarrow \mathbf{S}_{\mathbf{r}}, \quad (3.7)$$

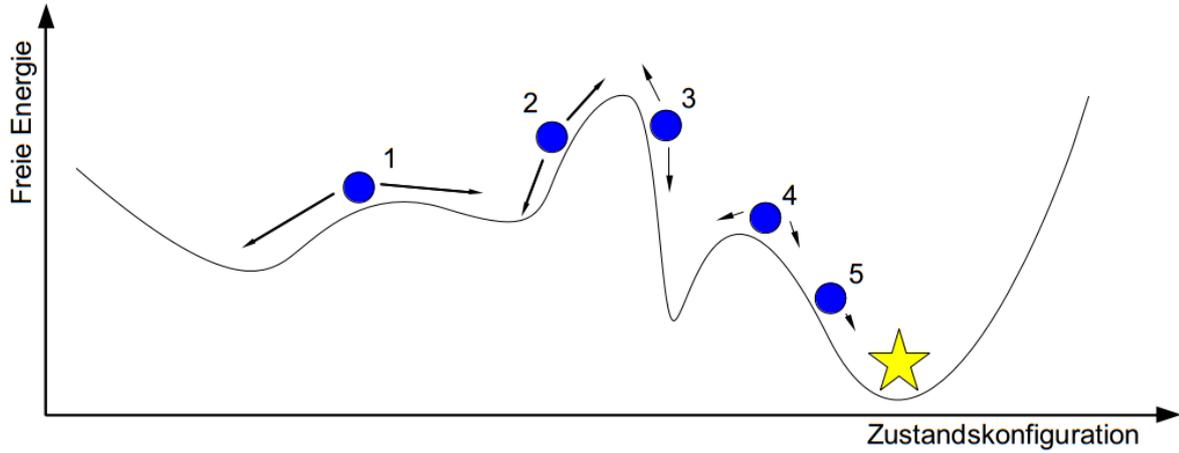


Abbildung 2.11: Schematischer Verlauf des Simulated Annealing im Zustandsraum

außerdem ergibt eine Taylorentwicklung der  $j$ -ten Komponente des Ordnungsparameters  $\mathbf{M}$  an der Stelle eines benachbarten Gitterplatzes

$$M_j(\mathbf{r} + a\hat{x}_i) \approx M_j(\mathbf{r}) + a\partial_{x_i}M_j(\mathbf{r}) + \mathcal{O}(a^2\partial_{x_i}^2) \quad (3.8)$$

mit dem Gitterabstand  $a$  entlang einer Kristallrichtung  $\hat{x}_i$ . Für die diskretisierte Darstellung des ferromagnetischen Anteils der Energie  $H(\{\mathbf{S}_i\})$ , siehe Gleichung (1.1), folgt durch Einsetzen der Taylornäherung:

$$\begin{aligned}
H_{\text{FM}} &= \int d\mathbf{r} \left[ \frac{J}{2} (\nabla \mathbf{M}(\mathbf{r}))^2 \right] \\
&\approx \frac{a^3 J}{2} \sum_{\mathbf{r}, j} [\nabla M_j(\mathbf{r}_n)]^2 \\
&= \frac{a^3 J}{2} \sum_{\mathbf{r}, j, i} [\partial_{x_i} M_j(\mathbf{r})]^2 \\
&\approx \frac{aJ}{2} \sum_{\mathbf{r}, j, i} [M_j(\mathbf{r} + a\hat{x}_i) - M_j(\mathbf{r}_n) + \mathcal{O}(\partial_{x_i}^2)]^2 \\
&= \frac{aJ}{2} \sum_{\mathbf{r}, j, i} [S_{\mathbf{r}+\hat{x}_i, j} - S_{\mathbf{r}, j} + \mathcal{O}(\partial_{x_i}^2)]^2 \\
&= \frac{aJ}{2} \sum_{\mathbf{r}, j, i} [(S_{\mathbf{r}+\hat{x}_i, j})^2 - 2S_{\mathbf{r}, j}S_{\mathbf{r}+\hat{x}_i, j} + (S_{\mathbf{r}, j})^2 + \mathcal{O}(\partial_{x_i}^2)] \\
&= \frac{aJ}{2} \sum_{\mathbf{r}, i} [(S_{\mathbf{r}+\hat{x}_i})^2 - 2\mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}_i} + (\mathbf{S}_{\mathbf{r}})^2 + \mathcal{O}(\partial_{x_i}^2)] \\
&= -aJ \sum_{\mathbf{r}} \left[ \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{y}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{z}}] - \frac{1}{2} \sum_i [(\mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}_i})^2 + (\mathbf{S}_{\mathbf{r}})^2 + \mathcal{O}(\partial_{x_i}^2)] \right]
\end{aligned} \quad (3.9)$$

Die Länge der Spins im Gittermodell ist konstant und an allen Gitterplätzen  $\mathbf{r}$  gleich. Es wird daher  $a = 1$  gewählt. Sei  $N$  die Anzahl an Spins im Kristall, dann folgt für die Energie:

$$\begin{aligned} H_{\text{FM}} &= -J \sum_{\mathbf{r}} \left[ \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{y}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{z}}] - \frac{1}{2} \sum_i [(\mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}_i})^2 + (\mathbf{S}_{\mathbf{r}})^2 + \mathcal{O}(\partial_{x_i}^2)] \right] \\ &= 3NJ(\mathbf{S}_{\mathbf{r}})^2 - J \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{y}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{z}}] + \mathcal{O}(\partial_{x_n}^2) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Der konstante Term mit den Spinlängen  $(\mathbf{S}_{\mathbf{r}})^2$  bewirkt nur eine Verschiebung der freien Energie Skala und ist fällt bei der Betrachtung von Energieunterschieden zwischen Spinkonfigurationen daher weg. Durch eine Reskalierung des Funktionals kann der Term eliminiert werden. Unter Vernachlässigung aller Ableitungen höherer als erster Ordnung folgt somit für den ferromagnetischen Energieanteil:

$$H_{\text{FM}} = -J \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{y}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{z}}] \quad (3.11)$$

Neben dem ferromagnetischen Anteil der freien Energie müssen auch die Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung und der vom externen Magnetfeld abhängige Teil diskretisiert werden. Die geraden Polynome der Landau-Entwicklung entfallen aus den selben Gründen wie die  $(\mathbf{S}_{\mathbf{r}})^2$ -Terme in  $F_{\text{FM}}$  (3.10). Es folgt [5]:

$$\begin{aligned} H(\{\mathbf{S}_i\}) &= -J \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{y}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{z}}] \\ &\quad - K \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \times \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}} \cdot \hat{x} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \times \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{y}} \cdot \hat{y} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \times \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{z}} \cdot \hat{z} \\ &\quad - \mathbf{B} \cdot \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (3.12)$$

### 3.1 Anisotropien

In der Taylorentwicklung der Magnetisierung (3.8) sind alle Ableitungen ab der zweiten Ordnung als vernachlässigbar angenommen worden. Um die Auswirkungen dieser Vernachlässigung abzuschätzen, werden die Anisotropieterme in führender Ordnung bestimmt. Die Fourierdarstellung der Magnetisierung lautet:

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{k} \mathbf{M}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (3.13)$$

Einsetzen der Fouriertransformierten in die Gleichung für den ferromagnetischen Anteil des Funktionals führt zu einer Abhängigkeit des Anisotropie Terms von  $\mathbf{k}$ :

$$\begin{aligned}
H_{\text{FM}} &= \int d\mathbf{r} \left[ \frac{J}{2} (\nabla \mathbf{M}(\mathbf{r}))^2 \right] \\
&= \int d\mathbf{r} \left[ \frac{J}{2} \left( \nabla \int d\mathbf{k} \mathbf{M}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right)^2 \right] \\
&= \frac{J}{2} \int \frac{d\mathbf{k}}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{d\mathbf{k}'}{\sqrt{2\pi}} (k_x k'_x + k_y k'_y + k_z k'_z) \mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{M}_{\mathbf{k}'} \underbrace{\int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}}_{=2\pi\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')} \\
&= \frac{J}{2} \int d\mathbf{k} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \mathbf{M}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{M}_{-\mathbf{k}}
\end{aligned} \tag{3.14}$$

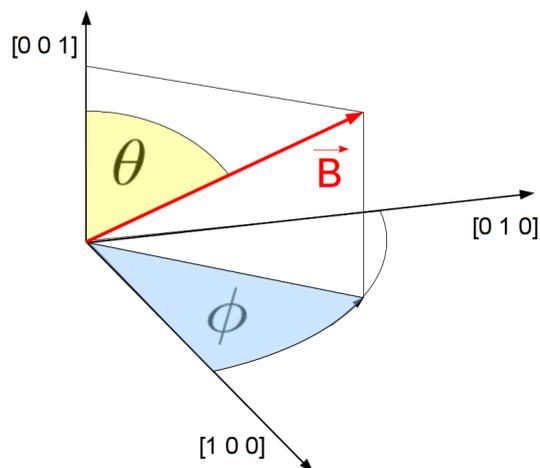
Die Abhängigkeit des ferromagnetischen Anteils des Funktionals vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$  ist somit im Kontinuumsfall von der Form  $(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ . In die diskretisierte Form des ferromagnetischen Anteils des freien Energie Funktionals wird ebenfalls die Fouriertransformierte eingesetzt:

$$\begin{aligned}
F_{\text{FM}} &= -J \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot [\mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{y}} + \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{z}}] \\
&= -J \sum_{\mathbf{r},j} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\hat{x}_j} \\
&= -J \sum_{\mathbf{r},j} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{\mathbf{S}_{\mathbf{k}}}{\sqrt{2\pi}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cdot \frac{\mathbf{S}_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{2\pi}} e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}+\hat{x}_j)} \\
&= -J \sum_j \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{\mathbf{S}_{\mathbf{k}}}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{\mathbf{S}_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{\sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\hat{x}_j}}_{=2\pi\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')} \\
&= -J \sum_{j,\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{x}_j} \\
&= -J \sum_{j,\mathbf{k},n} \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \left[ \frac{(-ik_j)^n}{n!} \right] \\
&= -J \sum_{j,\mathbf{k},n} \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \left[ \frac{(-1)^n k_j^{2n}}{(2n)!} \right] \\
&= -J \sum_{j,\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k}} \left[ 1 - \frac{k_j^2}{2} + \frac{k_j^4}{24} + \mathcal{O}(k_j^6) \right]
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Der ferromagnetische Anteil des Funktionals hat in der diskretisierten Form genau wie in der Kontinuumsform einen Term der Ordnung  $(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ . Die zusätzliche Konstante der diskretisierten Form  $-3J \sum \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{k}}$  kann vernachlässigt werden. Der Term mit dem Faktor  $(k_x^4 + k_y^4 + k_z^4)$  ist der Anisotropie Term führender Ordnung. Ähnliche Ergebnisse liefert auch die Auswertung der Anisotropie Terme der Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung. Durch die Abhängigkeit des Vektors  $\mathbf{k}$  beeinflussen die Anisotropien die Vorzugsrichtung von  $\mathbf{Q}_K$  in den Simulationen. Für  $|\mathbf{k}| \ll 1$  können diese vernachlässigt werden.

## 4 Ergebnisse

Um eine Darstellung des Magnetfeldes in Abhängigkeit von Drehwinkeln  $\theta$  und  $\phi$  zu erhalten, wird  $\mathbf{B}$  in Polarkoordinaten gewählt, siehe Abbildung 4.12.



$$\mathbf{B}(\theta, \phi) = B_0 \begin{pmatrix} \sin(\theta) \cos(\phi) \\ \sin(\theta) \sin(\phi) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

Abbildung 4.12: Darstellung von  $\mathbf{B}(\theta, \phi)$

Ein senkrecht zur Ebene stehendes Magnetfeld entspricht somit  $\mathbf{B}(0, 0)$  und ein parallel zur Ebene verlaufendes Magnetfeld in  $[1, 1]$ -Richtung  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4})$ .

Für alle Simulationen wurde die Länge einer Periode der konischen Phase auf 10 Gitterplätze festgelegt durch die Wahl  $K = J \arctan(\frac{2\pi}{10}) \approx 0,726542528 J$ . Bei dieser Wahl von  $K$  unter senkrechten Magnetfeldern ist die Skymionphase stabil für  $B_0 = 0, 2 J$ . Es werden daher alle Simulationen mit diesen Werten durchgeführt. Die Spinkonfigurationsergebnisse der Simulationen werden durch farbige Pfeile dargestellt, deren Farbe die Größe der Komponente senkrecht zur Ebene darstellt.

### 4.1 Einfluss der Randbedingungen

Das simulierte Spingitter ist viel kleiner als ein reales Kristallgitter. Der Größenunterschied führt dazu, dass sich auf dem realen Kristallgitter Strukturen über viel mehr Gitterplätze ausbilden können, als dies auf dem kleineren simulierten Gitter der Fall ist. Wenn sich auf dem simulierten Gitter ein Objekt nahe dem Rand befindet, so ist es direkt durch die Randbedingungen beeinflusst. Daher müssen die Randbedingungen so gewählt sein, dass alle auftretenden Strukturen sich ohne Einschränkungen durch die Systemgröße bilden können.

Das Problem ist, dass die Strukturen der konischen und skymionischen Phase unterschiedliche Symmetrien und unterschiedliche Periodizitäten aufweisen. Dadurch existieren keine einfachen Randbedingungen, die gleichzeitig für beide Strukturen optimal sind. Außerdem soll nicht ausgeschlossen werden, dass sich weitere Strukturen bilden, die wiederum andere Randbedingungen bevorzugen könnten.

Die Randbedingungen, die vorrangig untersucht wurden, sind periodische quadratische Ränder sowie offene quadratische, kreisförmige und hexagonale Ränder.

Periodische Randbedingungen bedeuten, dass die Spins am Rand mit denen des gegenüberliegenden Randes wechselwirken, siehe Abbildung 4.14. Die zweidimensionale Gitterebene wird

somit topologisch zu einem Torus, wodurch die Ränder verschwinden. Ein Vorteil dieser Randbedingungen ist, dass diese Periodizität dem Verhalten unendlich großer periodischer Systeme am nächsten kommt. Für einen optimalen Einsatz der periodischen Randbedingungen muss die Seitenlänge des Gitters ein Vielfaches der Periodenlänge der ausgebildeten Struktur sein.

Bei offenen Randbedingungen, siehe Abbildung 4.13, entfällt für die Spins am Gitterrand ein nächster Nachbar, da der Gitterplatz unbesetzt ist. Die Anteile des freien Energie Funktionals (3.12), die auf der Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn basieren, Ferromagnetismus und Dzyaloshinskii-Moriya, werden dadurch in ebenen Gittermodellen im Mittel um einen Faktor  $\frac{1}{4}$  gemindert. Dies gilt nicht für die Wechselwirkung mit dem externen Magnetfeld  $\mathbf{B}$ , welche somit an Gewichtung zunimmt. Die Spins am Rand richten sich folglich bevorzugt in Richtung des Magnetfeldes  $\mathbf{B}$  aus. Der auf diesem Effekt fundierte polarisierte Rand wirkt sich direkt

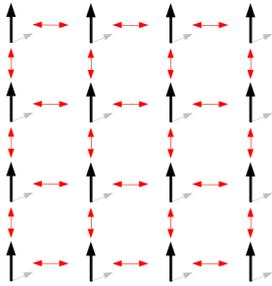


Abbildung 4.13: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen (rot) zwischen Spins (schwarz) bei offenen Randbedingungen

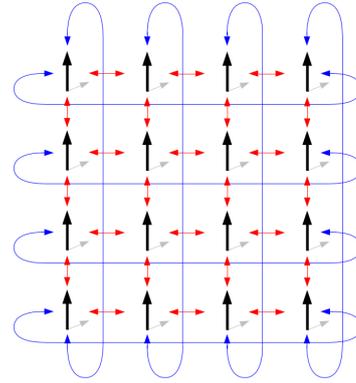


Abbildung 4.14: Schematische Darstellung der Wechselwirkungen (rot und blau) zwischen Spins (schwarz) bei periodischen Randbedingungen

auf die Ordnung der Skyrmionen am Rand des Gitters aus, da die natürliche hexagonale Ordnung keine solche Geraden beinhaltet, entlang derer die Spins vollständig polarisiert sind. Die Skyrmionen müssen sich somit an den polarisierten Rand anpassen und dessen Form in ihre Anordnung übernehmen, indem sie sich nicht hexagonal ordnen, sondern parallel zum Rand.

Die Wahl der Form des offenen Randes beeinflusst somit die Struktur des skyrmionischen oder konischen Gitters. Die quadratische Randform benachteiligt die Skyrmionstruktur, da deren hexagonales Gitter an den rechten Winkeln des polarisierten Randes nicht umgesetzt werden kann. Die dadurch entstehenden Defekte sind energetisch ungünstig. Gegensätzliches ist mit hexagonalen Randbedingungen zu erreichen, da dieser polarisierte Rand die Skyrmionen in einen hexagonalen Umriss drängt, welcher der optimalen Struktur des Skyrmiongitters entspricht. Kreisförmige Randbedingungen erlauben zwar genau wie quadratische Randbedingungen keine hexagonale Struktur der Skyrmionen, da durch die Bildung der Skyrmionen am polarisierten Rand eine geschlossene Kette entsteht. Der nächste Ring von Skyrmionen aus übernächsten Nachbarn des Randes müsste für eine hexagonale Ordnung kleinere Skyrmionen bilden, was energetisch ebenfalls ungünstig ist. Die hexagonale Struktur wird dadurch zugunsten des Skyrmiondurchmessers aufgegeben. Ein Vergleich der Simulationsergebnisse für senkrecht (4.15, 4.17, 4.19, 4.21) und parallel (4.16, 4.18, 4.20, 4.22) zur Gitterebene stehende Magnetfelder  $\mathbf{B}(\theta, \phi)$  zeigt keine Unterschiede in der Ausbildung der Strukturen fern des Randes.

