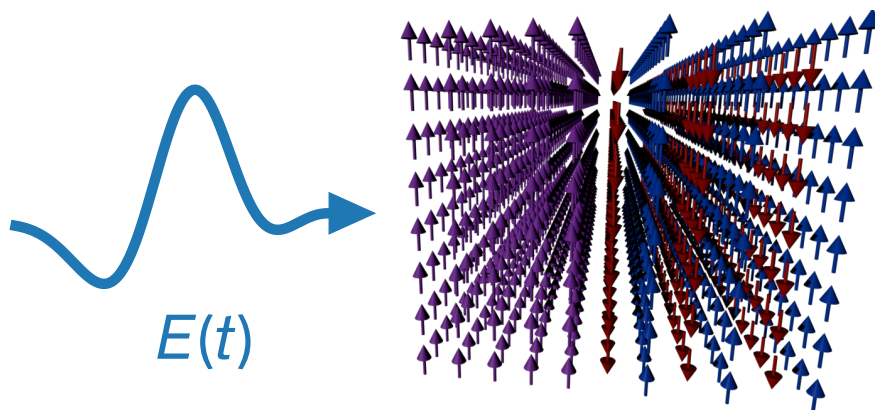


Simulation der terahertzinduzierten Spindynamik in $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ -Doppelschichten



Masterarbeit von Fynn Lasse Renner

Fynn Lasse Renner

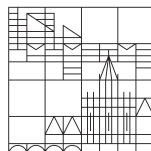
MASTERARBEIT

Fachbereich Physik, Universität Konstanz.

Simulation der terahertzinduzierten Spindynamik in Mn₂Au|Py-Doppelschichten

Masterarbeit zur Erlangung des Akademischen Grades
„Master of Science“ (M. Sc.)
im Studiengang
Physik
vorgelegt von
Fynn Lasse Renner
an der

Universität
Konstanz



Mathematisch-Naturwissenschaftliche Sektion
Fachbereich Physik

Erster Gutachter: Prof. Dr. Ulrich Nowak
Zweiter Gutachter: Dr. Davide Bossini

Konstanz, 2025

Zusammenfassung

Von der Excel-Tabelle bis zu KI-Modellen: moderne, digitale Datenverarbeitung ist in allen Bereichen unseres Lebens ein nicht mehr wegzudenkender Bestandteil. Während von den Anfängen bis heute die Verarbeitung von Informationen auf Basis der elektrischen Ladung von Elektronen den größten Anteil hat, rückt seit den 1980er Jahren die Spintronik, die Verarbeitung von Daten im Elektronenspin, in den Fokus. Wesentlich ist die Erkenntnis, dass neben Magnetfeldern auch elektrische Felder den Elektronenspin beeinflussen können. Die erzeugten Spinpolarisationen werden für spinabhängige Elektronentransporte verwendet. Mit der Entdeckung des Riesenmagnetwiderstands 1988, für welchen 2007 ein Nobelpreis vergeben wurde, kann die Magnetisierung einer nahen Schicht einfach ausgelesen werden. Nachdem sich die Spintronik über Jahre primär auf die Spin-Charakteristik des elektronischen Drehimpulses beschränkte, ist Gegenstand jüngster Forschung die Bahn-Charakteristik. In diesem, Orbitronik genannten, Forschungsfeld wurden bereits bekannte Spin-Effekte wie der (inverse) Hall-Effekt und (inverse) Rashba-Edelstein-Effekt für die Bahn-Komponente wiederentdeckt. Aus letzterem folgen die von elektrischen Feldern erzeugten (Néel-)Spin-Bahn-Drehmomente, mit denen der Ordnungsparameter von (anti)ferromagnetischen Materialien manipuliert werden kann. Verschiedene Experimente haben gezeigt, dass nur die beiden Antiferromagnete CuMnAs und Mn₂Au mit Strömen geschaltet werden können. Neuste Experimente erzeugten mit einem THz-Puls einen Schaltprozess in einer Doppelschicht aus 30 nm des Antiferromagneten Mn₂Au und 6 nm des Ferromagneten Permalloy.

In dieser Arbeit sind die Schaltprozesse durch atomistische Spindynamiksimulationen auf Basis eines Heisenberg-Modells und der Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung simuliert worden. Es werden die zeit- und magnetisierungsabhängigen Néel-Spin-Bahn-Drehmomente berücksichtigt, um die im Experiment beobachteten Vorgänge auf atomistischer Ebene nachvollziehen zu können. Hierfür wird ein ab-initio-parametrisiertes Modell für die Doppelschicht entwickelt, was das Schaltverhalten im Experiment bei einer elektrischen Feldstärke von $3,24 \text{ MV m}^{-1}$ und einer Grenzschichtkopplung von $-21,0 \text{ meV}$ reproduzieren kann. In einer schichtaufgelösten Betrachtung des Schaltprozesses entlang der z -Achse wird beobachtet, dass der kohärente Schaltprozess von reinem Mn₂Au in der Doppelschicht von einer 15 nm langen Domäne gestört wird und sich in dem Permalloy stehende Wellen bilden.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	v
Tabellenverzeichnis	vi
Quellcodeverzeichnis	vii
Abkürzungsverzeichnis	vii
1 Einleitung	1
2 Theorie der Spindynamik	5
2.1 Heisenberg-Modell	5
2.2 Landau-Lifschitz-Gleichung	6
2.3 Numerik: stochastisches Heun-Verfahren	9
2.4 Rashba-Edelstein-Effekt	11
3 Parametrisierung der Spinmodelle	17
3.1 Experimentelle Untersuchungen	18
3.2 Néel-Spin-Bahn-Momente	22
3.2.1 Bestimmung der Momente	23
3.3 Spinmodelle der Metalle	26
3.3.1 Mn_2Au	27
3.3.2 Permalloy	28
3.4 $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$ Modell	30
3.4.1 Kritische Temperatur und Gleichgewichts-Kurve	31
3.4.2 Resonanzfrequenzen und Grenzschnittkopplung	32
3.4.3 Lineare Antwort	34
4 THz-Puls induziertes Schalten	41
4.1 Reines Mn_2Au	41
4.1.1 Schichtaufgelöst	44
4.2 $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$	48
4.2.1 Dynamik der Doppelschicht	48
4.2.2 Die zwei Wege	52
4.2.3 Schichtaufgelöst	53
4.2.4 Auswirkungen eines externen Magnetfelds	56
5 Resume und Ausblick	59