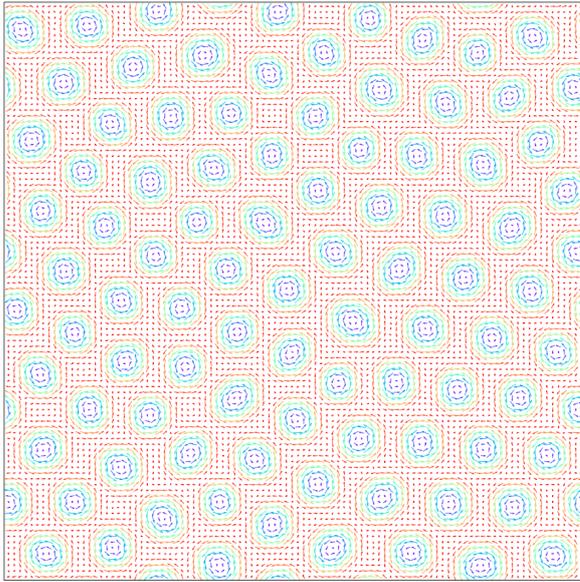


Abbildung 4.15: Monte-Carlo-Simulation mit Simulated Annealing bei periodischen quadratischen Randbedingungen und konstantem Magnetfeld  $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(0, 0)$

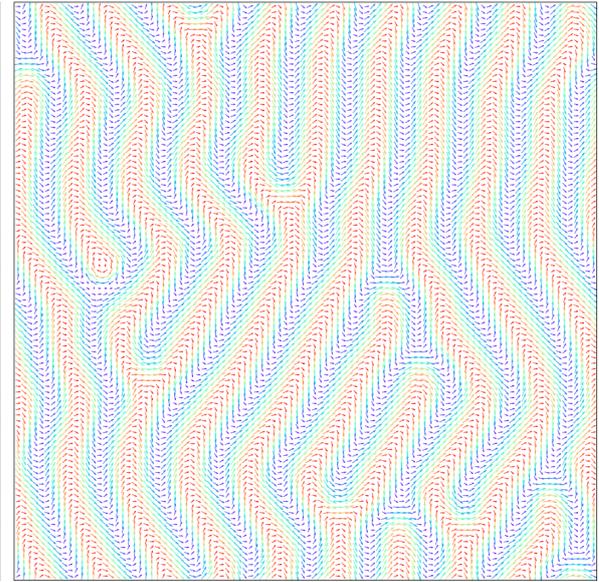


Abbildung 4.16: Monte-Carlo-Simulation mit Simulated Annealing bei periodischen quadratischen Randbedingungen und konstantem Magnetfeld  $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, 0)$

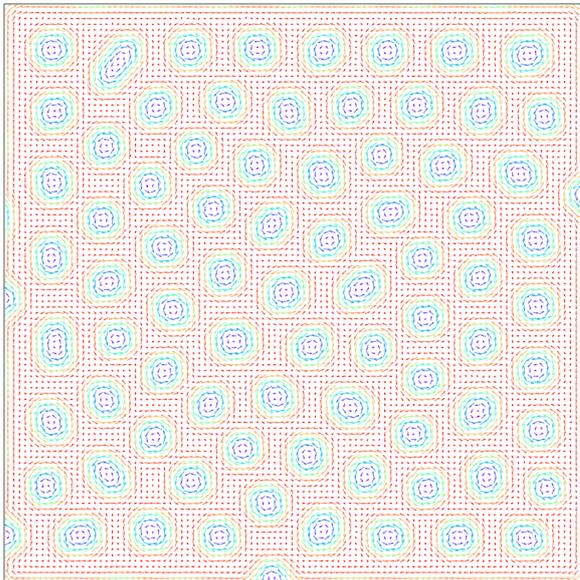


Abbildung 4.17: Monte-Carlo-Simulation mit Simulated Annealing bei offenen quadratischen Randbedingungen und konstantem Magnetfeld  $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(0, 0)$

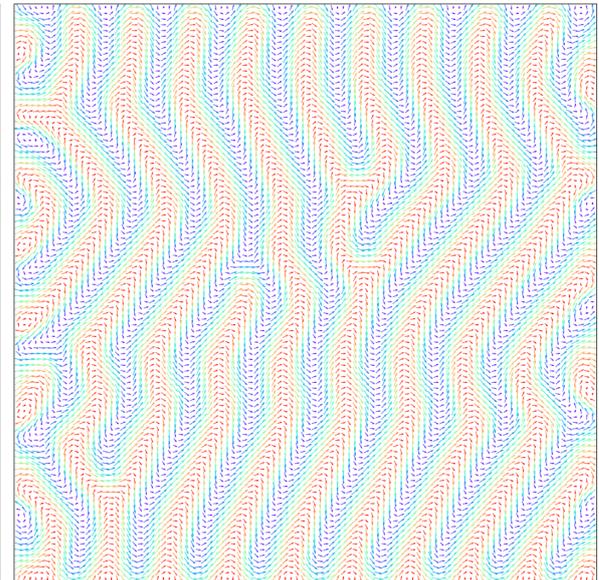


Abbildung 4.18: Monte-Carlo-Simulation mit Simulated Annealing bei offenen quadratischen Randbedingungen und konstantem Magnetfeld  $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, 0)$

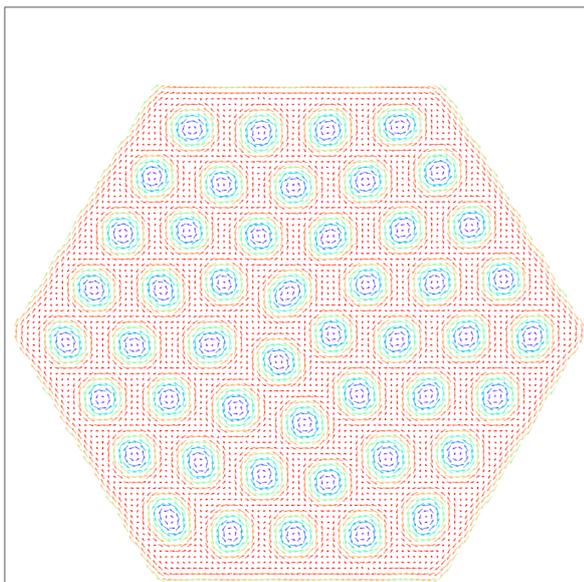


Abbildung 4.19: Monte-Carlo-Simulation mit Simulated Annealing bei offenen hexagonalen Randbedingungen und konstantem Magnetfeld  $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(0, \frac{\pi}{2})$

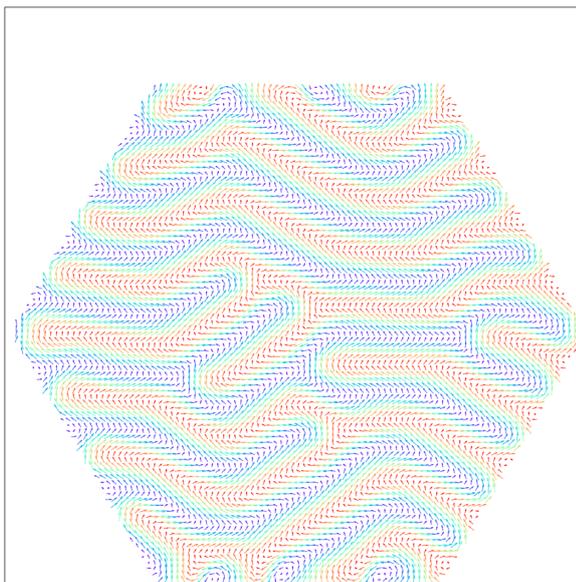


Abbildung 4.20: Monte-Carlo-Simulation mit Simulated Annealing bei offenen hexagonalen Randbedingungen und konstantem Magnetfeld  $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$

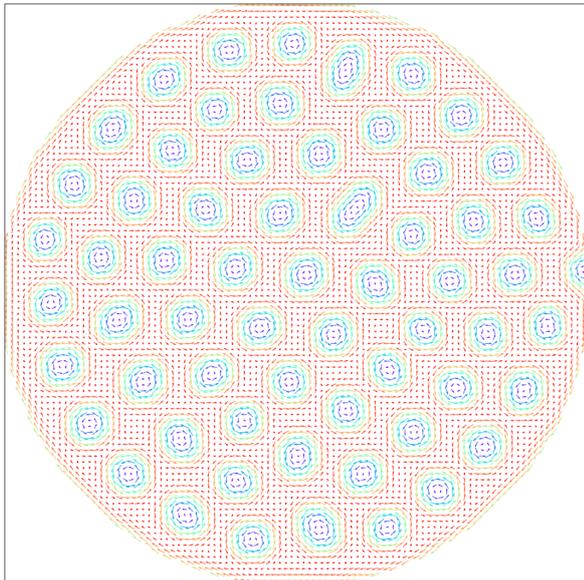


Abbildung 4.21: Monte-Carlo-Simulation mit Simulated Annealing bei offenen kreisförmigen Randbedingungen und konstantem Magnetfeld  $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(0, 0)$

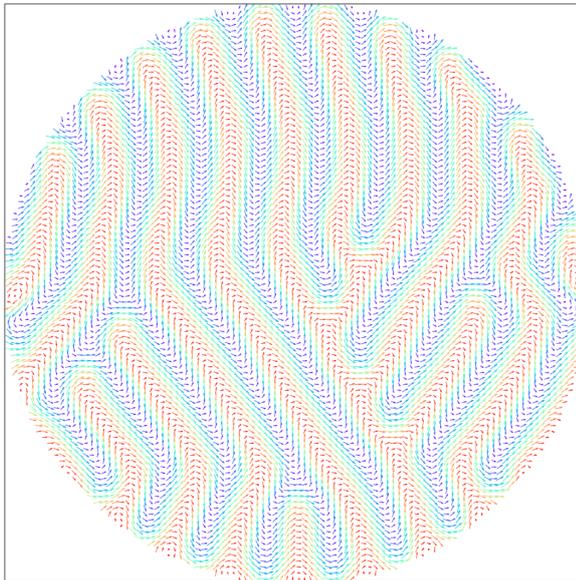


Abbildung 4.22: Monte-Carlo-Simulation mit Simulated Annealing bei offenen kreisförmigen Randbedingungen und konstantem Magnetfeld  $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, 0)$

## 4.2 Einfluss der Abkühlrate

Wie bereits in Abschnitt 2.1 erläutert, bestimmt die Abkühlrate des Simulated Annealing die Qualität des Simulationsergebnisses. Die Abkühlung in den Simulationen wird dabei linear in der Temperatur  $T = \frac{1}{\beta}$  gewählt. Die kritische Temperatur, ab der das System in einer Phase einfriert, wird für die verwendeten Parameter und senkrechtes Magnetfeld zu  $T_c = 0,24 J$  und paralleles Magnetfeld zu  $T_c = 0,47 J$  bestimmt.

Oberhalb  $T_c$  wird die Temperatur nach jeweils  $10^7$  Monte-Carlo-Iterationen in Schritten von  $\Delta T = 0,01 J$  verringert. Diese grobe Verringerungsrate wird für Temperaturen  $0,9 J < T < 1,5 J$  verwendet. Unterhalb der kritischen Temperatur,  $0 J < T < 0,9 J$ , wird die Schrittweite der Temperaturveringerung auf  $\Delta T = 0,001 J$  herabgesetzt. Abschließend werden  $10^9$  Monte-Carlo-Iterationen durchgeführt, um den ermittelten Grundzustand zu optimieren.

Um abzuschätzen, ob diese Kühlrate angemessen ist, wird zum Vergleich eine Simulation mit einer 20-fach langsameren Kühlung durchgeführt. Diese wird realisiert durch die Reduktion der Kühlrate im Bereich  $T < 0,9 J$  auf  $\Delta T = 0,00005 J$ .

Ein Vergleich der magnetischen Strukturen beider Simulationsergebnisse zeigt, dass unabhängig von der Abkühlgeschwindigkeit bei gleichen Magnetfeldstellungen  $\mathbf{B}(\theta, \phi)$  die gleichen Ergebnisse erreicht werden. Beide Simulationsdauern führen zu ähnlichen defektbehafteten Strukturen, unterscheiden sich jedoch in der Orientierung der Defektstellen. Diese sind bei der schnell kühlenden Simulation mit  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, 0)$  (4.23) am ungeordnetsten, bei der 20-fachen Simulationsdauer (4.24) jedoch nur wenig geordneter. Die schnell kühlende Simulation mit  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4})$  (4.25) weist eine hohe Ordnung auf, die Simulation mit 20-facher Simulationsdauer (4.26) ist perfekt geordnet, alle konischen Anteile sind in  $[1,1]$ -Richtung orientiert.

Ein Vergleich der jeweiligen mittleren Energie pro Spin zeigt, dass der Unterschied zwischen den Ergebnissen verschiedener Laufzeiten minimal ist:

Magnetfeld	Kühlrate $\Delta T$	Abbildung	mittlere Energie pro Spin
$\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, 0)$	0,001	(4.23)	$-2.272209 J$
$\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, 0)$	0,00005	(4.24)	$-2.273209 J$
$\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4})$	0,001	(4.25)	$-2.273823 J$
$\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4})$	0,00005	(4.26)	$-2.275879 J$

Tabelle 4.1: mittlere Energie pro Spin bei verschiedenen Kühlraten und Magnetfeldrichtungen

Der maximale Energieunterschied durch die verlängerte Laufzeit liegt bei  $2 \cdot 10^{-3} J$ . Eine Verlängerung der Simulationsdauer führt somit weder bei der Strukturbildung noch der Energie zu größeren Vorteilen.

## 4.3 Einfluss von Anisotropien

Nach der Herleitung der führenden Ordnungen der Anisotropieterme in  $\mathbf{k}$  (3.1) folgte, dass diese von höherer als quadratischer Ordnung sind. Somit sind die Anisotropien für  $|\mathbf{k}| \ll 1$  vernachlässigbar. Für die hier durchgeführten Simulationen wurde die Periodenlänge der konischen Phase auf 10 Gitterplätze festgelegt. Für den Wellenvektor  $\mathbf{k}$  folgt somit eine Länge von  $k = \frac{2\pi}{10} \approx 1$ . Die Anisotropien sind demnach für diese Simulationen nicht vernachlässigbar und beeinflussen die Ergebnisse stark.

Die Ausbreitungsrichtung  $\mathbf{Q}$  der konischen Phase ist an das externe Magnetfeld gekoppelt, wodurch für die energetisch günstigste Ausrichtung ohne Anisotropien gilt  $\mathbf{Q} \parallel \mathbf{B}$ . Die Abhängigkeit

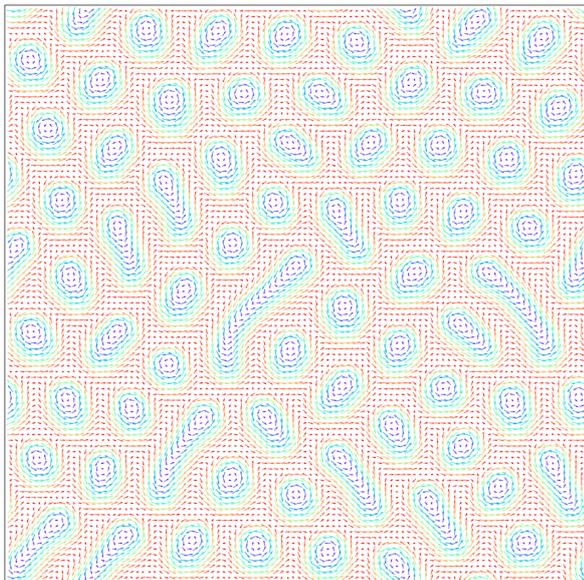


Abbildung 4.23: Monte-Carlo-Simulation mit periodischen Randbedingungen  
 $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, 0)$ ,  $\Delta T = 0,001$

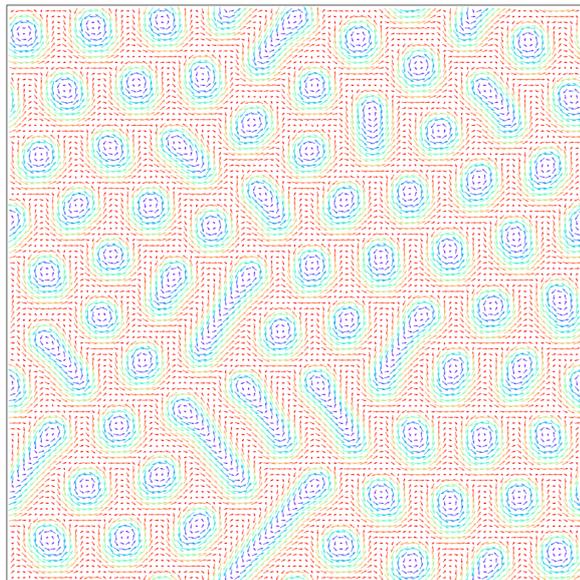


Abbildung 4.24: Monte-Carlo-Simulation mit periodischen Randbedingungen  
 $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, 0)$ ,  $\Delta T = 0,00005$

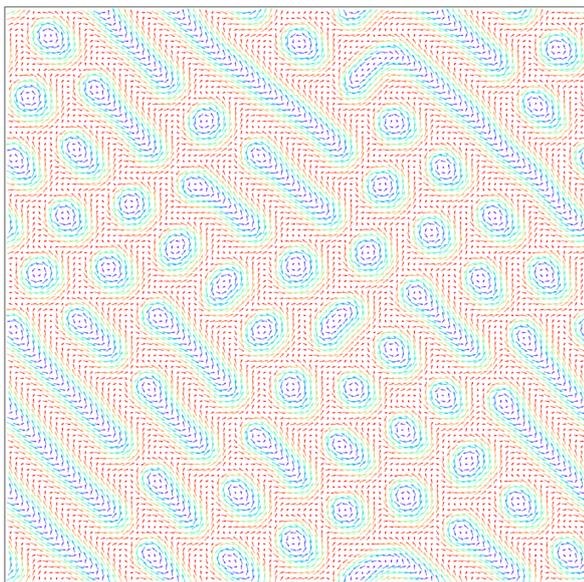


Abbildung 4.25: Monte-Carlo-Simulation mit periodischen Randbedingungen  
 $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4})$ ,  $\Delta T = 0,001$

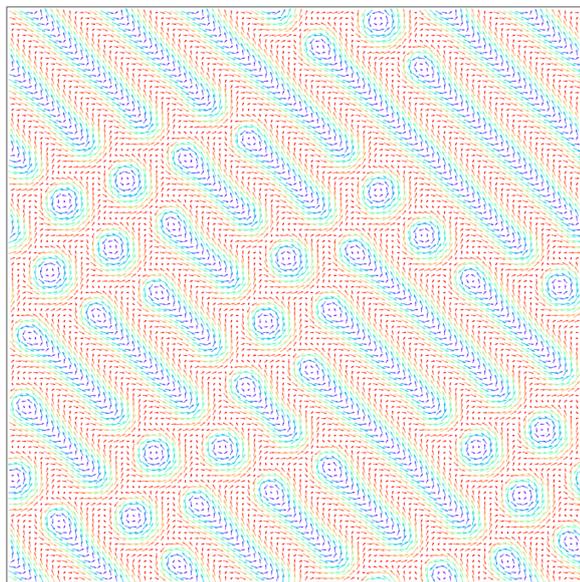


Abbildung 4.26: Monte-Carlo-Simulation mit periodischen Randbedingungen  
 $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4})$ ,  $\Delta T = 0,00005$

der Anisotropieterme von  $\mathbf{k}$  führt zu einer zusätzlichen Komponente des freie Energie Funktionals, die abhängig von der Ausbreitungsrichtung  $\mathbf{Q}$  ist. Es folgt somit, dass die energetisch günstigste Ausrichtung der konischen Phase nicht mehr parallel zum Magnetfeld sein muss, sondern durch die Anisotropien auch davon abweichen kann.

Bei Betrachtung der Abbildungen 4.16, 4.18, 4.20 und 4.22 wird beobachtet, dass die konischen Strukturen sich nicht exakt entlang  $\mathbf{B}(\theta, \phi)$  ausrichten, sondern mit einer Tendenz zu den Diagonalen des Spingitters. Besonders ausgeprägt ist dieser Effekt bei Abbildungen 4.23 und 4.24, auf denen sowohl skyrmionische als auch konische Strukturen existieren. Die konischen Strukturen sind bei diesen Simulationen vollkommen entlang der Diagonalen anstelle des Magnetfeldes  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, 0)$  ausgerichtet. Es kann somit geschlussfolgert werden, dass die Anisotropien die Orientierung der konischen Phase entlang der Diagonalen bevorzugen.

Diese Schlussfolgerung wird unterstützt durch die Ergebnisse auf Abbildungen 4.25 und 4.26. Das in diesen Simulationen gewählte Magnetfeld  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4})$  ist entlang einer Diagonalen des Spingitters orientiert. In Folge dessen sind bei beiden Simulationen die konischen Strukturen ohne Ausnahme parallel zum Magnetfeld ausgebildet. Ein weiterer Effekt des Magnetfeldes in Diagonalrichtung scheint zu sein, dass die konischen Strukturen viel weniger Defekte aufweisen als bei Simulationen mit einem Magnetfeld in Richtung eines der Gittervektoren, siehe Abbildungen 4.23 und 4.24. Diese Beobachtungen werden auch den Anisotropien zugeordnet, da Magnetfeld und Anisotropien die identische Orientierung der konischen Phase bevorzugen.

Abbildungen 4.27, 4.28, 4.29, 4.30, 4.31 und 4.32 zeigen weitere Beispiele für die Auswirkungen der Kombination von Magnetfeldorientierung und Anisotropien. Alle Simulationen bestätigen die obigen Aussagen.