Danksagung	63
Literaturverzeichnis	74
A Anhang	75
A.1 Permalloy-Modell-Transformation	75
A.2 Umrechnung der Suszeptibilitätstensoren in kartesische Koor- dinaten	76
A.2.1 Implementierung als CUDA-Kernel	78
A.2.2 <i>spinsim</i> Suszeptibilitätsmatrizen	81
A.3 CUDA: Random-Matrix-Mode	81
A.3.1 Algorithmus	83
A.3.2 Implementierung	84
A.4 Umsetzungstabelle: CUDA- <i>texture memory</i>	87
A.4.1 Implementierung	88
A.5 Lineare Antwort: Resonanzfrequenzen des Permalloy	92
A.6 Ensembles des Mn_2Au	93
A.7 Schichtaufgelöste Schaltprozesse in Mn_2Au	93
A.8 Dynamik der $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$	96
Erklärung eigenständiger Abfassung	99

Abbildungsverzeichnis

1.1	Der original Telegrafon von Valdemar Poulsen.	1
1.2	Schreibprozess einer ferromagnetischen Speicherschicht mit einem per Spule erzeugten Magnetfeld.	1
1.3	Verschiedene Formen kollinearer magnetischer Ordnung. . .	2
2.1	Einordnung der atomistischen Spindynamik in die Größenskalen.	5
2.2	Darstellung der Komponenten der Landau-Lifschitz-Gleichung. .	7
2.3	Die gebrochenen Inversionssymmetrien der Mn_2Au Struktur. .	12
2.4	Änderung der Dispersionsrelation durch den Rashba-Edelstein-Effekt.	13
2.5	Die induzierten Spin- und Bahnmomente bei einer Magnetisierung von $[110]$	16
2.6	Die induzierten Spin- und Bahnmomente bei einer Magnetisierung von $[100]$	16
3.1	Schematische Darstellung der Konfiguration des simulierten Mn_2Au	17
3.2	Schematischer Ablauf des Experiments	19
3.3	Der experimentelle Terahertzpuls.	20
3.4	Die Schaltwahrscheinlichkeit im Experiment bei verschiedenen Feldstärken über der Zeit.	21
3.5	Einheitszelle des $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$ mit magnetischen Untergittern und den herrschenden Feldern.	25
3.6	Wechselwirkungen der einzelnen Atomsorten des Permalloy (Py).	29
3.7	Detail der Kopplung an der Grenzschicht zwischen Mn_2Au und Permalloy (Py).	31
3.8	Gleichgewichtskurve der Antiferromagnet (AFM)/Ferromagnet (FM)-Doppelschicht.	32
3.9	Die longitudinale Resonanzfrequenz der M_z -Komponente des Permalloy (Py) in Abhängigkeit verschiedener Grenzschichtkopplungsstärken.	34
3.10	Die lineare Antwort des Mn in der Doppelschicht bei unterschiedlicher Spin-Bahn-Kopplung und Gilbert-Dämpfung. .	36
3.11	Die lineare Antwort der M_z -Komponente des Permalloy (Py) in der Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$ bei verschiedenen Werten von α_{Py}	38

3.12	Die Resonanzfrequenz der M_z -Komponente bei verschiedenen Grenzschnittkopplungen J_{inter}	40
4.1	Mittlerer Néelwinkel $\langle \Delta\varphi_L \rangle$ in Reaktion auf einen Terahertz-Puls (THzP) in reinem Mn_2Au	42
4.2	Übersicht über die Endzustände der Mn_2Au Simulationen bei verschiedenen Feldstärken E	42
4.3	Schaltpfade in Mn_2Au bei $T = 0$ K.	44
4.4	Schaltpfade in reinem Mn_2Au bei 9,36 ps.	45
4.5	Schichtaufgelöste Anregungen des Mn_2Au bei $0,3 E_0$	46
4.6	Die M_z -Verkantung je einer Simulation bei einer Feldstärke von $0,3 E_0$ die geschaltet ist und die nicht geschaltet ist. . .	47
4.7	Bestimmung der Grenzfeldstärke in $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$ bei 300 K. . .	49
4.8	Übersicht über die Endzustände der $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$ Simulationen bei verschiedenen Feldstärken.	50
4.9	Schaltprozesse in der Doppelschicht bei 500 K.	51
4.10	(Kein-)Schaltprozess einer $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$ -Doppelschicht	52
4.11	Übersicht über die Endzustände der $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$ -Simulationen bei verschiedenen Feldstärken und der Grenzschnittkopplung $J_{\text{inter}} = -3,8 \text{ meV}$	53
4.12	Schichtaufgelöste Anregung der Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$ bei $1,0 E_0$	54
4.13	Schichtaufgelöster Schaltprozess der Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$ bei $1,0 E_0$	55
4.14	Änderung der Schaltwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von dem externen Magnetfeld.	57
A.1	Transformation der fcc-Permalloy (Py)-Einheitszelle.	76
A.2	Schematisches Toy-Modell des Zufalls-Matrizen-Modus. . .	82
A.3	Ablaufdiagramm des Zufalls-Matrizen-Modus-Algorithmus. .	84
A.4	Schematischer Ablauf des Konvertierungsprozesses des Zufalls-Matrizen-Modus.	85
A.5	Schematische Darstellung einer Umsetzungstabelle in CUDA (<i>englisch</i> : compute unified device architecture, CUDA). .	88
A.6	Die Kurven und Fouriertransformationen zur Bestimmung der Resonanzfrequenz des Permalloy (Py).	92
A.7	Die Ensembles der Schaltprozesse bei verschiedenen Feldstärken in reinem Mn_2Au über der Zeit.	93
A.10	Schaltprozesse mit einer Grenzschnittkopplung von $J_{\text{inter}} = -3,8 \text{ meV}$	96
A.11	Bestimmung der Grenzfeldstärke in $\text{Mn}_2\text{Au} \text{Py}$	97