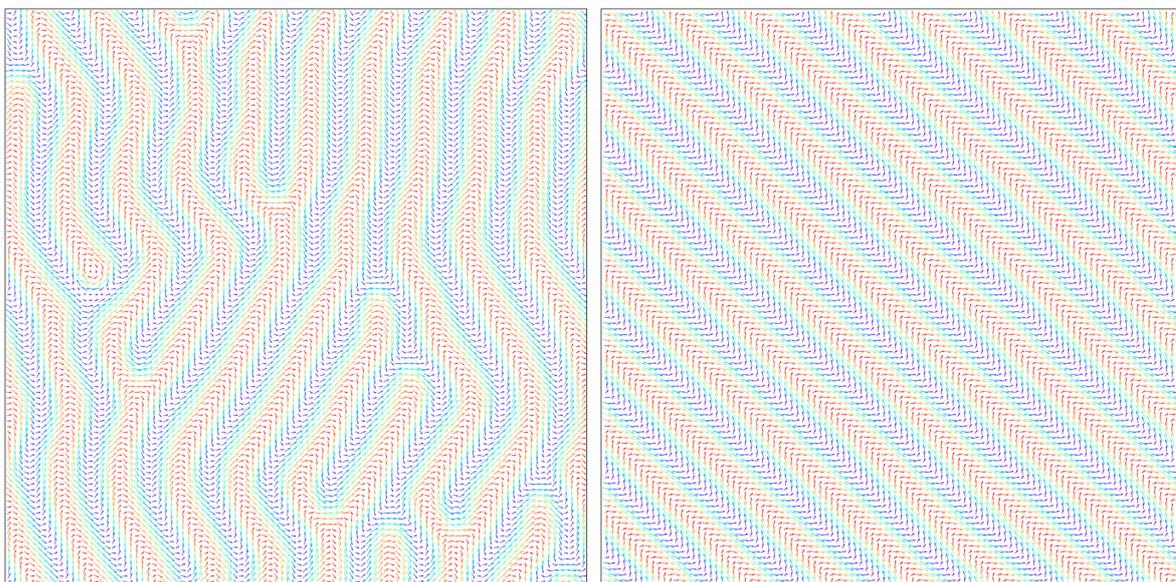


Abbildung 4.27: Monte-Carlo-Simulation mit periodischen quadratischen Randbedingungen  $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, 0)$

Abbildung 4.28: Monte-Carlo-Simulation mit periodischen quadratischen Randbedingungen  $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4})$

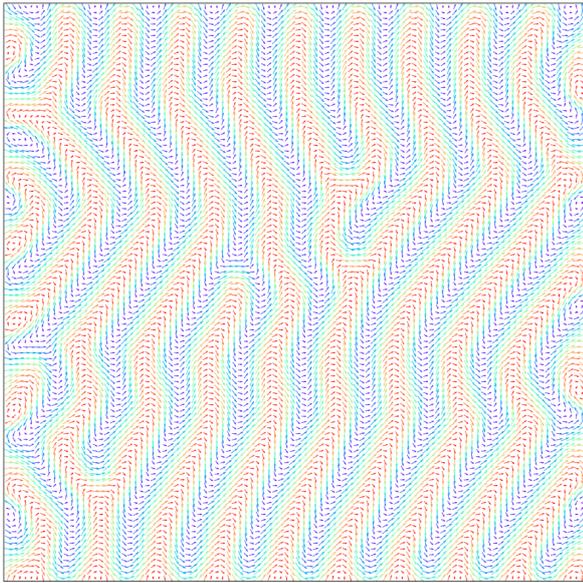


Abbildung 4.29: Monte-Carlo-Simulation mit offenen quadratischen Randbedingungen  
 $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, 0)$

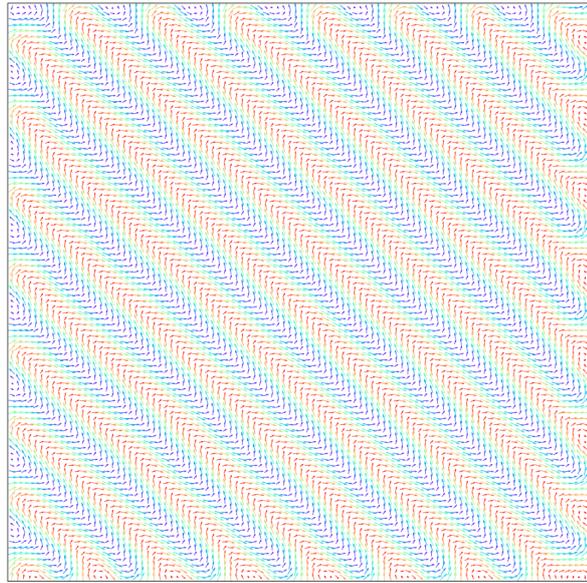


Abbildung 4.30: Monte-Carlo-Simulation mit offenen quadratischen Randbedingungen  
 $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4})$

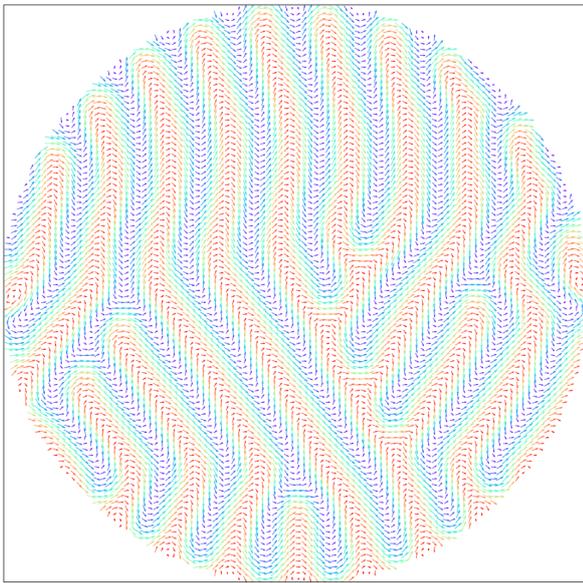


Abbildung 4.31: Monte-Carlo-Simulation mit offenen kreisförmigen Randbedingungen  
 $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, 0)$

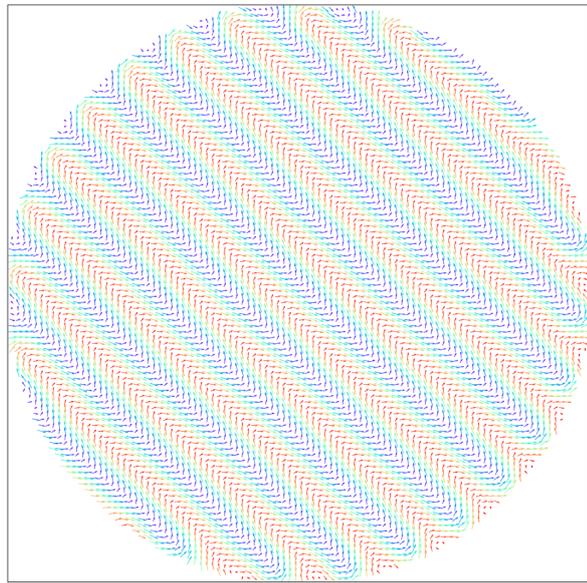


Abbildung 4.32: Monte-Carlo-Simulation mit offenen kreisförmigen Randbedingungen  
 $100 \times 100$  Spins,  $\mathbf{B}(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4})$

## 4.4 Simulation der magnetischen Strukturen

### 4.4.1 mit externem Magnetfeld in [1,1]-Richtung

Alle folgenden Abbildungen sind die Ergebnisse von Monte-Carlo-Simulationen mit den Parametern  $K = 0,726542528 J, B_0 = 0,2 J, \phi = \frac{\pi}{4}$  und variablem Neigungswinkel  $\theta$ . Die Simulationen wurden auf Gittern der Größe  $100 \times 100$  Spins mit periodischen quadratischen Randbedingungen durchgeführt. Die Temperaturverringerung ist wie in Abschnitt 4.2 beschrieben gewählt. Jede Simulation wurde mit festem Wert von  $\theta$  mit Simulated Annealing durchgeführt. Anisotropien und Magnetfeld favorisieren die selbe Ausbreitungsrichtung der konischen Struktur.

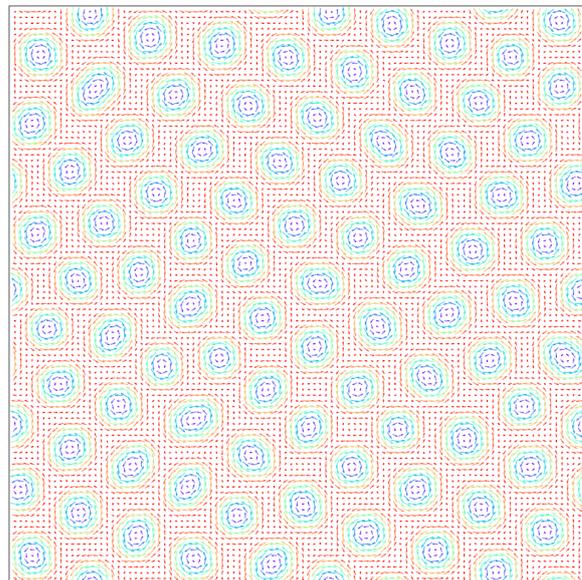


Abbildung 4.33:  $\mathbf{B}(0, \frac{\pi}{4})$

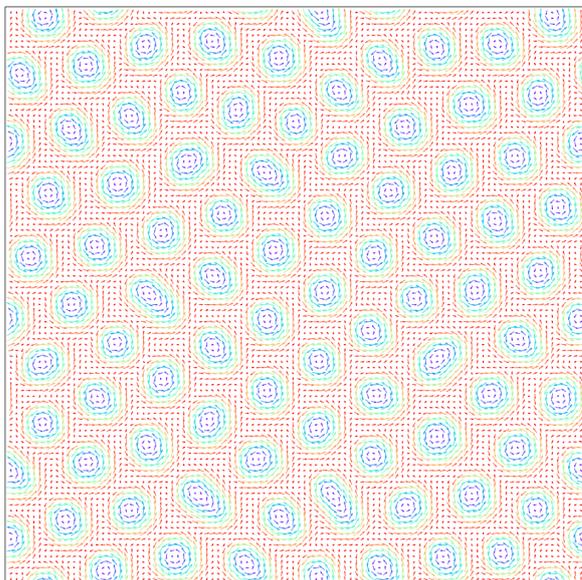


Abbildung 4.36:  $\mathbf{B}(0,15\pi, \frac{\pi}{4})$

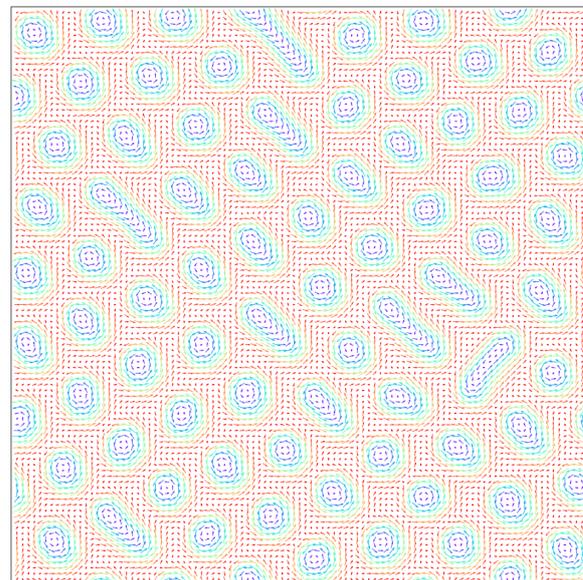
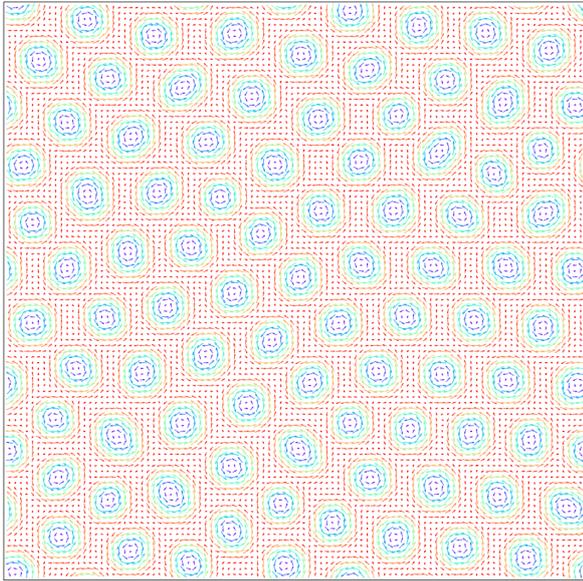
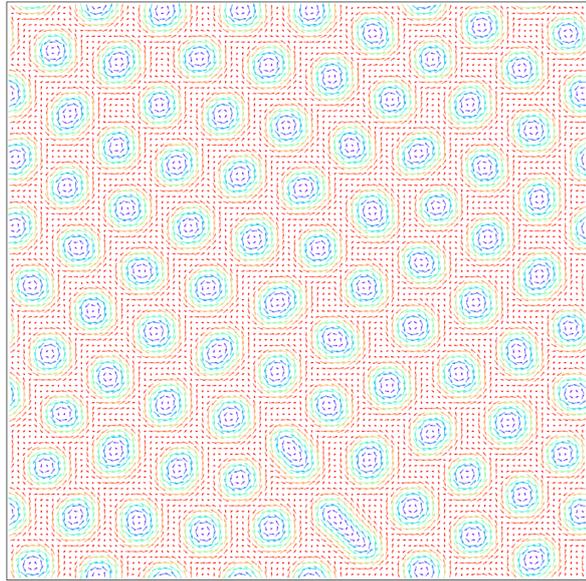
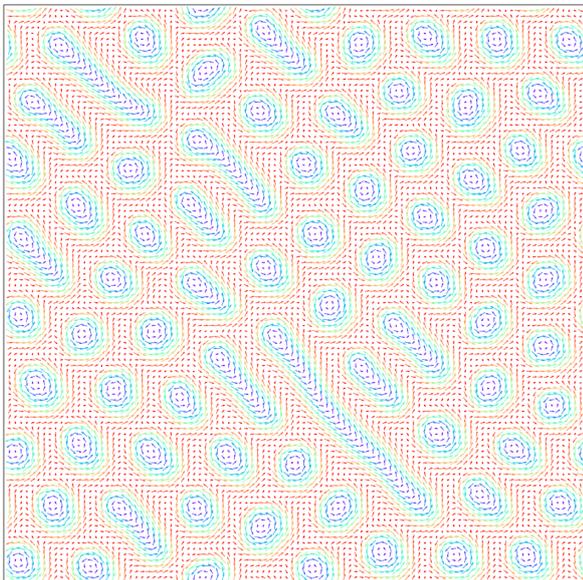
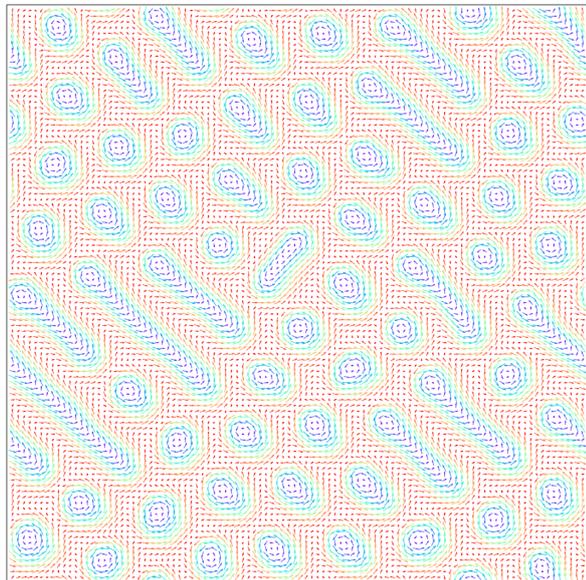
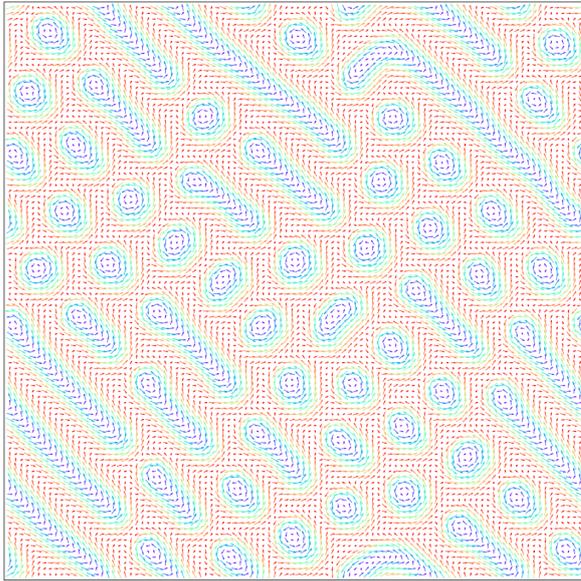
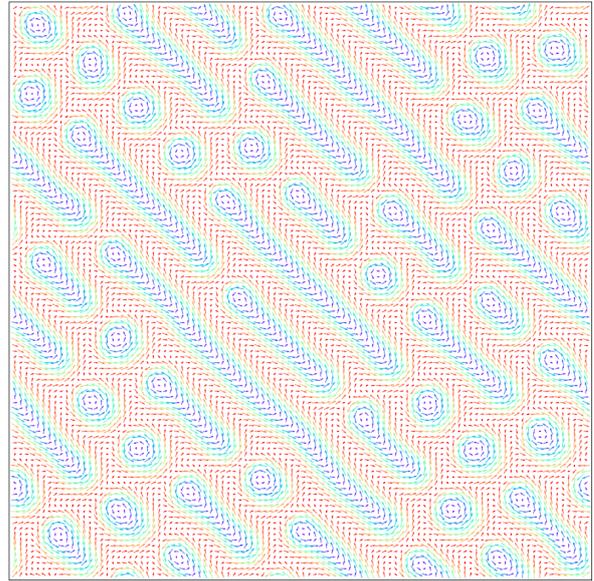
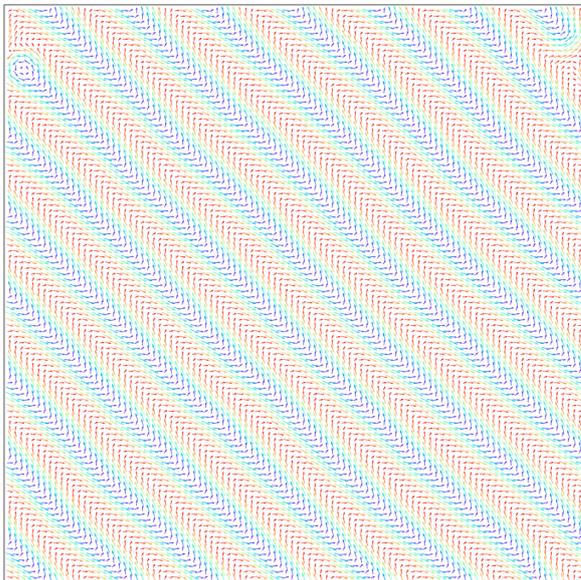
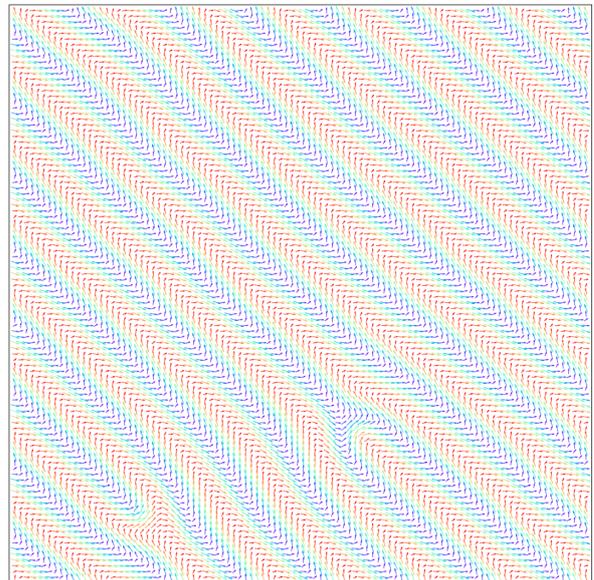
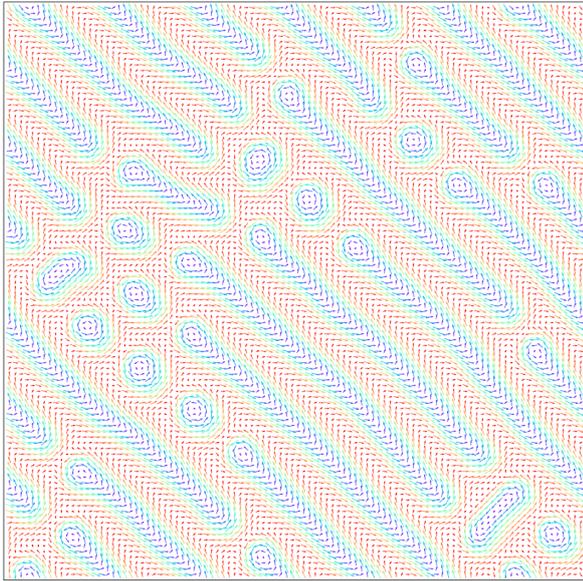
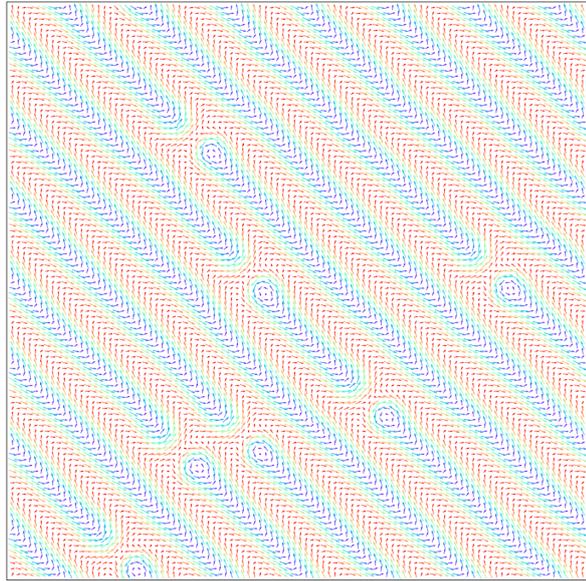
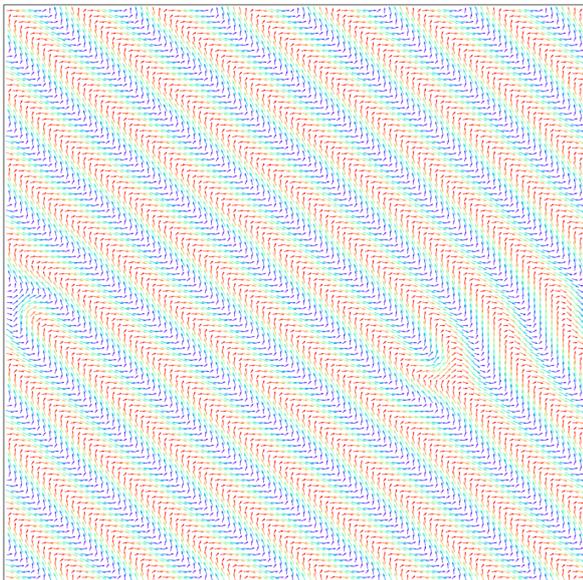
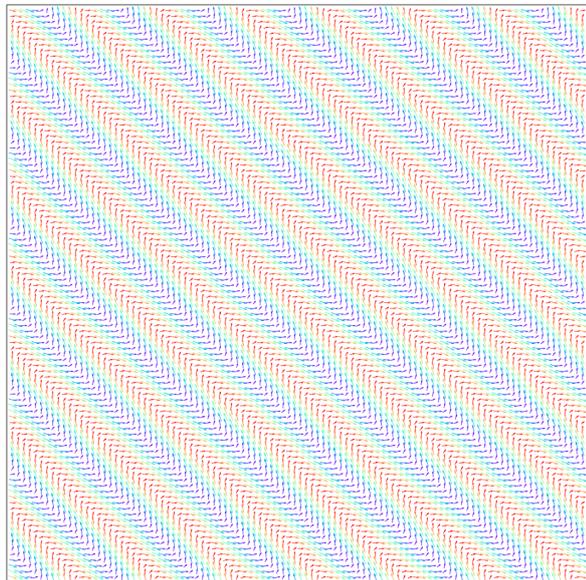