Tabellenverzeichnis

3.1	Konstanten der REE-Tensoren für Spin- und Bahnkomponenten im <i>cuteLLG 2.0</i> -Modell.	24
3.2	Vergleich der Wechselwirkungen in und zwischen Mn und Permalloy (Py).	35
A.1	Die (falschen) Konstanten der REE-Tensoren für Spin- und Bahnkomponenten des <i>spinsim</i>	81
A.2	Beispielhafte Nachbarschaftsliste von <i>A</i> in Abbildung A.2 (a).	82
A.3	Beispielhafte Nachbarschaftsliste von <i>A</i> in Abbildung A.2 (b).	83

Quellcodeverzeichnis

A.1	CUDA (<i>englisch</i> : compute unified device architecture, CUDA)-Kernel zur Berechnung der induzierten Momente.	78
A.2	Implementierung des Intraatomaren-Austauschs und der Spin-Bahn-Kopplung.	80
A.3	Implementierung des RMAT in <i>cuteLLG 2.0</i>	86
A.4	Implementierung der Umsetzungstabelle in CUDA	89
A.5	Aufruf der Umsetzungstabelle.	91

Abkürzungsverzeichnis

Py	Permalloy	3
AFM	Antiferromagnet	2
CPU	Prozessor (central processing unit)	26
CUDA	CUDA (compute unified device architecture)	vii
DGL	Differenzialgleichung	9
FFT	schnelle Fouriertransformation (fast fourier transformation)	39
FM	Ferromagnet	1
GPU	Grafikprozessor (graphics processing unit)	26
LLG	Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung	5
NSOT	Néel-Spin-Bahn-Drehmoment (Néel spin orbit torque)	2
REE	Rashba-Edelstein-Effekt	5
RMAT	Zufalls-Matrizen-Modus (random-matrix-mode)	vii
THzP	Terahertz-Puls	3
TMU	Textureinheit (texture mapping unit)	87

1 Einleitung

IM Jahr 1898 spannte der dänische Ingenieur Valdemar Poulsen eine Klaviersaite aus Stahl, auf welcher ein Wagen mit einem Elektromagneten befestigt war. Dieser war mit einer Batterie und einem Mikrofon verbunden, in welches er sprach und dabei den Wagen über die Saite rollen ließ. Anschließend tauschte er Batterie und Mikrofon mit einem Lautsprecher und ließ den Wagen erneut über das Kabel rollen, wobei seine Stimme erklang. Er hatte die erste Form der elektromagnetischen Datenspeicherung erfunden. Bei einer weiterentwickelten Version, dem Telegrafon, wird der Draht auf einen Zylinder gewickelt und mit einer beweglichen Nadel ausgelesen (siehe Abbildung 1.1)^[1]. Um die vorliegende Arbeit (zumindest in ihrer elektronischen Form) speichern zu können, wird eine Form der Datenspeicherung benötigt. Die für uns sichtbaren Zeichen sind in binären Zahlen kodiert. Die einzelnen Segmente dieser Daten entsprechen zwei Zuständen, häufig 0 und 1 genannt.

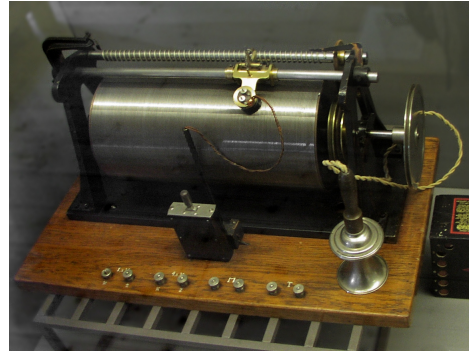


Abbildung 1.1: Der original Telegrafon von Valdemar Poulsen, wobei er den Draht auf eine Rolle aufwickelte. Foto: Wikimedia Commons contributors^[2]

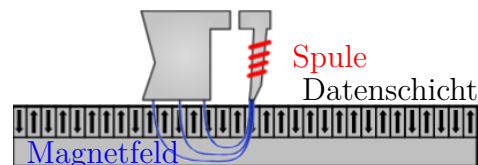


Abbildung 1.2: Schreibprozess einer ferromagnetischen Speicherschicht mit einem per Spule erzeugten Magnetfeld. Grafik: Wikimedia Commons contributors^[3]

Zur Speicherung wird ein System benötigt, das eine eindeutige Ordnung besitzt sowie beschreib- und lesbar ist. Ein Ferromagnet (FM) erfüllt diese Anforderungen, da er zwei Sättigungsmagnetisierungen $\pm M_S$ hat, die zwei unterscheidbare Zustände repräsentieren. In aktuellen Computern sind die binären Daten mittels vieler ferromagnetischer Speicherzellen in einem Festplattenlaufwerk gespeichert. Die einzelnen Zellen werden mit einer Spule in einen ihrer zwei Zustände gebracht, wobei das von der Spule erzeugte Magnetfeld größer als die Koerzitivfeldstärke des FM sein muss. Ein solcher Prozess ist in Abbildung 1.2 schematisiert, wobei z. B. $\downarrow$ den Zustand 0 und $\uparrow$ den Zustand 1 kodiert. Ausgelesen wird die Magnetisierung bzw. der Zustand mit einem Sensor basierend auf dem Riesenmagnetwiderstand^[4].

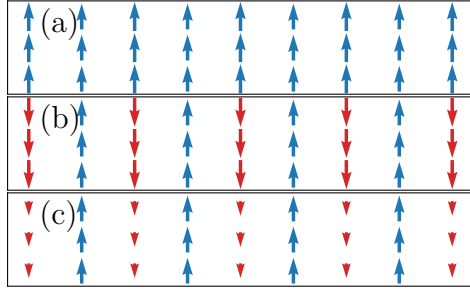


Abbildung 1.3: Drei verschiedene Formen kollinear magnetischer Ordnung: (a) FM, (b) AFM, (c) Ferrimagnetismus.

Neben den Ferromagneten (FMs) (Abbildung 1.3 (a)) gibt es weitere stabile magnetische Ordnungen, wie den Ferrimagneten* (Abbildung 1.3 (c)) und den AFMs (Abbildung 1.3 (b)). Letzterer wurde 1933 von Lew Landau entdeckt^[5] und seine magnetische Ordnung, wie auch die des Ferrimagneten, später von Louis Néel beschrieben. In kollinearen antiferromagnetischen Materialien ist nahezu keine Netto-Magnetisierung messbar, da mehrere gleiche, aber entgegengesetzt magnetisierte Untergitter

sich gegenseitig kompensieren, wie beispielhaft für zwei Untergitter in Abbildung 1.3 (b) mit den roten und blauen Untergittern dargestellt^[6,7]. Während in den altbekannten FM Magnonen im GHz-Bereich entstehen^[8], treten in AFMs Spindynamiken gewöhnlich im THz-Bereich auf. Der AFM reagiert um Größenordnungen schneller auf Änderungen^[9–11] und ist unempfindlicher gegenüber externen Magnetfeldern, so wird die Ordnung bei bis zu 30 T großen Feldern erhalten^[12].

Die antiferromagnetische Ordnung ist stabil und kann zur Datenspeicherung verwendet werden. Um Daten speichern zu können, fehlt nur noch ein Lese- und Schreibprozess. Auf Grund fehlender Netto-Magnetisierung kann der Zustand nicht mit einem Magnetfeldsensor ausgelesen werden, und das Beschreiben kann nicht einfach mit einer Spule erfolgen, da ein Zeeman-Feld (unterhalb des Spin-Flop-Felds) keine Auswirkungen auf die Ordnung hat. Somit können die Ansätze aus der ferromagnetischen Datenspeicherung nicht einfach so verwendet werden.

Eine Schlüsselentwicklung war die Entdeckung von elektrisch induzierten Néel-Spin-Bahn-Drehmomenten (*englisch*: Néel spin orbit torques, NSOTs) in einzelnen antiferromagnetischen Materialien^[13–16]. Aktuell sind nur zwei Materialien bekannt, in denen diese NSOT bei Raumtemperatur erzeugt werden können^[17]. Das giftige und thermisch instabilere CuMnAs^[18] und Mn₂Au^[19]. Letzteres ist aus eben diesen Gründen einfacher zu untersuchen. Der kollineare Antiferromagnet Mn₂Au ist mit einer extrapolierten Néel-Temperatur von etwa 1600 K thermisch stabil bei Raumtemperatur und für

*Ein AFM, der unterschiedlich starke Untergitter besitzt und deswegen eine Netto-Magnetisierung aufweist.

die Datenspeicherung geeignet^[20,21]. Durch eine uniaxiale Anisotropie gibt es vier stabile Grundzustände^[13,15,21], mit welchen Daten repräsentiert werden können.

Durch das Anlegen eines elektrischen Stroms konnte bereits der Néelvektor zwischen den Grundzuständen geschaltet werden^[15,21]. In experimentellen Untersuchungen der Arbeitsgruppe „Terahertz Physics of Quantum Materials“ unseres Kollaborationspartners Tobias Kampfrath der FU Berlin ist gezeigt worden, dass durch einen elektromagnetischen Terahertz-Puls (THzP) im Mn_2Au ein antiferromagnetisches Magnon erzeugt wird^[22]. Dieser ist durch von dem elektrischen Feld induzierte NSOT getrieben^[22] und ist so stark, dass das Mn_2Au schaltet. Der Schaltprozess entspricht einem Schreibprozess von Daten.

Damit die Daten, respektive der Zustand, ausgelesen werden können, muss die Orientierung des Néelvektors gemessen werden. Dies ist durch verschiedene Verfahren wie die Röntgenabsorptionsspektroskopie (*englisch*: x-ray absorption spectroscopy)^[23], Widerstandsmessungen^[15] und optische Sondierpulse^[22] möglich.

Wünschenswert ist eine Auslese- und Schreibmethode mit bereits etablierten Methoden. Ein Lösungsansatz von Bommanaboyena u. a.^[23] verfolgt das Erzeugen einer AFM/FM-Doppelschicht durch Aufdampfen einer dünnen Schicht Permalloy (Py) auf das Mn_2Au . Das weichmagnetische Py kann mit den klassischen Auslesemethoden von ferromagnetischen Spintronikbauteilen behandelt werden. Diese spezielle Material-Kombination bietet den Vorteil, dass sie eine vollständig unkompensierte gekoppelte Grenzschicht ausbildet. Die Kopplung führt zu einer Ausrichtung der Py-Magnetisierung parallel zum Néelvektor des Mn_2Au .