Abbildung 4.37:  $\mathbf{B}(0,20\pi, \frac{\pi}{4})$

Abbildung 4.34:  $\mathbf{B}(0,05\pi, \frac{\pi}{4})$ Abbildung 4.35:  $\mathbf{B}(0,10\pi, \frac{\pi}{4})$ Abbildung 4.38:  $\mathbf{B}(0,22\pi, \frac{\pi}{4})$ Abbildung 4.39:  $\mathbf{B}(0,24\pi, \frac{\pi}{4})$

Abbildung 4.40:  $\mathbf{B}(0,25\pi, \frac{\pi}{4})$ Abbildung 4.41:  $\mathbf{B}(0,26\pi, \frac{\pi}{4})$ Abbildung 4.44:  $\mathbf{B}(0,35\pi, \frac{\pi}{4})$ Abbildung 4.45:  $\mathbf{B}(0,40\pi, \frac{\pi}{4})$

Abbildung 4.42:  $\mathbf{B}(0,28\pi, \frac{\pi}{4})$ Abbildung 4.43:  $\mathbf{B}(0,30\pi, \frac{\pi}{4})$ Abbildung 4.46:  $\mathbf{B}(0,45\pi, \frac{\pi}{4})$ Abbildung 4.47:  $\mathbf{B}(0,50\pi, \frac{\pi}{4})$

#### 4.4.2 mit externem Magnetfeld in $[1,0]$ -Richtung

Alle folgenden Abbildungen sind die Ergebnisse von Monte-Carlo-Simulationen mit den Parametern  $K = 0,726542528 J, B_0 = 0,2 J, \phi = 0$  und variablem Neigungswinkel  $\theta$ . Die Simulationen wurden auf Gittern der Größe  $100 \times 100$  Spins mit periodischen quadratischen Randbedingungen durchgeführt. Die Temperaturverringerung ist wie in Abschnitt 4.2 beschrieben gewählt. Jede Simulation wurde mit festem Wert von  $\theta$  mit Simulated Annealing durchgeführt. Anisotropien und Magnetfeld favorisieren eine unterschiedliche Ausbreitungsrichtung der konischen Struktur.

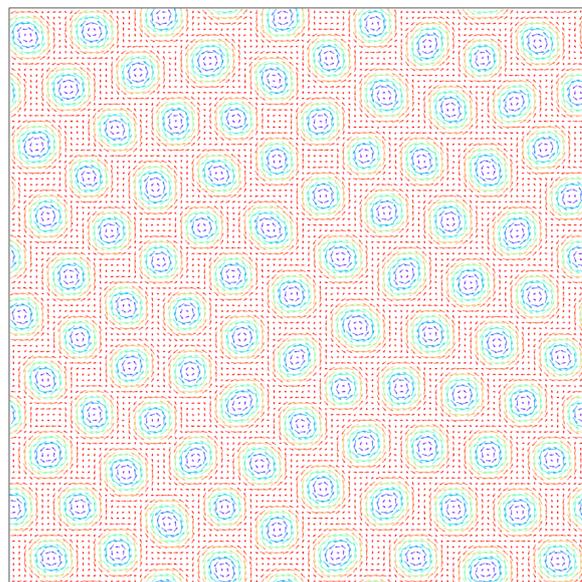


Abbildung 4.48:  $\mathbf{B}(0,0)$

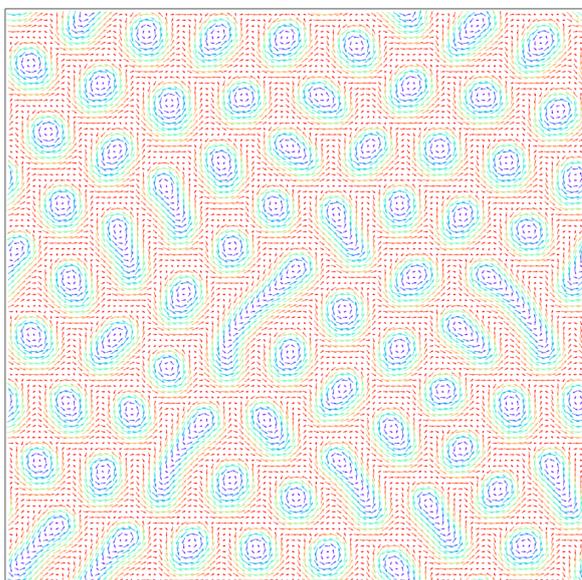


Abbildung 4.51:  $\mathbf{B}(0,15\pi,0)$

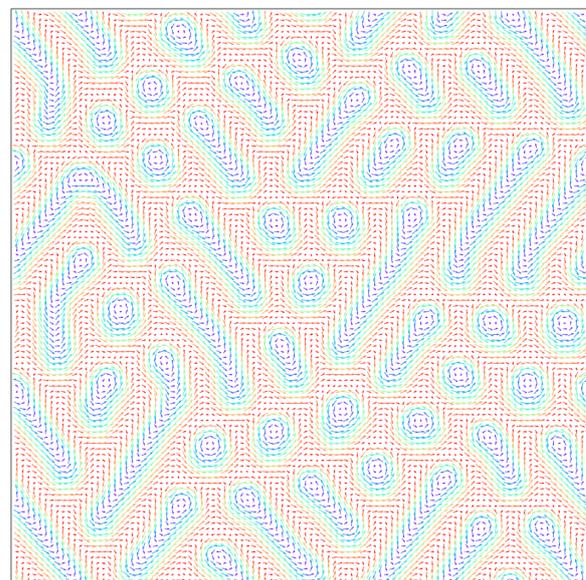
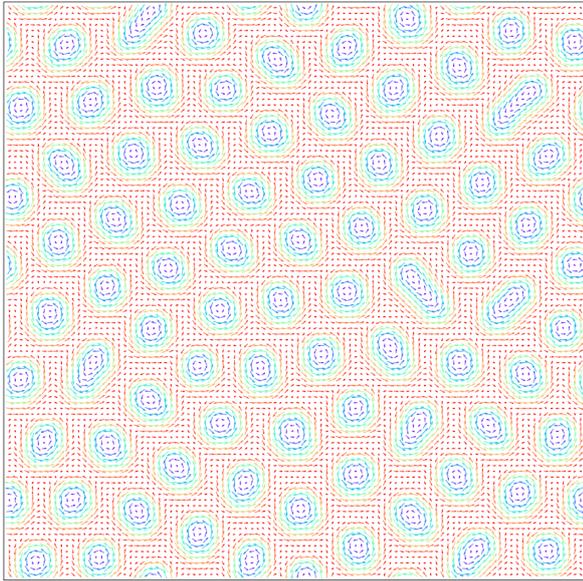
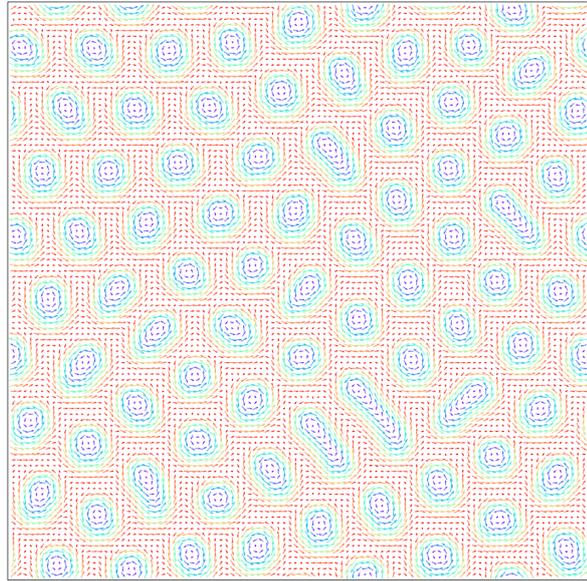
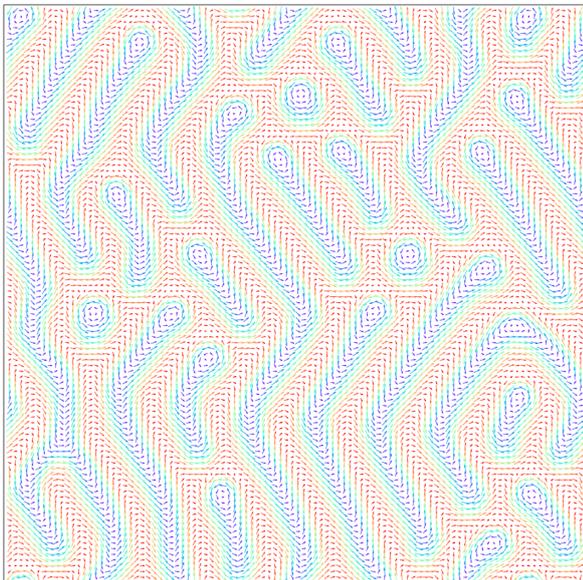
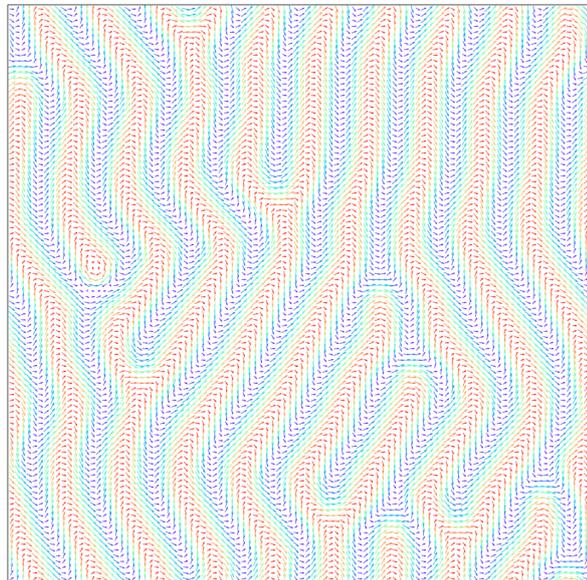


Abbildung 4.52:  $\mathbf{B}(0,20\pi,0)$

Abbildung 4.49:  $\mathbf{B}(0,25\pi, 0)$ Abbildung 4.50:  $\mathbf{B}(0,30\pi, 0)$ Abbildung 4.53:  $\mathbf{B}(0,35\pi, 0)$ Abbildung 4.54:  $\mathbf{B}(0,50\pi, 0)$

### 4.4.3 Analyse und Vergleich der Ergebnisse

Unabhängig von der Wahl der Orientierung des Magnetfeldes bildet sich unter Neigungswinkeln  $0 \leq \theta \leq 0,15\pi$  eine nahezu reine Skymionphase aus, die nur wenige Defekte aufweist. Mit dem Neigungswinkel  $\theta$  nehmen auch die Defekte in Form von gestreckten Skymionen zu. Die Streckung wirkt dabei in den Simulationen mit Magnetfeldorientierung in  $[1,1]$ -Richtung nur auf die Bereiche der Skymionen, in denen die Spins parallel zum Magnetfeld angeordnet sind, wodurch die resultierende Streckrichtung senkrecht zum Magnetfeld orientiert ist. Die Streckung der Skymionen ist auch für ein Magnetfeld in  $[1,0]$ -Richtung vorhanden. Dabei ist die Streckrichtung nicht senkrecht zum Magnetfeld, sondern zu den Diagonalen des Gitters orientiert. Dieser Effekt ist eine Folge der Anisotropien des Gittermodells [3.1]. Weiterhin ist dieser die Ursache dafür, dass sich bei Neigungswinkeln in  $[1,0]$ -Richtung weniger gestreckte Skymionen bilden als für gleiche Neigungswinkel in  $[1,1]$ -Richtung. Die Anzahl der Skymionen nimmt mit steigendem Neigungswinkel  $\theta$  ab, bis durch die parallele Anordnung der gestreckten Skymionen die konische Phase resultiert. Anisotropiebedingt [3.1] weist die konische Phase für  $\phi = 0$  deutlich mehr Störstellen auf als für  $\phi = \frac{\pi}{4}$ , wodurch skymionähnliche Objekte auch bei größeren Werten für  $\theta$  noch existieren. Es sei weiterhin erwähnt, dass die Simulationen auch mit offenen quadratischen, kreisförmigen und hexagonalen Randbedingungen durchgeführt wurden, die beobachteten Strukturbildungen aber unter allen Randbedingungen ähnlich sind, siehe Anhang.

## 4.5 Analyse des Phasenübergangs

Der als Ergebnis der Monte-Carlo-Simulationen beobachtete Phasenübergang zwischen skymionischer und konischer Phase ist gekennzeichnet durch die Bildung von Defekten in Form von gestreckten Skymionen in einer sonst skymionischen Phase oder skymionähnlichen Abschlüssen in einer sonst konischen Phase, siehe Abschnitt 4.4.3. Die Gemeinsamkeit von sowohl Skymionen, diesen Defekten und der konischen Phase ist das Vorkommen der skymionähnlichen Abschlüsse. Diese können durch die Abschlussanzahl  $n$  beschrieben werden. Demnach besitzt ein einzelnes Skymion die Abschlussanzahl  $n = 2$ , ein einzelner skymionähnlicher Abschluss  $n = 1$  und eine perfekte konische Phase  $n = 0$ . Zur Beschreibung des Phasenübergangs werden für die mittels Monte-Carlo-Simulationen für verschiedene Orientierungen von  $\mathbf{B}(\theta_0, \phi_0)$  gefundenen Grundzustände  $\{\mathbf{s}_i\}_{\theta_0}$  die Abschlusszahlen  $n$  bestimmt. Dabei werden die am Rand des Gitters durch offene Randbedingungen verursachten Defekte nicht mitgezählt. Weiterhin wird die Abschlussdichte  $\rho$  definiert als  $\rho(\theta) = \frac{n(\theta)}{n(\theta=0)}$ . Die reine Skymionphase ist somit durch  $\rho = 1$  und die konische Phase durch  $\rho = 0$  klassifiziert. Der Zusammenhang  $\rho(\theta)$  ist in den Abbildungen 4.55 und 4.56 aufgetragen. Die dafür ausgewerteten Daten sind die in Abschnitt 4.4 dargestellten Simulationsergebnisse und weitere mit dem selben Verfahren ermittelte Grundzustände für die nicht dargestellten Randbedingungen und Magnetfeldorientierungen.

Die Ergebnisse verdeutlichen den Einfluss der Anisotropien auf die Winkelabhängigkeit des Phasenübergangs, da für Magnetfelder gegen die Anisotropierichtung,  $\phi = 0$ , die Skymionphase genau so lange stabil ist, jedoch der Übergangsbereich zur konischen Phase etwa doppelt so breit ist, wie für Magnetfelder in Anisotropierichtung,  $\phi = \frac{\pi}{4}$ . Dadurch ist das Intervall von  $\theta$ , in dem die konische Phase ausgebildet wird, für  $\phi = 0$  kleiner. Unabhängig davon ob das Magnetfeld in  $[1,0]$ - oder  $[1,1]$ -Richtung rotiert ist somit die Existenz einer defektbehafteten Phase als Grundzustand gegeben.

Ein weiterer in diesem Zusammenhang interessanter Effekt ist der Hysterese-Effekt, welcher für

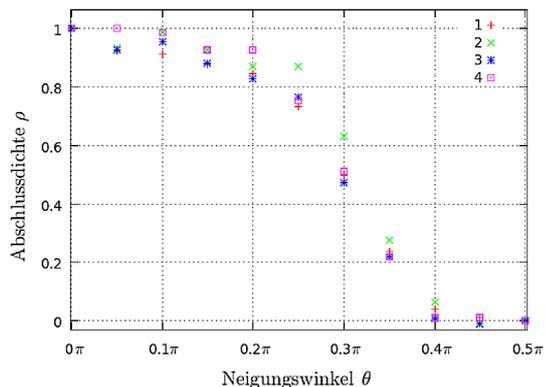


Abbildung 4.55: Graphische Auftragung von  $\rho(\theta)$  für Systeme mit Magnetfeldrotation in  $[1,0]$ -Richtung

- 1: periodische quadratische RB
- 2: offene quadratische RB
- 3: offene kreisförmige RB
- 4: offene hexagonale RB

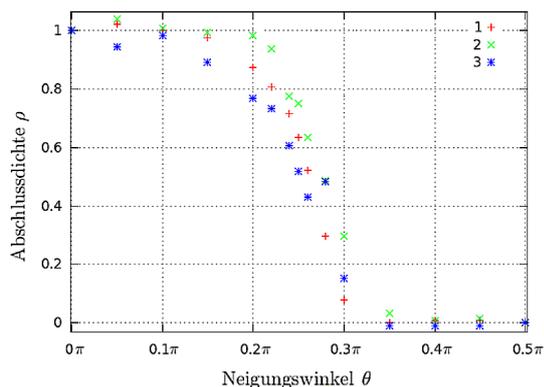


Abbildung 4.56: Graphische Auftragung von  $\rho(\theta)$  für Systeme mit Magnetfeldrotation in  $[1,1]$ -Richtung

- 1: periodische quadratische RB
- 2: offene quadratische RB
- 3: offene kreisförmige RB

einen Phasenübergang erster Ordnung zu erwarten wäre. Dabei wird ermittelt, ab welchen Neigungswinkeln  $\theta$  die Strukturen der skyrmionischen und konischen Phase aufbrechen und in die jeweils andere Phase übergehen. Für die numerische Umsetzung einer Hysterese messung wird mittels Simulated Annealing eine konische oder skyrmionische Phase erzeugt. Dieser Zustand wird anschließend unter einem in Schritten von  $\Delta\theta = 0,01\pi$  drehenden Magnetfeld bei jeder Winkeleinstellung ab  $T = 0,24 J < T_c = 0,26$  mit Simulated Annealing abgekühlt, wobei die Abkühlrate  $\Delta T = 0,001 J$  und die Anzahl der Iterationen pro Temperaturintervall  $10^7$  beträgt.