In theoretischen Untersuchungen von Hirst u. a.^[24] mit einem effektiven Nächste-Nachbarn-Modell für Mn_2Au und Py sind die NSOTs durch ein alternierendes Magnetfeld genähert worden. So wurde der Schaltprozess der Doppelschicht untersucht, insbesondere welchen Einfluss die Kopplung zwischen den beiden Materialien, die Py-Schichtdicke und die Stärke des Pulses auf das Schaltverhalten haben.

Um die in Experimenten zum Schalten einer Doppelschicht aufkommen- den Signale zuzuordnen, sind atomistische Simulationen des Schaltvorganges hilfreich. Das bereits von Selzer u. a.^[21] genutzte Modell von Mn_2Au soll hier in Verbindung mit einem detaillierteren Py-Modell von Hinzke u. a.^[25] die Grundlage bilden. Mit einer effektiven Nächste-Nachbarn-Wechselwirkung wird die Grenzschicht realisiert. Eine Schlüsselrolle spielen die NSOT, welche von der Spinausrichtung und dem elektrischen Feld abhängig sind. Die

NSOT wurden in bisherigen Simulationen statisch behandelt und durch ein alternierendes Magnetfeld angenähert^[21,24]. Diese bzw. die daraus entstehenden induzierten Momente werden in dieser Arbeit für jeden Spin einzeln berechnet.

Es wird erwartet, dass in reinem Mn_2Au die Schaltprozesse kohärent ablaufen. In der Doppelschicht werden Wellen erwartet, die mehrheitlich im Py oszillieren.

Im Folgenden wird, nach einer kurzen Einführung in die Theorie der Spindynamik und den damit verbundenen Methoden und Konzepten, ein Heisenberg-Modell der Doppelschicht entwickelt. Anschließend werden die freien Parameter an das Experiment angepasst, um die Schaltprozesse sowohl in reinem Mn_2Au wie auch in der Kombination mit Py zu untersuchen.

2 Theorie der Spindynamik

PHYSIKALISCHE Systeme können auf verschiedenen Längen- und Zeitskalen untersucht werden. Die Quantenmechanik beschäftigt sich mit den kleinsten Objekten und die Kontinuumsphysik, wie z. B. die Newtonsche Mechanik, mit makroskopischen Zusammenhängen. Die atomistischen Spindynamiksimulationen arbeiten mit Systemen in der mikroskopischen Längenskala bis in die 10 nm Größenordnung. Diese Simulationen bedienen sich der Methoden der klassischen Physik,

werden jedoch durch quantenmechanische Berechnungen parametrisiert.

Im Interesse dieser Arbeit stehen die atomistischen Spindynamiken zweier Metalle. Nach einer Vorstellung des zugrundeliegenden Heisenberg-Modells wird, ausgehend von der Quantenmechanik, die grundlegende Bewegungsgleichung magnetischer Momente hergeleitet. Diese nach ihren Entdeckern Landau und Lifschitz benannte Gleichung wird zuerst mit dem Gilbert-Dämpfungsterm und schlussendlich um die Ankopplung an ein Wärmebad zur stochastischen Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung (LLG) erweitert.

Im Weiteren wird die Entstehung der induzierten Spin $\vec{s}$ - und Bahn $\vec{l}$ -Momente aus dem Spin- und Bahn-Rashba-Edelstein-Effekt erläutert. Die bereits bekannten Formen der resultierenden induzierten Momente werden kurz vorgestellt, sie bilden die Basis für die Bestimmung der Suszeptibilitätstensoren in Abschnitt 3.2 und den daraus berechneten NSOT.

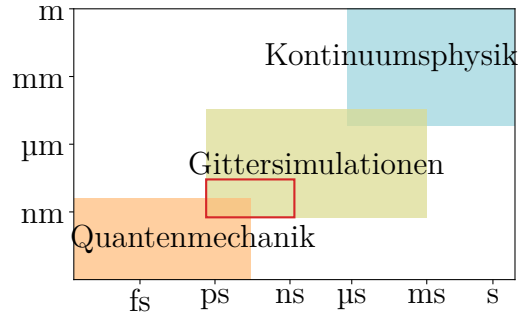


Abbildung 2.1: Schematische Einordnung in die Zeit- und Längenskalen. Der rote Bereich markiert die Skalen, in denen sich unsere Simulationen bewegen. Grafik in Anlehnung an Eriksson u. a. [26]

2.1 Heisenberg-Modell

Das Heisenberg-Modell^[27] ist der $n = 3$ -dimensionale Spezialfall des n -Vektor-Modells* und eine Möglichkeit zur Modellierung atomistischer Spinsysteme in der Festkörperphysik^[28]. Die Einheitsspins haben zwei kontinuierliche Rotations-Freiheitsgrade. Es erlaubt die Untersuchung von Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Spins in Materialien und trägt zum Verständnis von magnetischen Ordnungen, Phasenübergängen und Spinwellen bei. Das Modell

*Die anderen beiden Spezialfälle sind mit $n = 1$ das Ising- und mit $n = 2$ das XY-Modell.

ist flexibel an verschiedene Geometrien und Wechselwirkungen anpassbar, da eine mögliche Erweiterung des ursprünglichen Modells die Verwendung von tensoriellen Austauschwechselwirkungen ist. Sie können an experimentelle Daten angepasst oder durch Ab-initio-Methoden berechnet werden, in letzteren Fall basiert das Ergebnis schlussendlich konsistent auf theoretischen Überlegungen. Ein Vergleich mit dem Experiment ist dann auf Augenhöhe möglich und nicht durch Anpassungsprozesse an Messdaten beeinflusst. Der Haken des Modells: durch die begrenzte Rechenleistung können Systeme nur auf der nm-Skala simuliert werden, was etwa 10^7 Spins entspricht^[29].

Um die thermischen Gleichgewichtseigenschaften im kanonischen Ensemble zu studieren, muss die Zustandssumme

$$Z = \text{Tr} \left[\exp \left(-\frac{\mathcal{H}}{k_B T} \right) \right] = \sum_n \exp \left(-\frac{E_n}{k_B T} \right) \quad (2.1)$$

berechnet werden, was dem Lösen eines hochdimensionalen Integrals entspricht. Während Lösungsansätze wie die Molekularfeld (*englisch*: mean-field)-Näherung^[30] oder numerische Integration mit Monte-Carlo-Methoden die Gleichgewichtseigenschaften darstellen können, sind die Nicht-Gleichgewichtsdynamiken nicht von ihnen bestimmbar^[26,29].

2.2 Landau-Lifschitz-Gleichung

Die Bewegung eines einzelnen Spins $\vec{s}_i$ (Index i ist der i -te Spin des Heisenberg-Modells) ist für atomistische Spindynamiksimulationen offensichtlich von grundlegender Bedeutung. Quantenmechanisch wird die zeitliche Entwicklung eines System durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben. Im Übergang in ein klassisches System wird aus der quantenmechanischen Beschreibung die Landau-Lifschitz-Gleichung gewonnen, welche in dieser Arbeit zur Berechnung der Bewegung der Spins in einem Heisenberg-Modell verwendet wird.

Für die zeitliche Entwicklung des Spin-Erwartungswerts in der Quantenmechanik gilt nach dem Ehrenfest-Theorem

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{s}_i \rangle = \left\langle \left[\hat{s}_i(t), \hat{\mathcal{H}}(t) \right] \right\rangle, \quad (2.2)$$

wobei $\hat{s}_i$ dem Spin-Operator und $\hat{\mathcal{H}}$ dem Hamilton-Operator des Systems

2.2 LANDAU-LIFSCHITZ-GLEICHUNG

bezeichnen^[31]. Der Kommutator kann erweitert werden zu

$$[\hat{s}(t), \hat{\mathcal{H}}(t)] = i\hbar \left[\hat{s}(t) \times \frac{\partial}{\partial \hat{s}} \right] \hat{\mathcal{H}}(\hat{s}(t)) + \mathcal{O}(\hbar^2), \quad (2.3)$$

wobei hier die Relation $[\hat{s}_i(t), \hat{s}_j(t)] = i\hbar \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \hat{s}_k(t)$ verwendet wurde. Durch Einsetzen von Gleichung 2.3 in Gleichung 2.2 ergibt sich die quantenmechanische Zeitentwicklung für den Spinerwartungswert

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{s}(t) \rangle = i\hbar \left\langle \left(\hat{s}(t) \times \frac{\partial}{\partial \hat{s}} \right) \hat{\mathcal{H}}(\hat{s}(t)) \right\rangle + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad (2.4)$$

und durch den Übergang $\hbar \rightarrow 0$ eine Bewegungsgleichung für den klassischen Spin $\vec{s}$, die die Wechselwirkungen aus dem Hamiltonian enthält. Hierbei gehen die Erwartungswerte in die klassischen Größen über ($\hat{s} \rightarrow \vec{s}$, $\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \mathcal{H}$):

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{s}(t) = \vec{s} \times \frac{\partial}{\partial \vec{s}} \mathcal{H}(\vec{s}). \quad (2.5)$$

Das magnetische Moment ist mit den Spins über die Beziehung $|\vec{s}| = \mu_s/\gamma$ verknüpft. Im Heisenberg-Modell werden normierte Spins $\vec{S}$ verwendet, es folgt ein Vorfaktor von $-\gamma/\mu_s$ vor dem Kreuzprodukt. Aus dieser Bewegungsgleichung

$$\frac{\partial \vec{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{\mu_s} (\vec{S}_i \times \vec{h}_i), \quad (2.6)$$

mit dem effektiven Feld $\vec{h}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_i}$, auch Larmor-Gleichung genannt, ergibt sich eine Präzession wie bei den Euler-Gleichungen der klassischen Mechanik, siehe Abbildung 2.2.

Um Dissipationsprozesse wie die Magnon-Phonon-Interaktionen zu beschreiben, fügten Landau und Lifschitz 1935 einen Dämpfungsterm auf Basis der rayleighschen Dissipationsfunktion mit einem Parameter α_{LL}

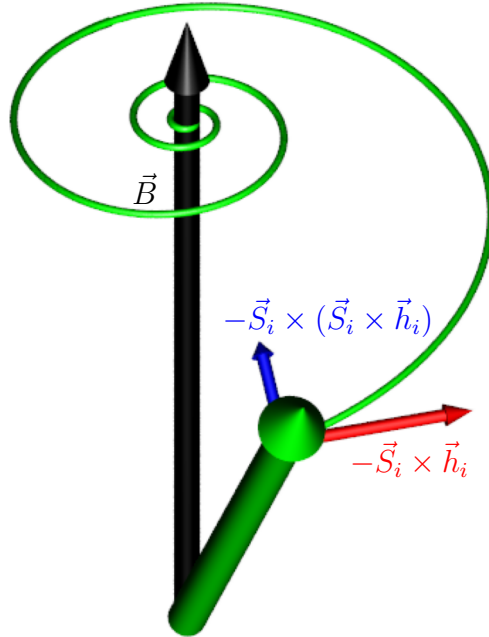


Abbildung 2.2: Die Präzessions- und Relaxations-Anteile der Landau-Lifshitz-Gleichung eines Spins, welcher um ein externes Magnetfeld $\vec{B}$ rotiert.