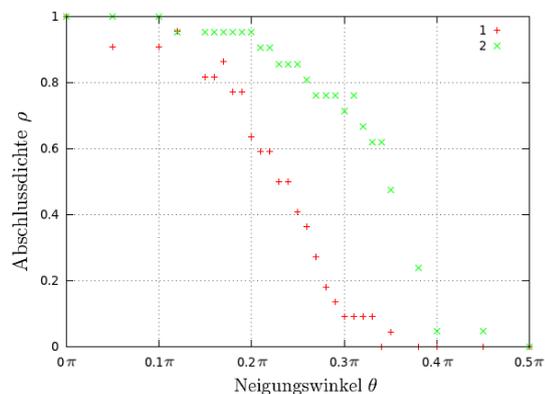


Abbildung 4.57: Graphische Auftragung der Hysterese messung für Systeme mit Magnetfeldrotation in  $[1,0]$ -Richtung

- 1: Übergang von konischer zu skyrm. Phase
- 2: Übergang von skyrm. zu konischer Phase

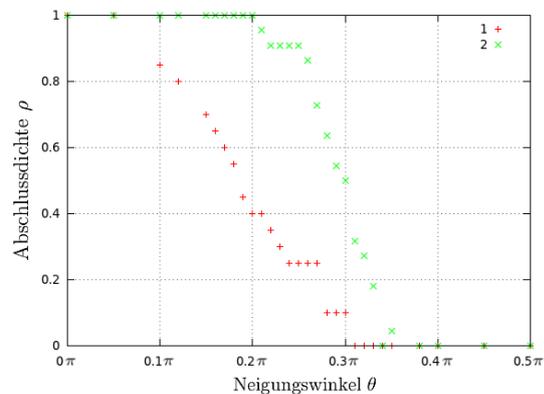


Abbildung 4.58: Graphische Auftragung der Hysterese messung für Systeme mit Magnetfeldrotation in  $[1,1]$ -Richtung

- 1: Übergang von konischer zu skyrm. Phase
- 2: Übergang von skyrm. zu konischer Phase

Im Gegensatz zu den Simulationen aus Abschnitt 4.4 wird das System nicht für jede Winkeleinstellung vollkommen neu generiert, sondern mittels Simulated Annealing aus der finalen Struk-

tur unter vorherigen Winkeleinstellung ermittelt. Die für die Simulation verwendeten Gitter sind  $50 \times 50$  Spins groß und es werden periodische quadratische Randbedingungen verwendet. Das Ergebnis, Abbildungen 4.57 und 4.58, zeigt eine Verschiebung des Phasenübergangs in der Winkelabhängigkeit, da der Energieunterschied in der Nähe des Phasenübergangs durch nur geringe Vorteile im Winkel und eine niedrige Temperatur nicht ausreicht um die geordnete Phase aufzubrechen. Das System bleibt somit für größere Bereiche von  $\theta$  in der zu Beginn ermittelten Grundzustandskonfiguration, als dies für Abkühlen des Systems bei festem Winkel geschieht.

#### 4.6 Vergleich der freien Energien der unterschiedlichen Phasen

Um beurteilen zu können, wie groß der Energiegewinn aus der Bildung von Defekten ist, werden die Energien der berechneten Grundzustände unter unterschiedlichen Neigungswinkeln  $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$  betrachtet.

Für die Berechnung der freien Energie unter verschiedenen Winkeln wird mittels einer Monte-Carlo-Simulation der Grundzustand für einen vorgegeben Neigungswinkel  $\theta_0$  ermittelt. Bei unterschiedlichen Werten  $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$  wird der Grundzustand für  $\theta_0$ ,  $\{\mathbf{s}_i\}_{\theta_0}$ , ab einer Temperatur von  $T = 0,005 J$  nach jeweils  $5 \cdot 10^6$  Monte-Carlo-Iterationen um  $\Delta T = 0,001 J$  abgekühlt. Dabei wird  $\theta$  konstant gehalten. Für  $T = 0$  werden abschließend weitere  $5 \cdot 10^7$  Monte-Carlo-Iterationen durchgeführt. Die Anfangstemperatur des Simulated Annealing ist so niedrig gewählt, damit die Spins fluktuieren können, die Zustände dabei aber nicht aufbrechen. Durch das leichte Aufheizen des Systems soll dem Zustand  $\{\mathbf{s}_i\}_{\theta_0}$  ermöglicht werden, die Spinkonfiguration an die neue Orientierung des Magnetfeldes anzupassen, ohne in eine andere Phase überzugehen. Der dadurch erhaltene Zustand wird erneut aufgeheizt und abgekühlt, wodurch iterativ der Zustand geringster Energie dieser Phase ermittelt wird. Dieses Verfahren wird bei gleicher Winkeleinstellung 20-mal wiederholt. Bei Änderung des Winkels  $\theta$  wird die Iteration wieder mit  $\{\mathbf{s}_i\}_{\theta_0}$  gestartet, siehe Abbildung 4.59.

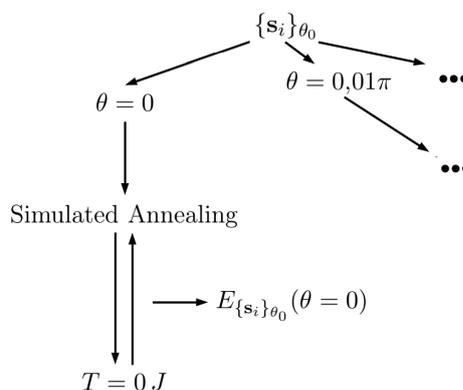


Abbildung 4.59: Schematischer Verlauf der Bestimmung der freien Energie einer Spinkonfiguration unter unterschiedlichen Neigungswinkeln  $\theta$

Die niedrigsten während der Iterationen erhaltenen Energien werden verglichen. Um eine Abschätzung für die Ungenauigkeit zu erhalten, die durch die nur begrenzte Zeit zur Neuorientierung der Spins entsteht, wird als Maß für diesen Fehler ein Fehlerbalken der Breite  $\Delta E = \sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} / \sqrt{20}$  angegeben.

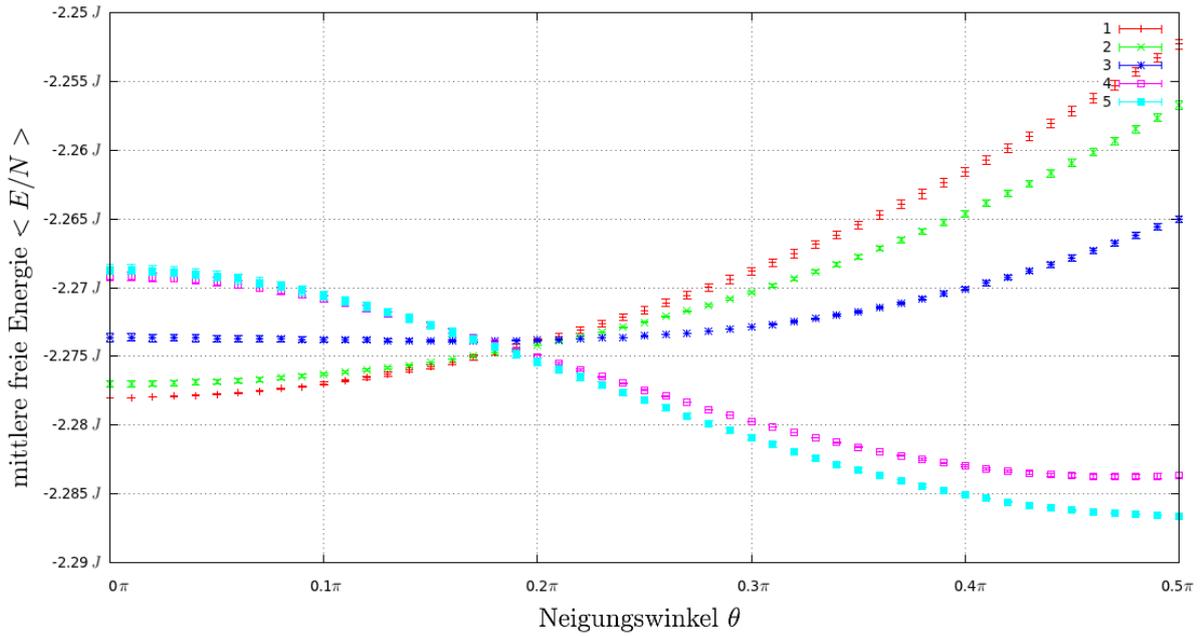


Abbildung 4.60: Freie Energie unterschiedlicher Grundzustände unter unterschiedlichen Neigungswinkeln  $\theta$ . Die  $\{\mathbf{s}_i\}_{\theta_0}$  sind die Grundzustände auf den Abbildungen 4.33 (1), 4.37 (2), 4.40 (3), 4.43 (4), 4.47 (5). Die Magnetfeldorientierung ist in  $[1,1]$ -Richtung gewählt. Das Magnetfeld und die Anisotropien bevorzugen für die konische Phase die selbe Ausrichtung.

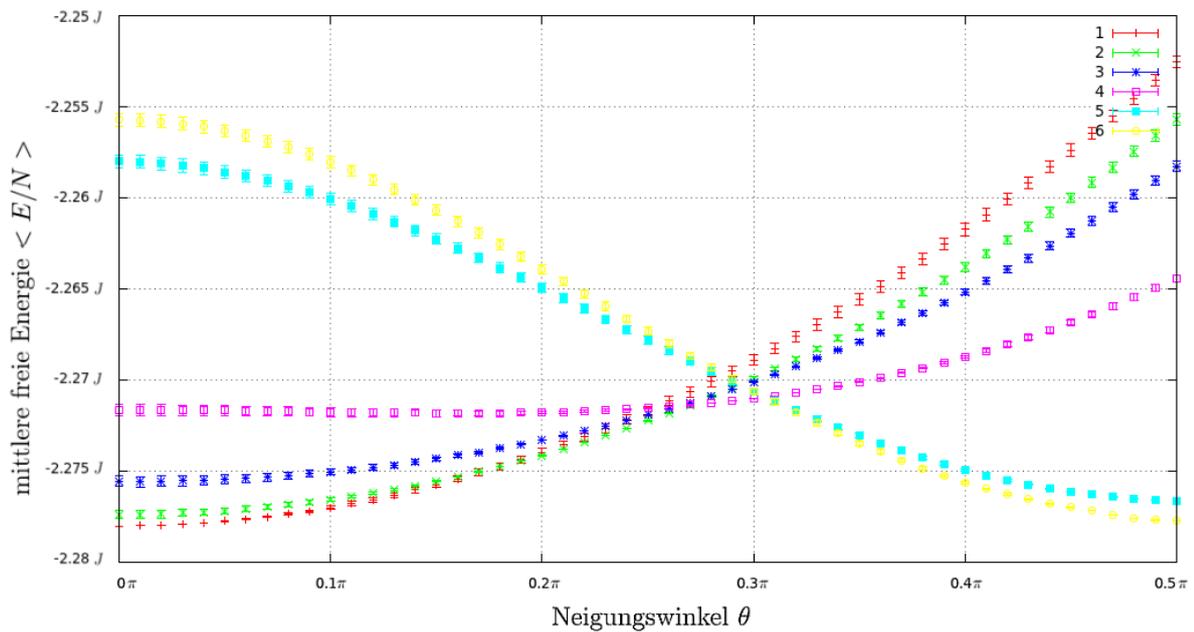


Abbildung 4.61: Freie Energie unterschiedlicher Grundzustände unter unterschiedlichen Neigungswinkeln  $\theta$ . Die  $\{\mathbf{s}_i\}_{\theta_0}$  sind die Grundzustände auf den Abbildungen 4.33 (1), 4.50 (2), 4.51 (3), 4.52 (4), 4.54 (5) und eine reine konische in  $[1,0]$ -Richtung orientierte Phase (6). Die Magnetfeldorientierung ist in  $[1,0]$ -Richtung gewählt. Das Magnetfeld und die Anisotropien bevorzugen für die konische Phase unterschiedliche Ausrichtungen.

Der Vergleich von Grundzuständen in Abbildung 4.60, die bei unterschiedlichen Neigungswinkeln  $\theta$  gefunden wurden, zeigt, dass bei gleicher Magnetfeldorientierung entlang der [1,1]-Richtung immer die Energie der skyrmionischen oder der konischen Phase bei einer Temperatur  $T = 0$  die geringste ist. Die defektbehafteten Phasen sind selbst für die Neigungswinkel  $\theta$ , bei denen sie durch Simulated Annealing als Grundzustand bestimmt wurden, energiereicher als mindestens eine der skyrmionischen oder konischen Phasen. Der Grund für diesen Energieunterschied ist, dass das Simulated Annealing während der Abkühlung in einer Phase einfriert, die es mangels einer ausreichenden Temperatur nicht mehr verlassen kann. Die einzigen und wahren Grundzustände des Systems für  $T = 0$  und ein Magnetfeld in [1,1]-Richtung sind somit die skyrmionische und die konische Phase. Der Phasenübergang findet bei  $0,18\pi < \theta < 0,19\pi$  statt. Dies steht somit im Kontrast zu den Ergebnissen des Simulated Annealing, wonach auch defektbehaftete Phasen Grundzustände sein sollten. Für die ebenfalls erhaltenen defektbehafteten Phasen folgt, dass diese keine wahren Grundzustände des Systems für  $T = 0$  sind. Für endliche Temperaturen kann dies nicht gefolgert werden, da skyrmionische Strukturen entropiereicher sind als konische Strukturen [3], wodurch die defektbehafteten Phasen im Bereich des Phasenübergangs einen Vorteil gegenüber der reinen konischen Phasen haben. Auch das Einfrieren des Simulated Annealing in einer Phase mit Defekten ist ein Hinweis auf deren Existenz als Grundzustand im T- $\theta$ -Phasendiagramm an einem Punkt, der beim Abkühlen des Systems durchlaufen wird.

Die freien Energien für Magnetfeldorientierungen in [1,0]-Richtung zeigen ein anderes Verhalten, siehe Abbildung 4.61. Die defektbehafteten Phasen sind für  $0,18\pi < \theta < 0,31\pi$  energetisch günstiger als die skyrmionische oder konische Phase und somit echte Grundzustände des Systems. Da bei einer Magnetfeldorientierung in [1,0]-Richtung das Simulated Annealing keine reine konische Phase findet, ist eine zusätzliche präparierte Phase erstellt und ausgewertet worden, die eine perfekte konische in [1,0]-Richtung orientierte Struktur aufweist. Die Energie dieser liegt wie erwartet unter der durch Simulated Annealing gefundenen konischen Grundzustandskonfiguration, auf den Schnittpunkt mit der nächstgünstigsten Phasen hat diese Verschiebung jedoch keinen Einfluss. Der Energieunterschied zwischen den beiden Phasen niedrigster Energie beträgt in diesem Intervall maximal  $2 \cdot 10^{-3} \frac{J}{\text{Spin}}$ . Diese Energiedifferenz ist sehr gering und kann zufallsbedingt sein, wie der Vergleich längerer Abkühlzeiten [4.2] zeigte. Die Einflüsse der Randbedingungen und Anisotropieeffekte sind bei diesen Magnetfeldorientierungen ebenfalls sehr groß, da die konische Phase durch ungünstige Anisotropien und die Skyrmionphase in ihrer Strukturbildung durch die Randbedingungen gestört werden. Die Ergebnisse sind daher vermutlich konsistent. Die Art des Phasenübergangs ist durch diese Störungen somit jedoch nicht eindeutig. Die starken Anisotropieeinflüsse bei der Magnetfeldorientierung in [1,0]-Richtung sind in einem realen chiralen Material jedoch nicht gegeben, da diese aus der Näherung für das Gittermodell folgen.

Wie in den vorhergehenden Ergebnissen [4.5] kann eine Verschiebung des Phasenübergangs zu kleineren Neigungswinkeln für eine Magnetfeldorientierung in [1,1]-Richtung und größeren Neigungswinkeln für die [1,0]-Richtung festgestellt werden. Dieser Effekt wird auf die Anisotropien zurückgeführt.

Es wird somit aus dem Vergleich der freien Energien unter verschiedenen Neigungswinkeln  $\theta$  gefolgert, dass das Ergebnis des Simulated Annealing, defektbehaftete Phasen wären Grundzustände des Systems, auf eine Schwachstelle der Methode zurückzuführen ist und nur die konische und skyrmionische Phase Grundzustände bilden.

## 5 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Bachelorarbeit wurde numerisch untersucht, wie sich die Orientierung eines externen Magnetfeldes auf die magnetische Struktur dünner Schichten eines chiralen Magneten bei einer Temperatur von  $T = 0$  auswirkt.

Die Einflüsse von Randbedingungen [4.1], Abkühlrate [4.2] und Anisotropien [4.3] auf die Monte-Carlo-Ergebnisse wurden analysiert. Es wurden Monte-Carlo-Simulationen von zweidimensionalen Spingittern für verschiedene Magnetfeldorientierungen und Randbedingungen durchgeführt und diskutiert [4.4]. Der Phasenübergang zwischen skyrmionischer und konischer Phase wurde auf Basis der Ergebnisse von Simulationen mit Simulated Annealing analysiert und eine Hysterese simuliert [4.5].

Der abschließende Vergleich der freien Energien der Zustände [4.6] hat ergeben, dass der Phasenübergang für Magnetfeldorientierungen in die von Anisotropien favorisierte  $[1,1]$ -Richtung entgegen den Ergebnissen der Monte-Carlo-Simulationen von erster Ordnung ist. Für Magnetfeldorientierungen in  $[1,0]$ -Richtung ergab der Vergleich, dass der Phasenübergang von zweiter Ordnung ist. Für beide Magnetfeldorientierungen sind die Differenzen in den freien Energien am Phasenübergang sehr gering, so dass eine sehr starke Abhängigkeit der Ergebnisse von den Randbedingungen, Abkühlraten und Anisotropien folgt. Unter Einbezug dieser Korrekturkriterien ist der Phasenübergang vermutlich erster Ordnung, was nicht mit absoluter Gewissheit eindeutig bestimmt werden kann.

Zur Bestätigung eines Phasenübergangs erster Ordnung könnten Vergleiche freier Energien von Zuständen mit anderen Randbedingungen durchgeführt werden. Es könnten weiterhin die Grundzustände des Systems für endliche Temperaturen bestimmt werden, da für  $T > 0$  defektbehaftete Phasen durch die größeren Freiheiten im System über einen Vorteil bezüglich der Entropie verfügen.



## Literatur

- [1] Karin Everschor. Manipulating magnetic structures in chiral metals by currents, 2009.
- [2] Karin Everschor. *Current-Induced Dynamics of Chiral Magnetic Structures*. PhD thesis, Universität zu Köln, 2012.
- [3] S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Böni. Skyrmion lattice in a chiral magnet. *Science*, 323, Februar 2009.
- [4] X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa, and Y. Tokura. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal. *Nature*, 465, Juni 2010.
- [5] S. D. Yi, S. Onoda, N. Nagaosa, and J. H. Han. Skyrmions and anomalous hall effect in a dzyaloshinskii-moriya spiral magnet. *Physical Review B*, 80, August 2009.
- [6] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes*. Number 3. Cambridge University Press, 2007.



## Anhang

## Simulation der magnetischen Strukturen: offene quadratische Randbedingungen

mit externem Magnetfeld in  $[1,1]$ -Richtung

Alle folgenden Abbildungen sind die Ergebnisse von Monte-Carlo-Simulationen mit den Parametern  $K = 0,726542528 J, B_0 = 0,2 J, \phi = \frac{\pi}{4}$  und variablem Neigungswinkel  $\theta$ . Die Simulationen wurden auf Gittern der Größe  $100 \times 100$  Spins mit offenen quadratischen Randbedingungen durchgeführt. Die Temperaturverringerung ist wie in Abschnitt 4.2 beschrieben gewählt. Jede Simulation wurde mit festem Wert von  $\theta$  mit Simulated Annealing durchgeführt. Anisotropien und Magnetfeld favorisieren die selbe Ausbreitungsrichtung der konischen Struktur.

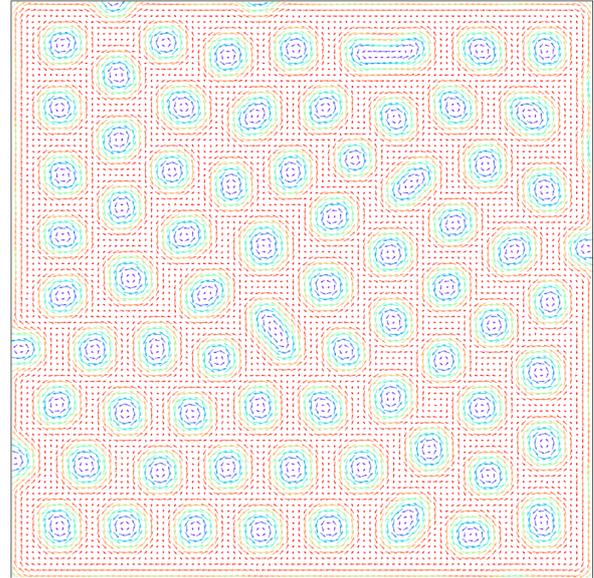


Abbildung 5.62:  $\mathbf{B}(0,00\pi, \frac{\pi}{4})$

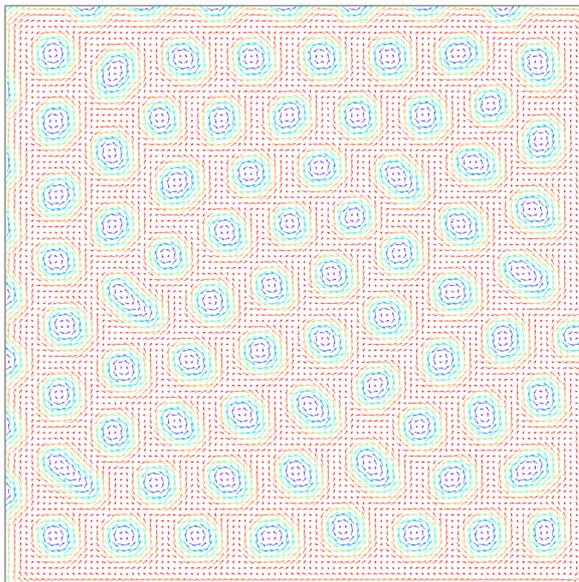


Abbildung 5.65:  $\mathbf{B}(0,15\pi, \frac{\pi}{4})$

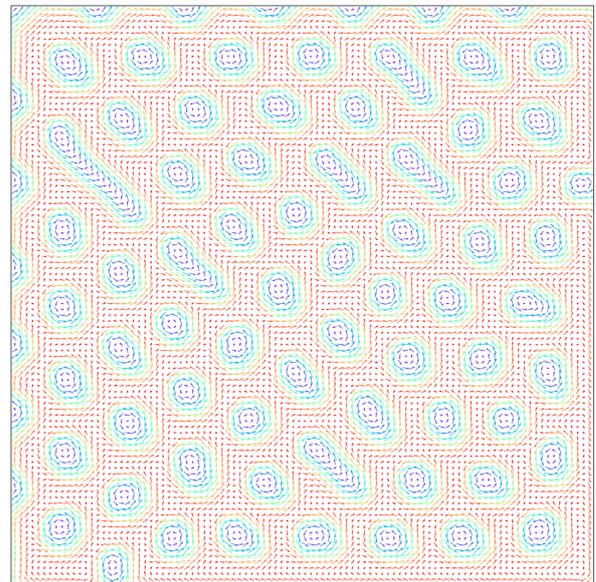


Abbildung 5.66:  $\mathbf{B}(0,20\pi, \frac{\pi}{4})$

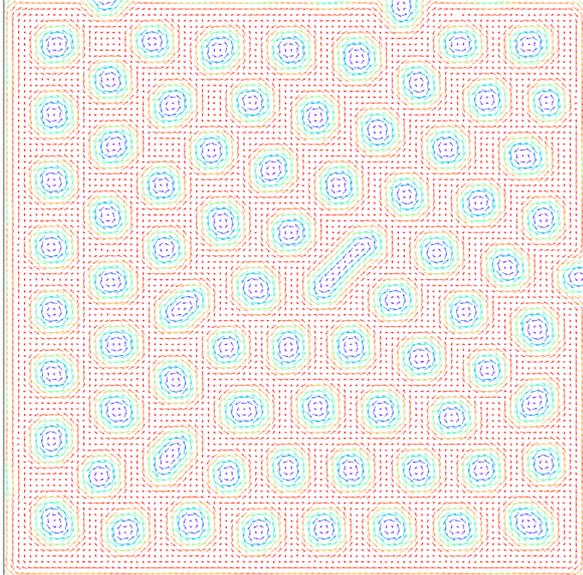


Abbildung 5.63:  $\mathbf{B}(0,05\pi, \frac{\pi}{4})$

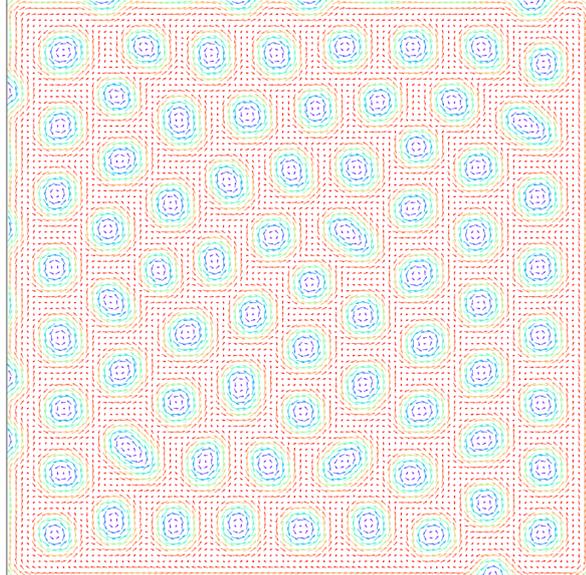


Abbildung 5.64:  $\mathbf{B}(0,10\pi, \frac{\pi}{4})$

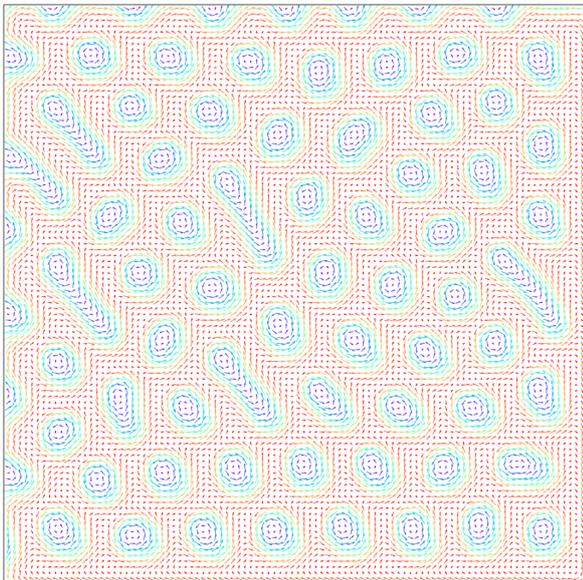


Abbildung 5.67:  $\mathbf{B}(0,22\pi, \frac{\pi}{4})$

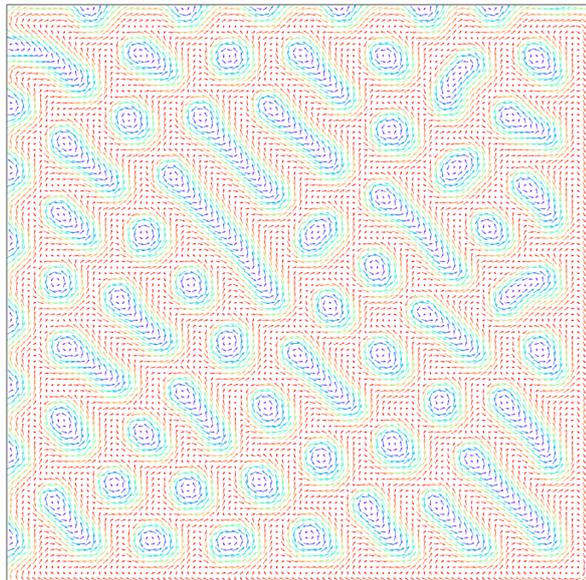


Abbildung 5.68:  $\mathbf{B}(0,24\pi, \frac{\pi}{4})$

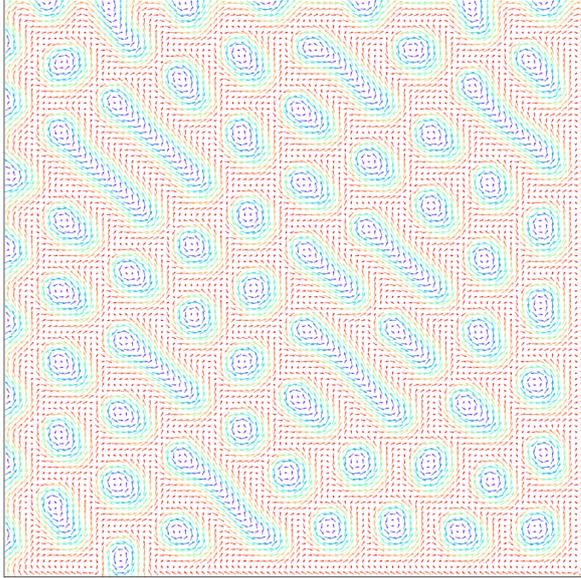


Abbildung 5.69:  $\mathbf{B}(0,25\pi, \frac{\pi}{4})$

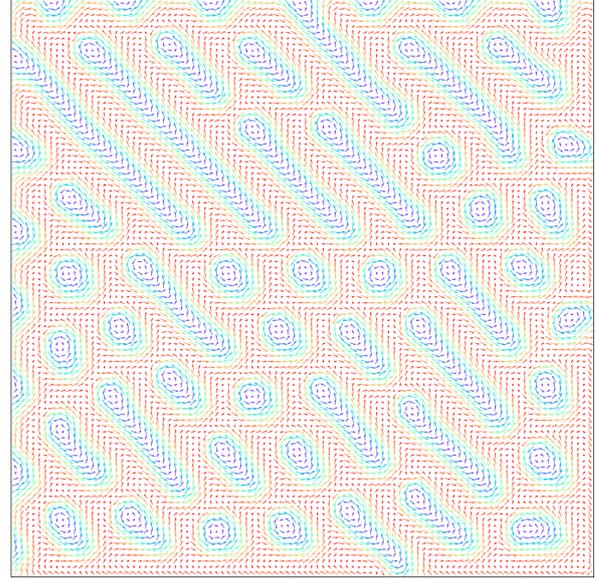


Abbildung 5.70:  $\mathbf{B}(0,26\pi, \frac{\pi}{4})$

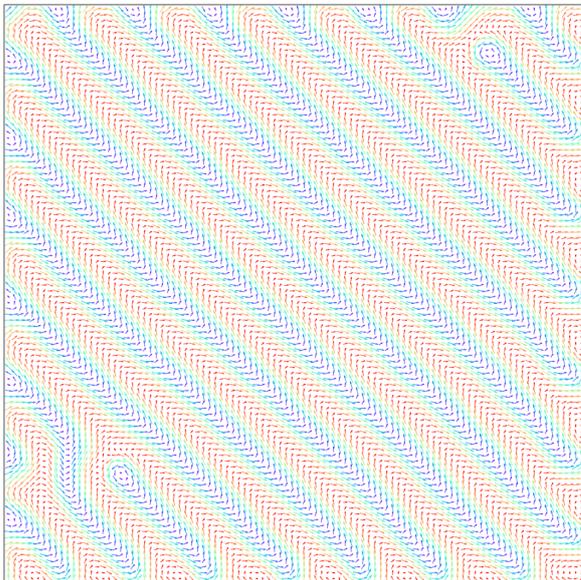


Abbildung 5.73:  $\mathbf{B}(0,35\pi, \frac{\pi}{4})$

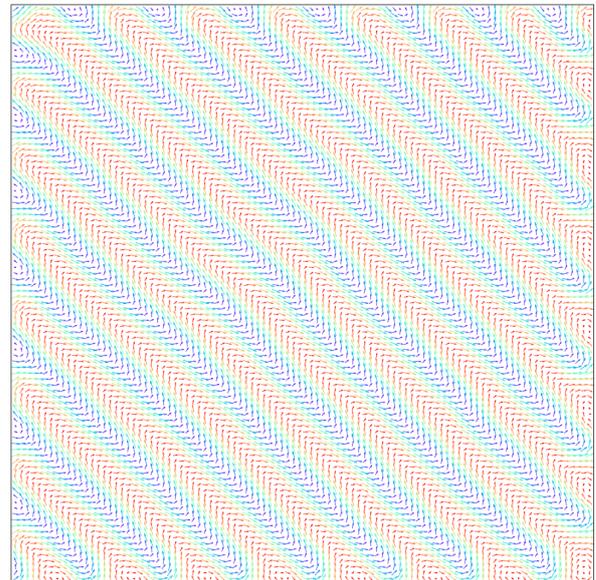


Abbildung 5.74:  $\mathbf{B}(0,40\pi, \frac{\pi}{4})$

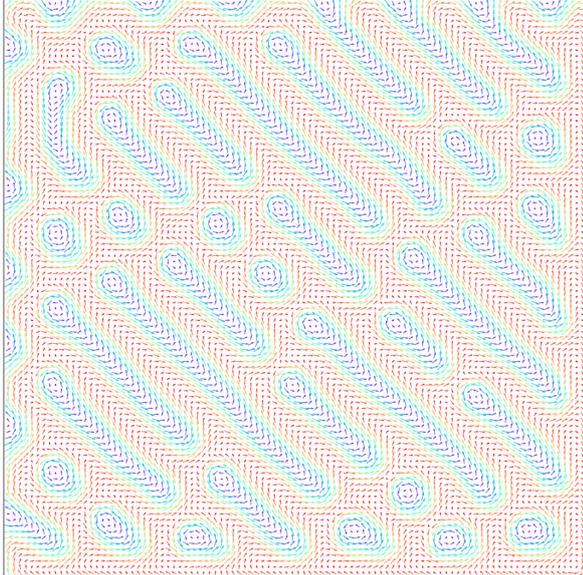


Abbildung 5.71:  $\mathbf{B}(0, 28\pi, \frac{\pi}{4})$



Abbildung 5.72:  $\mathbf{B}(0, 30\pi, \frac{\pi}{4})$

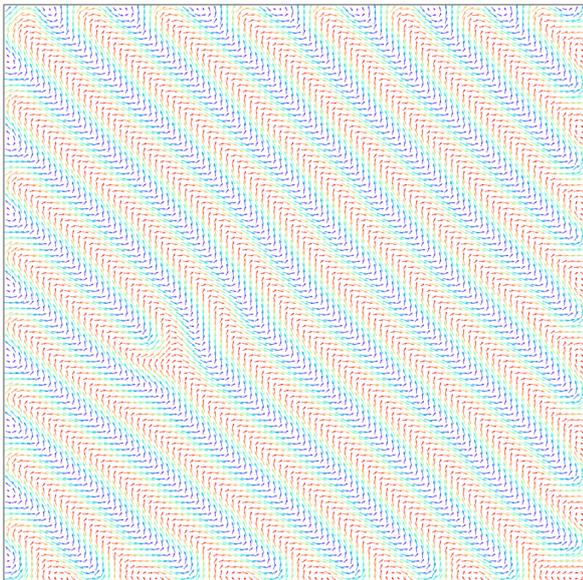


Abbildung 5.75:  $\mathbf{B}(0, 45\pi, \frac{\pi}{4})$

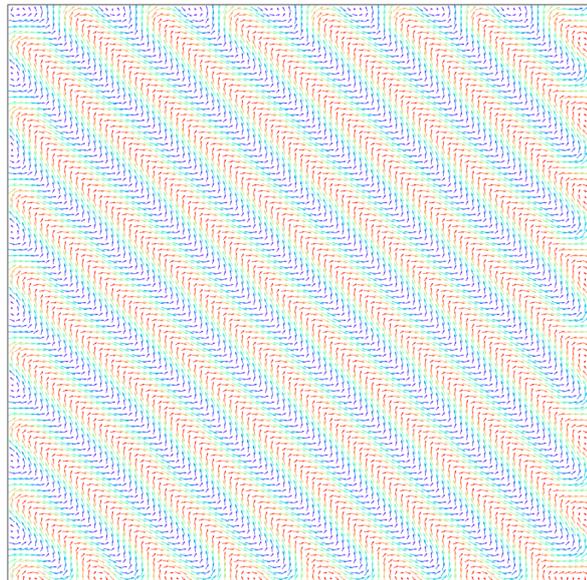


Abbildung 5.76:  $\mathbf{B}(0, 50\pi, \frac{\pi}{4})$

mit externem Magnetfeld in  $[1,0]$ -Richtung

Alle folgenden Abbildungen sind die Ergebnisse von Monte-Carlo-Simulationen mit den Parametern  $K = 0,726542528 J, B_0 = 0,2 J, \phi = 0$  und variablem Neigungswinkel  $\theta$ . Die Simulationen wurden auf Gittern der Größe  $100 \times 100$  Spins mit offenen quadratischen Randbedingungen durchgeführt. Die Temperaturverringerung ist wie in Abschnitt 4.2 beschrieben gewählt. Jede Simulation wurde mit festem Wert von  $\theta$  mit Simulated Annealing durchgeführt. Anisotropien und Magnetfeld favorisieren eine unterschiedliche Ausbreitungsrichtung der konischen Struktur.