2 THEORIE DER SPINDYNAMIK

hinzu^[32]

$$\frac{\partial \vec{S}_i}{\partial t} = -\frac{\gamma}{\mu_s} (\vec{S}_i \times \vec{h}_i) - \frac{\alpha_{LL}}{\mu_s} \vec{S}_i \times (\vec{S}_i \times \vec{h}_i). \quad (2.7)$$

Für ein $\mathcal{H} = -\mu_B \vec{S}_i \vec{B}$ mit $\vec{B} = B\vec{e}_z$ ergibt sich für einen einzelnen Spin die in Abbildung 2.2 gezeigte Bewegung. Der erste Term führt zu einer Präzessionsbewegung mit der Lamor-Frequenz $\omega = \gamma B$ und wird Feld-Term genannt. Der zweite Term führt zu einer Relaxation des Spins parallel zu $\vec{B}$ und heißt Dämpfungsterm. Der Dämpfungsterm wurde zuerst phänomenologisch eingeführt, jedoch später in unterschiedlichen Arbeiten hergeleitet^[33].

Im Jahr 1955 ersetzte Gilbert den Dämpfungsterm in Gleichung 2.7 mit einem auf Basis des Lagrange-Formalismus hergeleiteten Terms^[34]. Die so umgeschriebene Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{S}_i(t) = -\frac{\gamma}{(1 + \alpha^2)\mu_s} \vec{S}_i \times (\vec{h}_i + \alpha(\vec{S}_i \times \vec{h}_i)) \quad (2.8)$$

mit dem effektiven Feld $\vec{h}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_i}$ ist als Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung bekannt. Die Lamor-Frequenz ändert sich^[29], wegen des Einflusses der Dämpfung, zu

$$\omega = \frac{\gamma B}{1 + \alpha^2}. \quad (2.9)$$

Um die Kopplung an das Wärmebad im Sinne der Langevin-Dynamik zu realisieren, wird dem effektiven Feld ein Rauschterm $\vec{\eta}_i(t)$ hinzugefügt

$$\vec{h}_i \rightarrow \vec{h}_i + \vec{\eta}_i(t). \quad (2.10)$$

Hierbei muss das Rauschen die beiden Bedingungen*

$$\langle \vec{\eta}_i(t) \rangle = \vec{0} \quad (2.11)$$

$$(2.12)$$

und

$$\langle \eta_i^\nu(t) \eta_j^\vartheta(t') \rangle = \frac{2\alpha\mu_s}{\gamma} k_B T \delta_{i,j} \delta_{\nu,\vartheta} \delta(t - t') \quad (2.13)$$

*Ein solches Rauschen wird weißes Rauschen genannt.

2.3 NUMERIK: STOCHASTISCHES HEUN-VERFAHREN

erfüllen. Sie beschreiben die Gleichverteilung der Momente, Gleichung 2.11, und Breite der Streuung der Momente, Gleichung 2.13, wobei die hochgestellten Indizes den Komponenten entsprechen ($\nu, \vartheta \in \{x, y, z\}$). Das Rauschen kann gaußverteilt* sein und darf weder in den Ortskomponenten, noch zwischen den Spins, noch in der Zeit korreliert sein. Die so modifizierte Gleichung ist die stochastische-LLG^[38].

2.3 Numerik: stochastisches Heun-Verfahren

In der modernen Wissenschaft und Technik sind numerische Methoden zur Lösung komplexer mathematischer Probleme nicht mehr wegzudenken. Die verschiedenen Verfahren werden in allen Disziplinen, angefangen von den Naturwissenschaften bis hin zu den Geisteswissenschaften, angewendet. Insbesondere die numerische Lösung von Differenzialgleichungen (DGLs), die häufig in der Modellierung dynamischer Systeme auftreten, wird erst durch präzise und effektive Algorithmen möglich, da hier analytische Verfahren schnell an ihre Grenzen stoßen.

Die Entwicklung dieser numerischen Verfahren ist seit Jahrhunderten Gegenstand intensiver Forschung, so fand bereits Leonhard Euler im Jahr 1768 das *explizite Euler-Verfahren*^[39]. Er entwickelte die zu lösende Funktion

$$\dot{x}(t) = f(x, t) \quad (2.14)$$

in einer Taylorreihe und fand mit der Startzeit t_0 und der Schrittweite h das rekursive Schema

$$x(t_0 + h) = x(t_0) + \underbrace{\dot{x}(t_0)}_{f(x, t)} h + \mathcal{O}(h^2). \quad (2.15)$$

Wird die Zeit nun diskretisiert $t_n = t_0 + nh$ mit $n \in \mathbb{N}$ ergibt sich das einfachste Verfahren zur (näherungsweisen) Lösung einer DGL erster Ordnung[†].

Während deterministische Verfahren, wie das klassische Runge-Kutta-Verfahren, eine zentrale Rolle bei der Lösung gewöhnlicher DGLs spielen, können sie nicht ohne Weiteres zufällige Einflüsse oder Unsicherheiten abbilden. Sie rechnen, physikalisch gesehen, im mikrokanonischen Ensemble (sofern die Teilchenzahl erhalten ist). Im Fall der Ankoppelung an ein Wärmebad begeben

*Auch Lévy^[35]-, Poisson^[36]- und uniforme^[37] Verteilungen können die Bedingungen erfüllen.

[†]Da der Fehler eines Einzelschritts offenbar $\propto h^2$ ist, folgt für den Gesamtfehler eines Zeitintervalls $T = nh : \mathcal{O}(\text{Euler}) \propto h^2 \frac{T}{h} \propto h$.

wir uns in das kanonische Ensemble. Dies ist in vielen realitätsnahen Prozessen der Fall, ein einfaches Beispiel ist die ungesteuerte Bewegung eines Teilchens in einer Flüssigkeit: die Brownsche Molekularbewegung^[40,41]. Mit dieser sind Aktienkurse^[42] oder die Klimaentwicklung^[43] modellierbar. Die Prozesse lassen sich durch stochastische DGLs beschreiben.