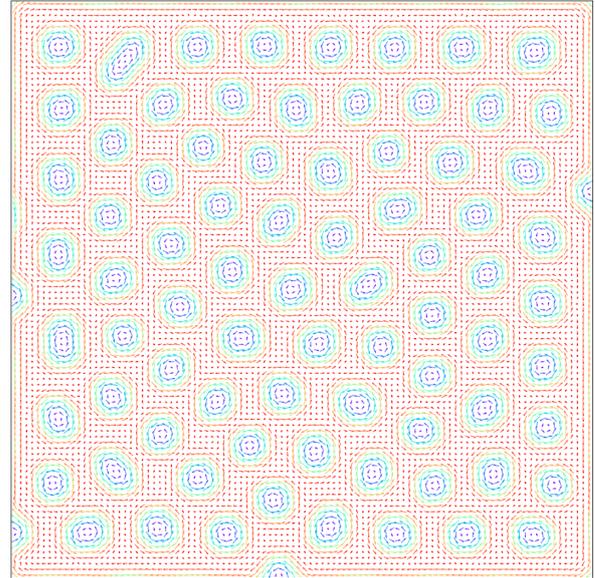


Abbildung 5.77:  $\mathbf{B}(0,0)$

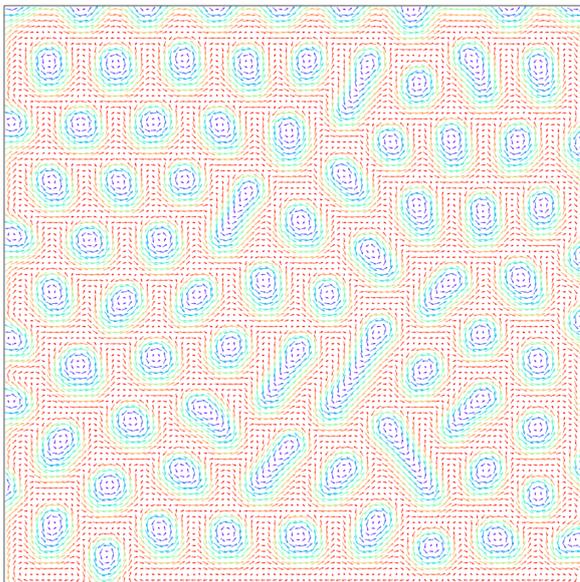


Abbildung 5.80:  $\mathbf{B}(0,25\pi, 0)$

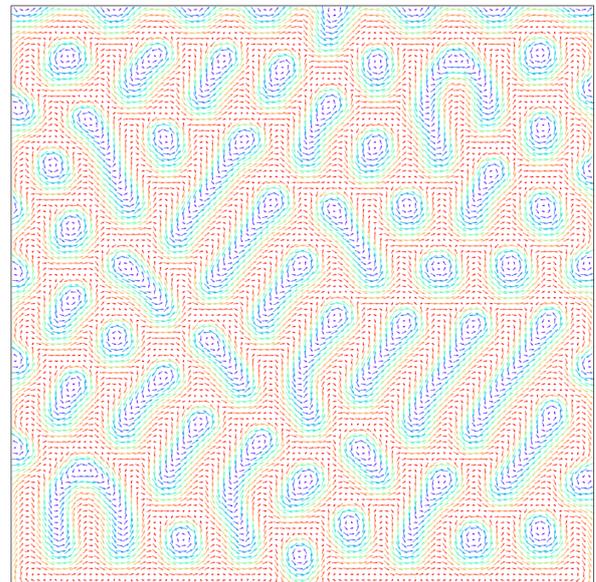


Abbildung 5.81:  $\mathbf{B}(0,30\pi, 0)$

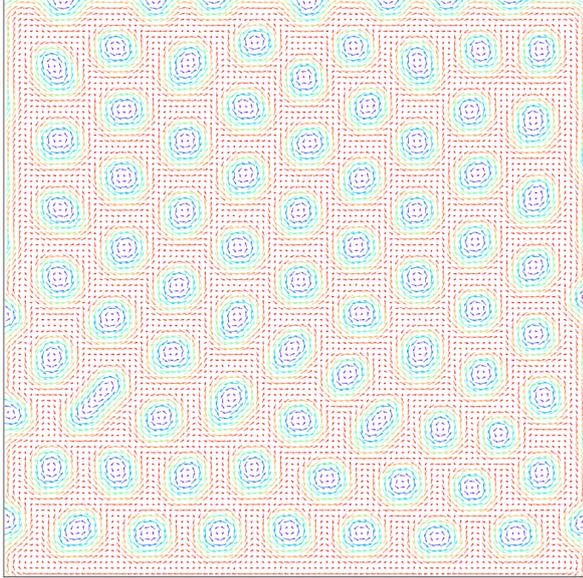


Abbildung 5.78:  $\mathbf{B}(0, 15\pi, 0)$

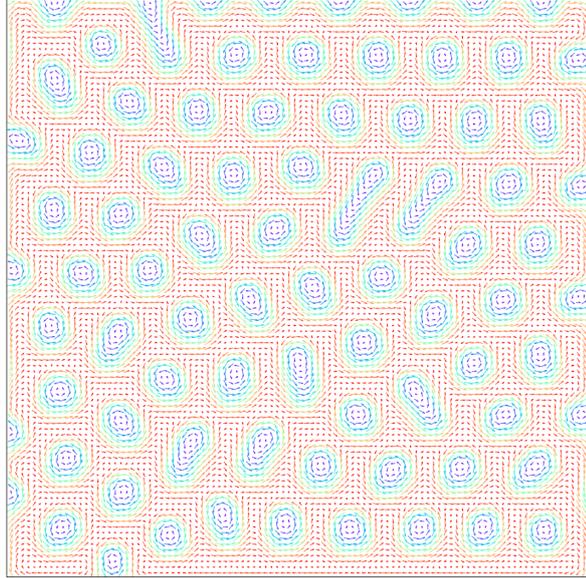


Abbildung 5.79:  $\mathbf{B}(0, 20\pi, 0)$

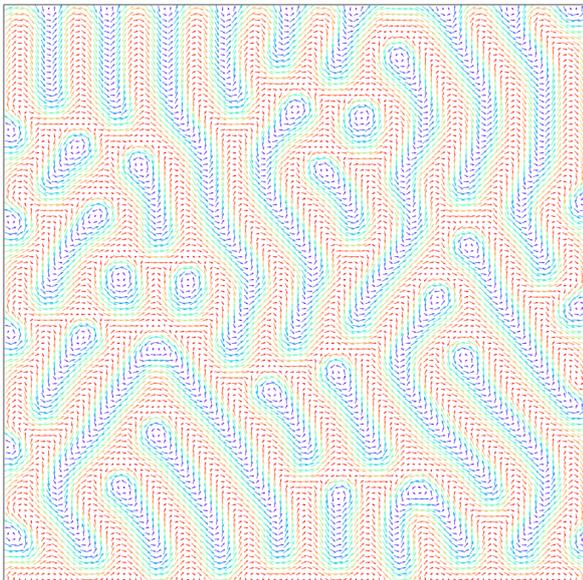


Abbildung 5.82:  $\mathbf{B}(0, 35\pi, 0)$

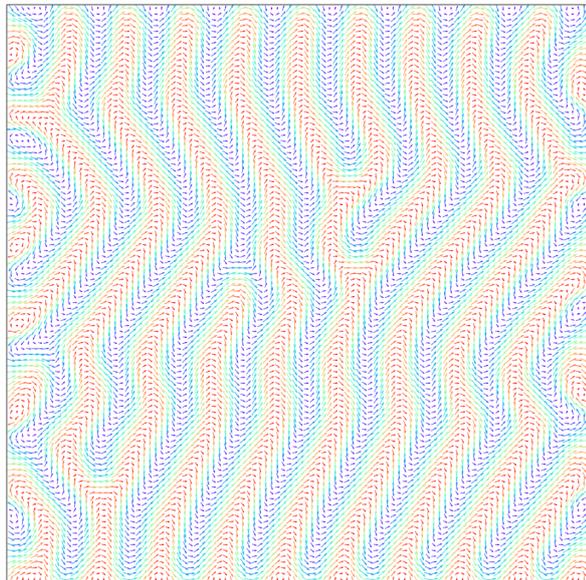


Abbildung 5.83:  $\mathbf{B}(0, 50\pi, 0)$

## Simulation der magnetischen Strukturen: offene kreisförmige Randbedingungen

mit externem Magnetfeld in  $[1,1]$ -Richtung

Alle folgenden Abbildungen sind die Ergebnisse von Monte-Carlo-Simulationen mit den Parametern  $K = 0,726542528 J, B_0 = 0,2 J, \phi = \frac{\pi}{4}$  und variablem Neigungswinkel  $\theta$ . Die Simulationen wurden auf Gittern der Größe  $100 \times 100$  Spins mit offenen kreisförmigen Randbedingungen durchgeführt. Die Temperaturverringerung ist wie in Abschnitt 4.2 beschrieben gewählt. Jede Simulation wurde mit festem Wert von  $\theta$  mit Simulated Annealing durchgeführt. Anisotropien und Magnetfeld favorisieren die selbe Ausbreitungsrichtung der konischen Struktur.

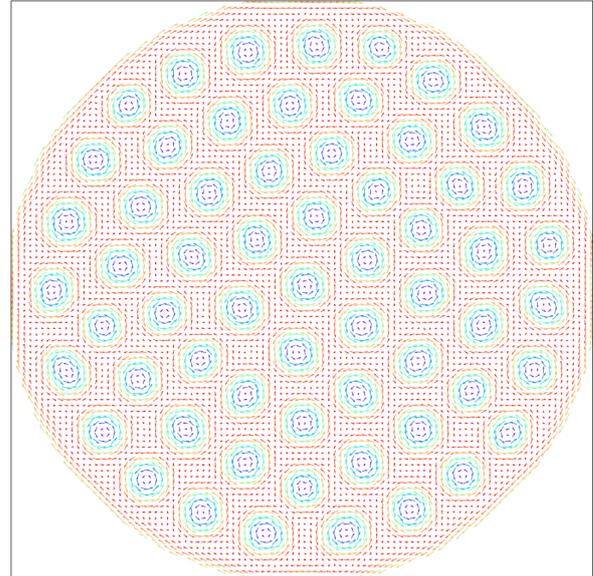


Abbildung 5.84:  $\mathbf{B}(0,00\pi, \frac{\pi}{4})$

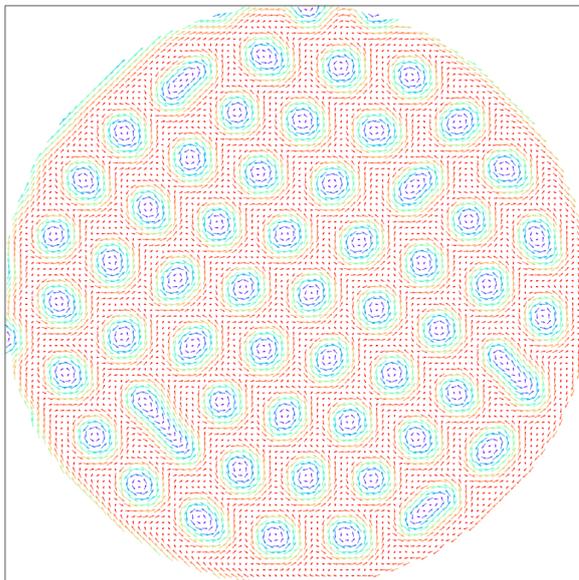


Abbildung 5.87:  $\mathbf{B}(0,15\pi, \frac{\pi}{4})$

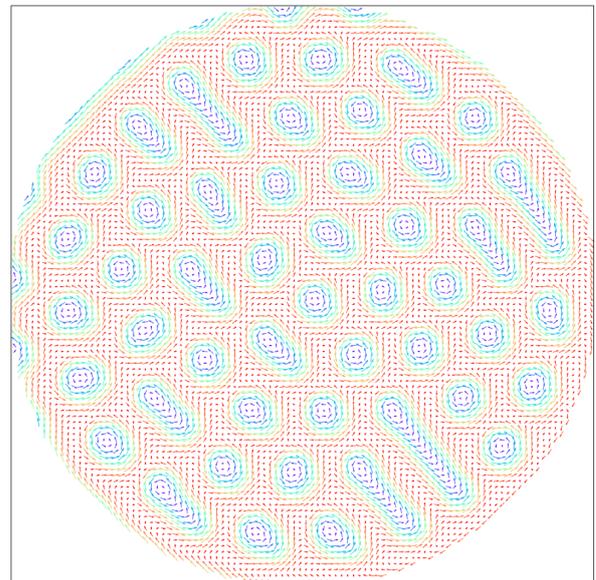


Abbildung 5.88:  $\mathbf{B}(0,20\pi, \frac{\pi}{4})$

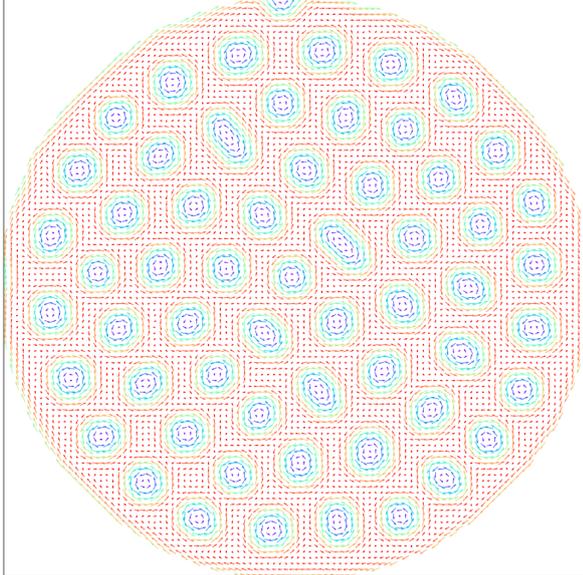


Abbildung 5.85:  $\mathbf{B}(0,05\pi, \frac{\pi}{4})$

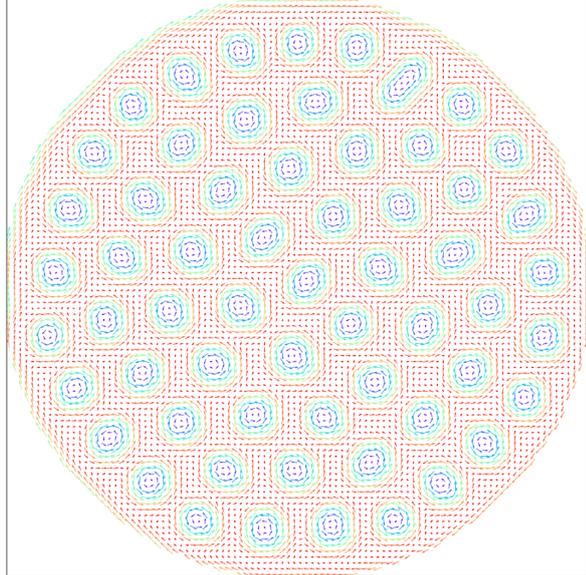


Abbildung 5.86:  $\mathbf{B}(0,10\pi, \frac{\pi}{4})$

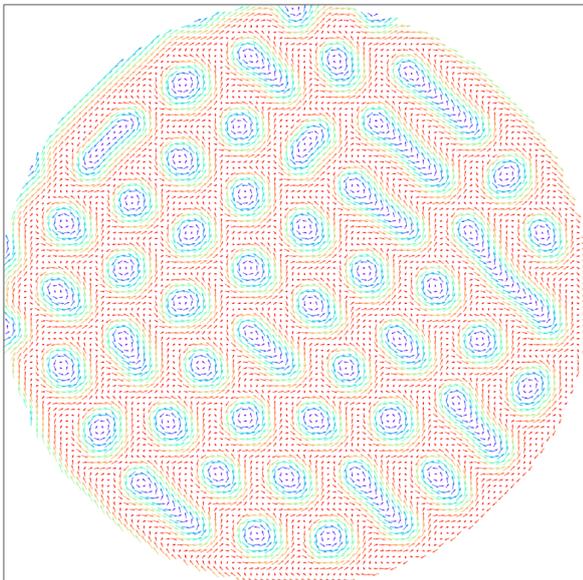


Abbildung 5.89:  $\mathbf{B}(0,22\pi, \frac{\pi}{4})$

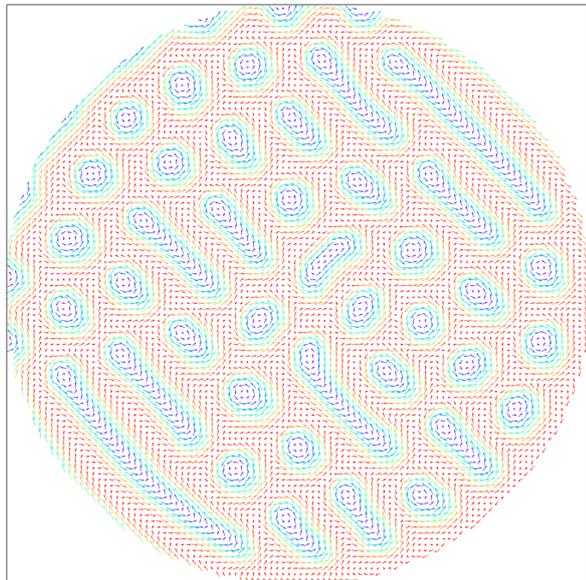


Abbildung 5.90:  $\mathbf{B}(0,24\pi, \frac{\pi}{4})$

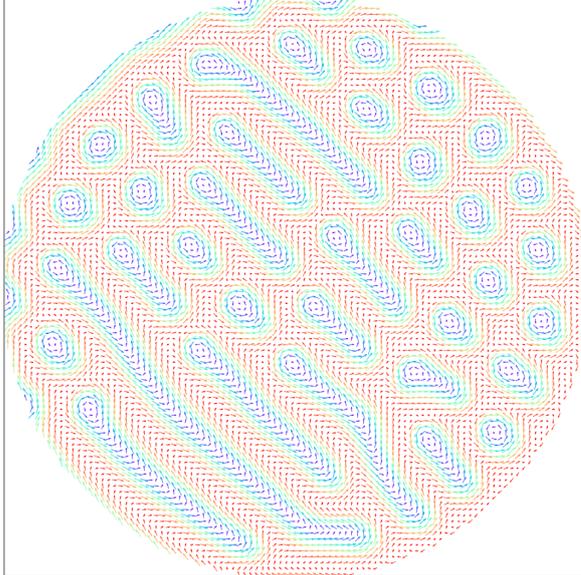


Abbildung 5.91:  $\mathbf{B}(0,25\pi, \frac{\pi}{4})$

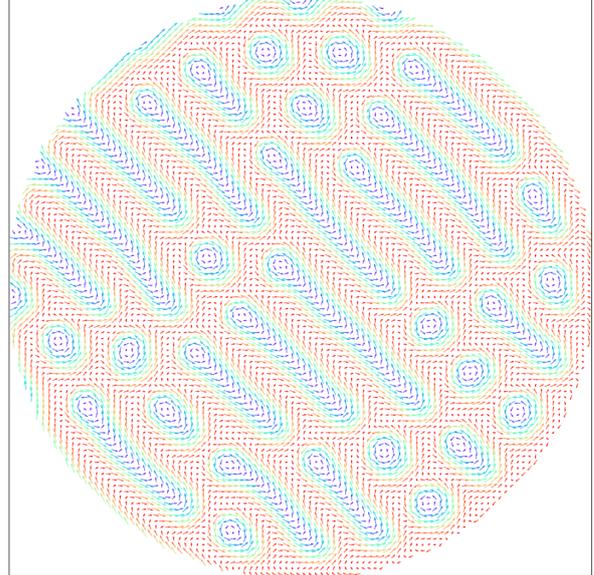


Abbildung 5.92:  $\mathbf{B}(0,26\pi, \frac{\pi}{4})$

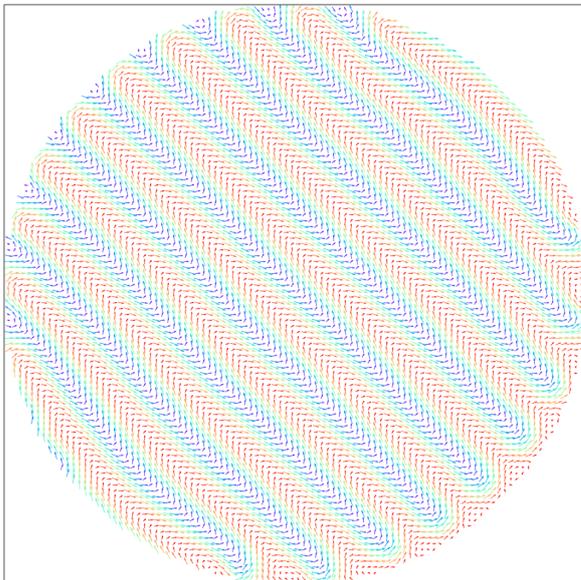


Abbildung 5.95:  $\mathbf{B}(0,35\pi, \frac{\pi}{4})$

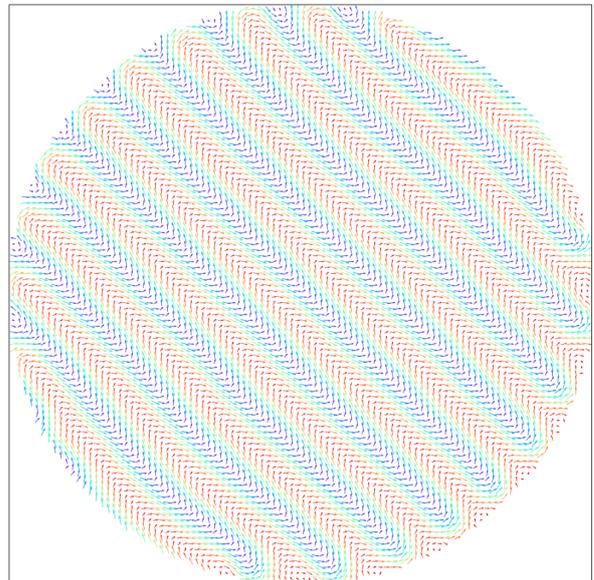


Abbildung 5.96:  $\mathbf{B}(0,40\pi, \frac{\pi}{4})$

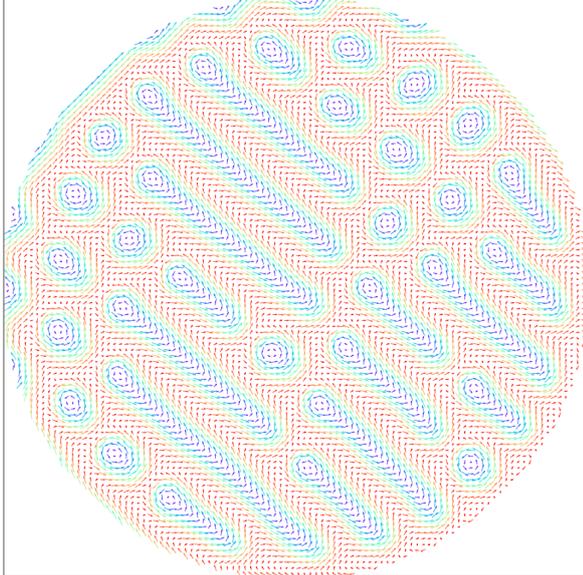


Abbildung 5.93:  $\mathbf{B}(0,28\pi, \frac{\pi}{4})$

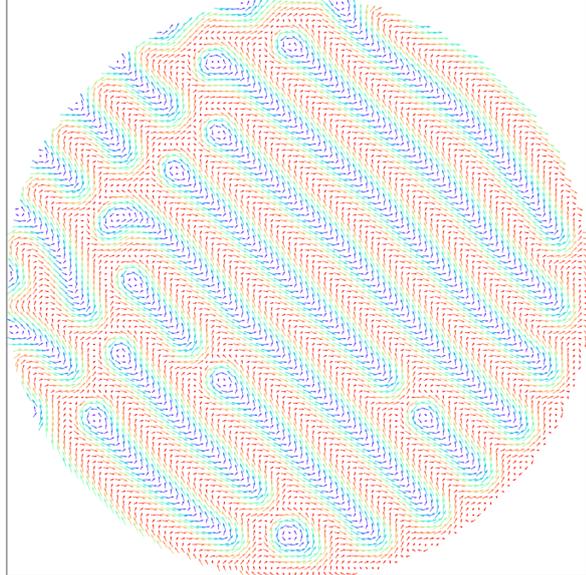


Abbildung 5.94:  $\mathbf{B}(0,30\pi, \frac{\pi}{4})$

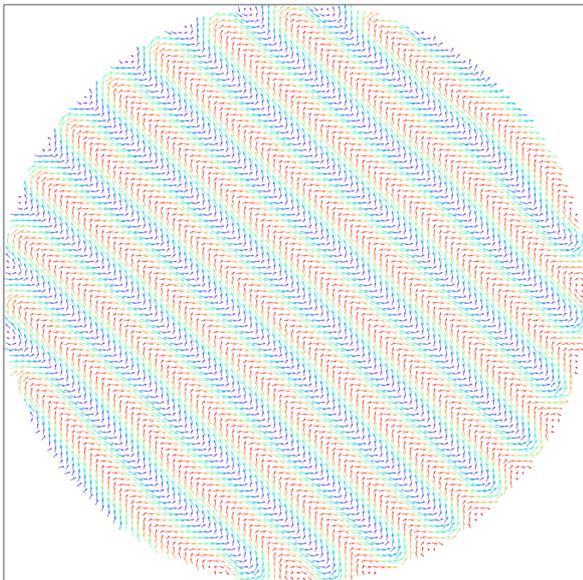


Abbildung 5.97:  $\mathbf{B}(0,45\pi, \frac{\pi}{4})$

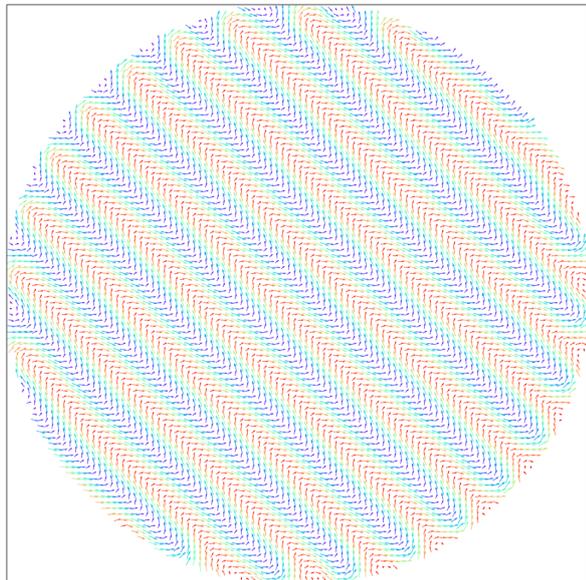


Abbildung 5.98:  $\mathbf{B}(0,50\pi, \frac{\pi}{4})$

mit externem Magnetfeld in  $[1,0]$ -Richtung

Alle folgenden Abbildungen sind die Ergebnisse von Monte-Carlo-Simulationen mit den Parametern  $K = 0,726542528 J, B_0 = 0,2 J, \phi = 0$  und variablem Neigungswinkel  $\theta$ . Die Simulationen wurden auf Gittern der Größe  $100 \times 100$  Spins mit offenen kreisförmigen Randbedingungen durchgeführt. Die Temperaturverringerung ist wie in Abschnitt 4.2 beschrieben gewählt. Jede Simulation wurde mit festem Wert von  $\theta$  mit Simulated Annealing durchgeführt. Anisotropien und Magnetfeld favorisieren eine unterschiedliche Ausbreitungsrichtung der konischen Struktur.

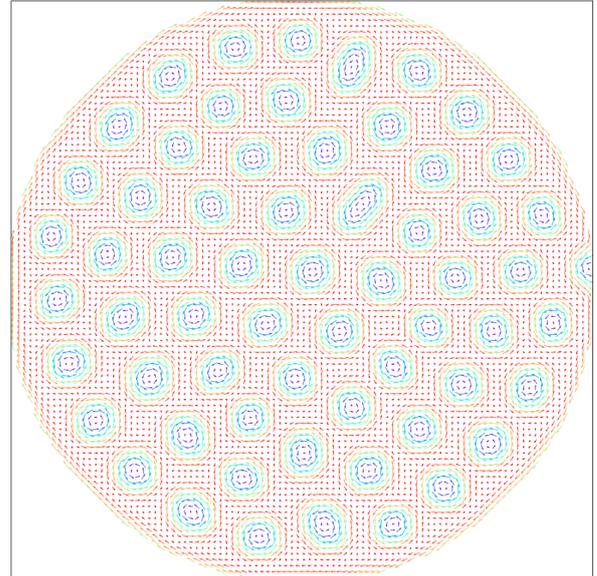


Abbildung 5.99:  $\mathbf{B}(0,0)$

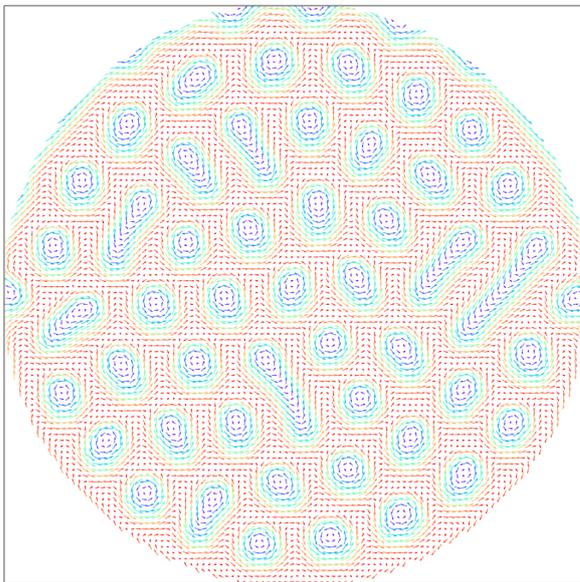


Abbildung 5.102:  $\mathbf{B}(0,25\pi,0)$

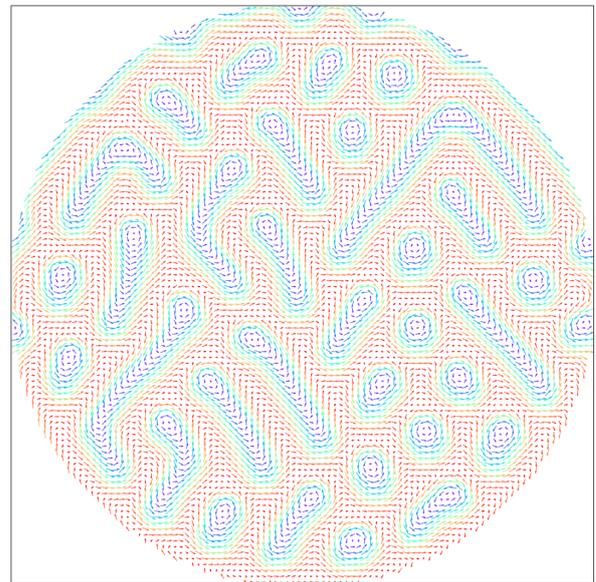


Abbildung 5.103:  $\mathbf{B}(0,30\pi,0)$

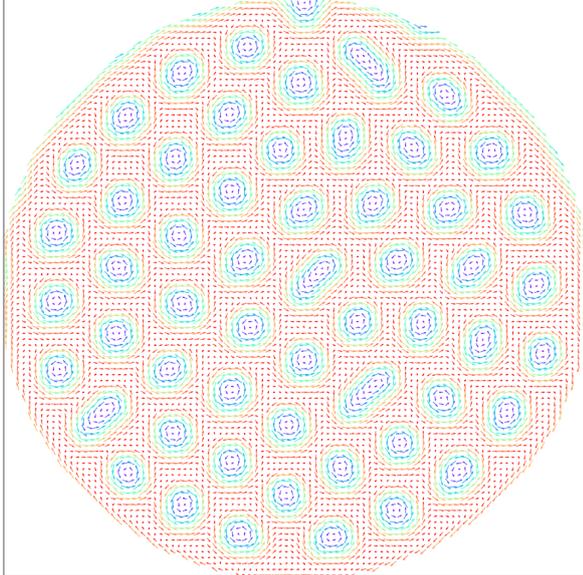


Abbildung 5.100:  $\mathbf{B}(0, 15\pi, 0)$

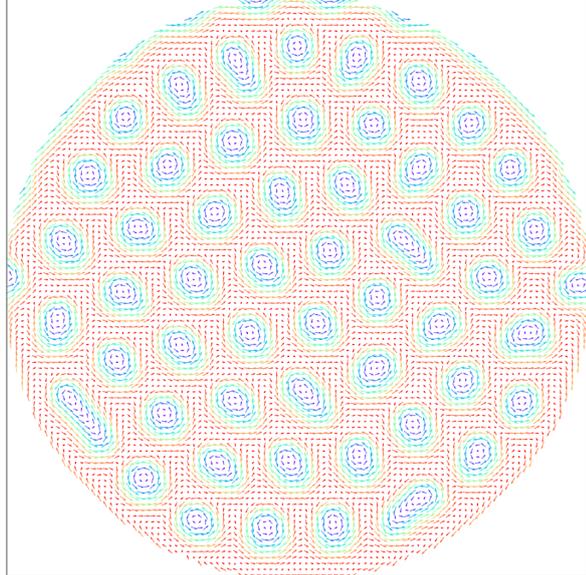


Abbildung 5.101:  $\mathbf{B}(0, 20\pi, 0)$

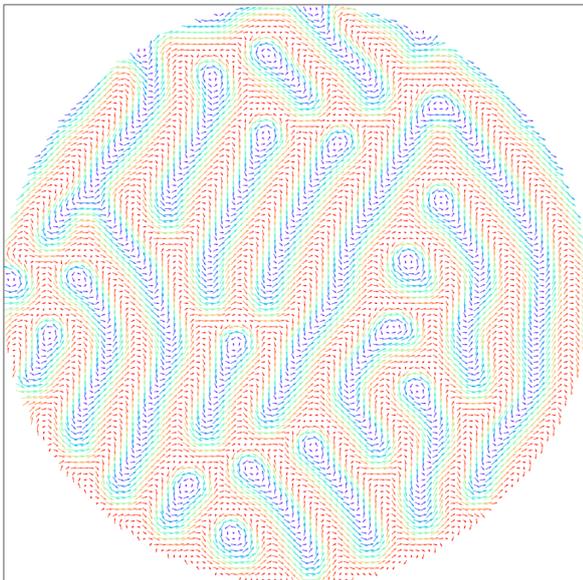


Abbildung 5.104:  $\mathbf{B}(0, 35\pi, 0)$

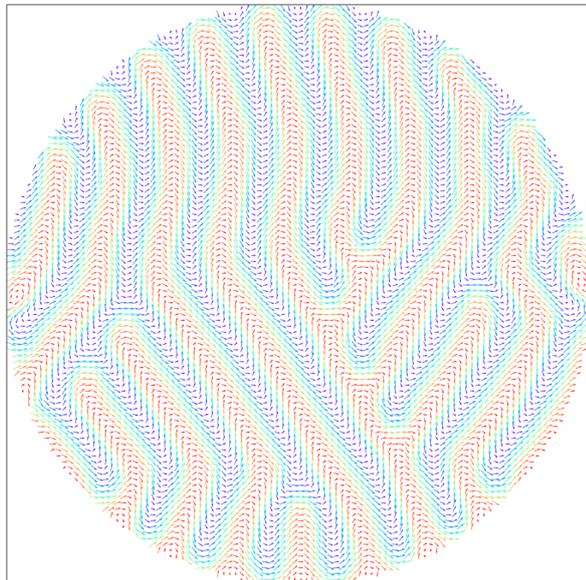


Abbildung 5.105:  $\mathbf{B}(0, 50\pi, 0)$

## Simulation der magnetischen Strukturen: offene hexagonale Randbedingungen

mit externem Magnetfeld in  $[1,0]$ -Richtung

Alle folgenden Abbildungen sind die Ergebnisse von Monte-Carlo-Simulationen mit den Parametern  $K = 0,726542528 J, B_0 = 0,2 J, \phi = 0$  und variablem Neigungswinkel  $\theta$ . Die Simulationen wurden auf Gittern der Größe  $100 \times 100$  Spins mit offenen hexagonalen Randbedingungen durchgeführt. Die Temperaturverringerung ist wie in Abschnitt 4.2 beschrieben gewählt. Jede Simulation wurde mit festem Wert von  $\theta$  mit Simulated Annealing durchgeführt. Anisotropien und Magnetfeld favorisieren eine unterschiedliche Ausbreitungsrichtung der konischen Struktur.

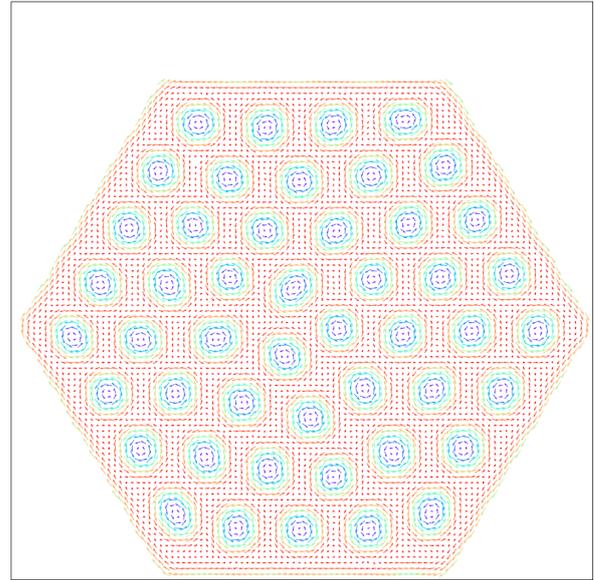


Abbildung 5.106:  $\mathbf{B}(0, \frac{\pi}{2})$

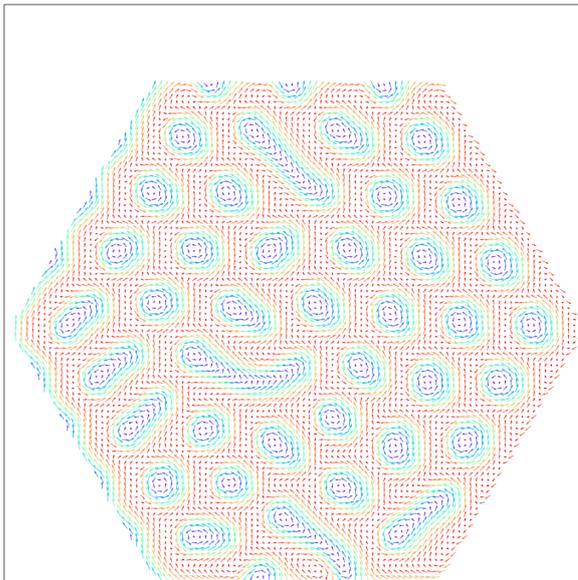


Abbildung 5.109:  $\mathbf{B}(0,25\pi, \frac{\pi}{2})$

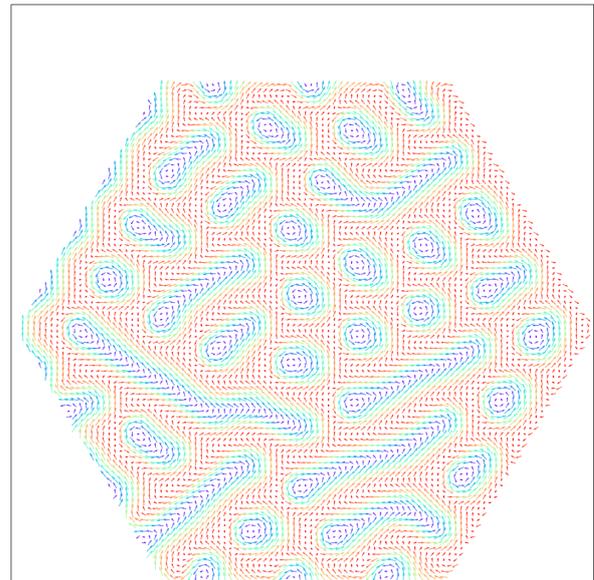


Abbildung 5.110:  $\mathbf{B}(0,30\pi, \frac{\pi}{2})$

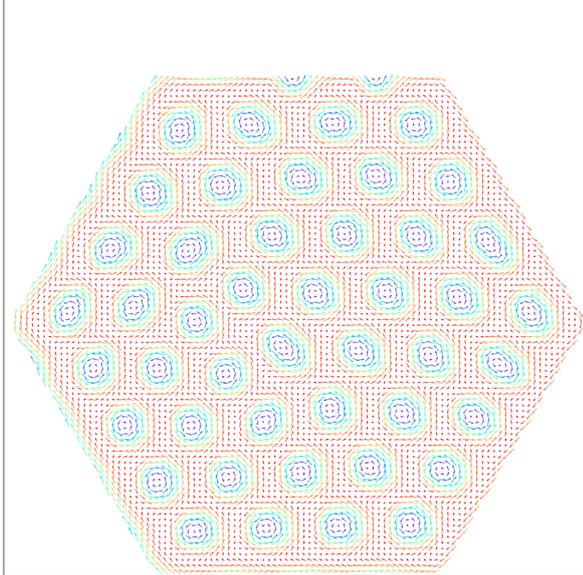


Abbildung 5.107:  $\mathbf{B}(0,15\pi, \frac{\pi}{2})$

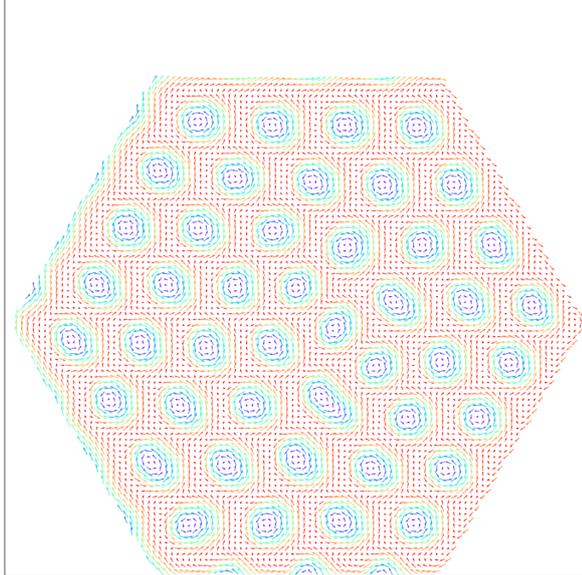


Abbildung 5.108:  $\mathbf{B}(0,20\pi, \frac{\pi}{2})$

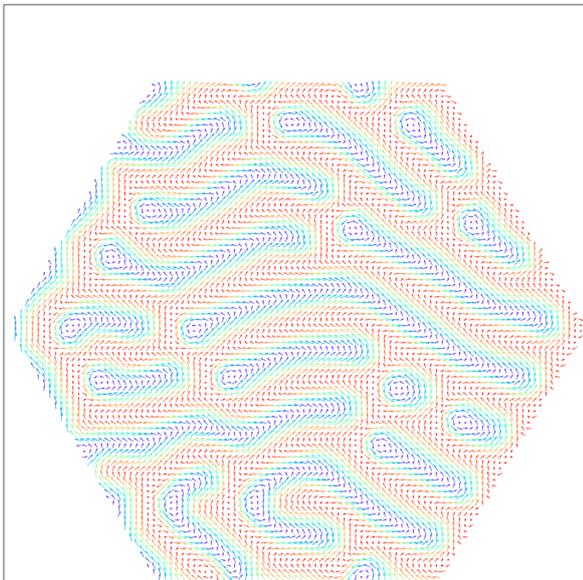


Abbildung 5.111:  $\mathbf{B}(0,35\pi, \frac{\pi}{2})$

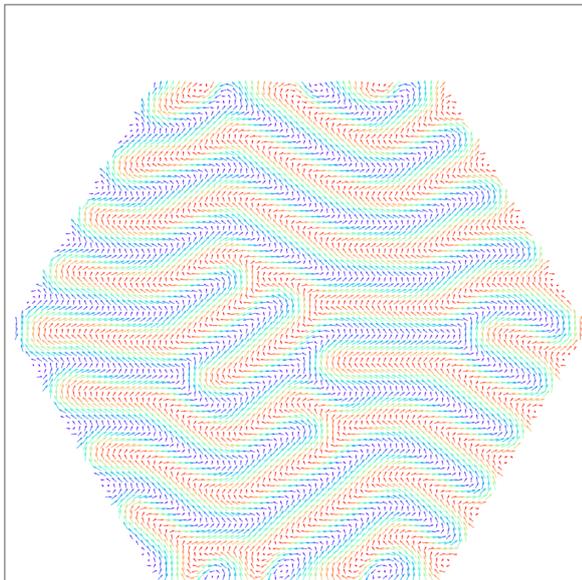


Abbildung 5.112:  $\mathbf{B}(0,50\pi, \frac{\pi}{2})$



## Danksagung

Ich möchte Prof. Dr. Achim Rosch danken für die gute Betreuung bei der Bachelorarbeit von der Auswahl des Themas hin bis zu der Fertigstellung.

Weiterhin gilt mein besonderer Dank Stefan Buhrandt, der mir jederzeit bei meinen Fragen und Problemen sowohl numerischer als auch allgemein computertechnischer Art weiter geholfen hat und ich möchte mich bei Ihm bedanken für die langen und ausführlichen Diskussionen zur Thematik, für die er trotz seiner eigenen Arbeit immer Zeit gefunden hat.

Mein Dank geht außerdem an Karin Everschor, die mich ebenfalls durch Diskussionen, Anstöße und Verbesserungsvorschläge motiviert und weitergebracht hat.

Dank auch an alle mir Nahe stehenden, die mir während der letzten Wochen viel Verständnis entgegenbringen mussten und mich durch ihre Motivation und Hilfe bei den Dingen, für die mir oft die Zeit gefehlt hat, unterstützt haben.

## Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Köln, 11. Juli 2012

.....