Um solche Gleichungen zu lösen sind spezialisierte Verfahren erforderlich. Diese können neben dem deterministischen Anteil der Dynamik die stochastische Natur berücksichtigen, dieser Anteil wird meist durch einen Wiener-Prozess modelliert, der einer Langevin-Dynamik folgt^[29]. Das einfachste dieser Verfahren ist das stochastische Heun-Verfahren, ein Algorithmus zweiter Ordnung, welcher als Erweiterung der deterministischen Heun-Methode auf den stochastischen Kontext betrachtet werden kann. Diese verwenden wir zur Integration der stochastischen LLG.

Eine allgemeine Form einer stochastischen Differentialgleichung erster Ordnung und multiplikativem Rauschen mit einer Anfangsbedingung ist gegeben durch

$$\dot{x} = f(x(t), t) + g(x(t), t) \eta(t), \quad x(t_0) = x_0. \quad (2.16)$$

Der erste Summand entspricht dem deterministischen und der zweite Summand dem stochastischen Anteil mit dem Rauschen η . Die stochastische Variable ist nicht Lebesgue-integrierbar und zudem nicht kontinuierlich, was zu zwei verschiedenen Lösungsansätzen mit unterschiedlichen Ergebnissen führt. Im Euler-Maruyama-Verfahren, Gleichung 2.18, wird das Rauschen ausschließlich am Anfang eines jeden diskreten Zeitintervalls ausgewertet, während im Heun-Verfahren, Gleichung 2.19, beide Intervallgrenzen einbezogen werden. Dieser Unterschied von beiden Lösungen ist bekannt als Itô-Stratonowitsch-Dilemma^[44]. Durch die unterschiedliche Zeitquantifizierung konvergieren sie zu verschiedenen Lösungen^[45]. In der atomistischen Spindynamik führt die Stratonowitsch Interpretation, wie auch in den meisten anderen Anwendungen, zur richtigen Beschreibung physikalischer Prozesse^[26,29,45,46].

Um numerisch nach der Heun-Methode zu integrieren, wird die Zeitvariable in diskrete Werte zerlegt, $t_n = nh$, und ebenso $x_n = x(t_n)$. Zuerst wird Gleichung 2.16 im Intervall $[t, t + h]$ integriert. Dies führt zu

$$\int_t^{t+h} \frac{dx}{dt'} dt' = x(t+h) - x(t) = \int_t^{t+h} f(x(t'), t') + g(x(t'), t') \eta(t') dt'. \quad (2.17)$$

2.4 RASHBA-EDELSTEIN-EFFEKT

Mit der Euler-Methode werden beide Integrale berechnet, womit

$$x^{(0)}(t_{n+1}) = x(t_n) + hf(x(t_n), t_n) + g(x(t_n), t_n) \underbrace{\Delta\omega(t_n)}_{=\int_t^{t+h} \eta(t') dt' \stackrel{\text{Euler}}{\approx} h\eta(t_n)} \quad (2.18)$$

folgt, was als *Euler-Maruyama-Methode*^{*} bezeichnet wird. Der so berechnete Wert heißt im Rahmen der Heun-Methode *Prädiktor*-Wert. Für den ersten Korrektor $x^{(1)}(t_n)$ ist die Stützstelle der Funktionsmittelwert der beiden Integralgrenzen.

$$x^{(1)}(t_{n+1}) = x(t_n) + \frac{1}{2} \left(f(x(t_n), t_n) + f(x^{(0)}(t_{n+1}), t_{n+1}) \right) h + \frac{1}{2} \left(g(x(t_n), t_n) + g(x^{(0)}(t_{n+1}), t_{n+1}) \right) \Delta\omega(t_n) \quad (2.19)$$

Um diese Methode auf die LLG anzuwenden, lässt sich x durch die einzelnen kartesischen Komponenten von $\vec{S}_i$ ersetzen^[29].

Damit die Langevin-Dynamik der stochastischen LLG zu befolgt wird, muss das Rauschen die Bedingungen aus Gleichung 2.11 und Gleichung 2.13 erfüllen. In dieser Arbeit wird es durch gaußverteilte Pseudozufallszahlen $p(\zeta) = \exp(-\zeta^2/2\sigma)$ mit der Breite $\sigma = \frac{2\alpha\mu_s}{\gamma} k_B T h$ erzeugt^[29]. Sie heißen Pseudozufallszahlen, da sie über einen deterministischen Algorithmus berechnet werden. Dieser wird mit einem Startwert (*englisch* seed) initialisiert, aus welchem er die erzeugte Zahlenfolge kalkuliert. Bei gleichem Startwert folgt immer die gleiche Zahlenfolge, was die Reproduzierbarkeit von Simulationen erlaubt^[47]. Bei einer Temperatur von 0 K entspricht die Lösung dem deterministischen Anteil.

In dieser Arbeit ist $h = 10^{-16}$ ps.

2.4 Rashba-Edelstein-Effekt

Der Rashba-Edelstein-Effekt (REE) wurde von Edelstein^[48] im Jahr 1990 vorhergesagt und beschreibt das Erzeugen eines Spinstroms aus einem elektrischen Strom. Erstmals wurde er 2013 von Sánchez u. a.^[49] in einer Bi|Ag-Doppelschicht experimentell beobachtet. Grund für diese Konversion ist die Spin-Bahn-Kopplung des elektronischen Drehimpulses[†], welche in Materialien

^{*}Anwenden dieser Rekursionsformel führt zur Itô-Interpretation.

[†]Auch über den mechanischen Drehimpuls können Informationen übertragen werden. Dies erfolgt über chirale Phononen, deren Erzeugung, Transport und Aufzeichnung Gegenstand aktueller Forschung sind. Motiviert wurde dies durch die Untersuchung von

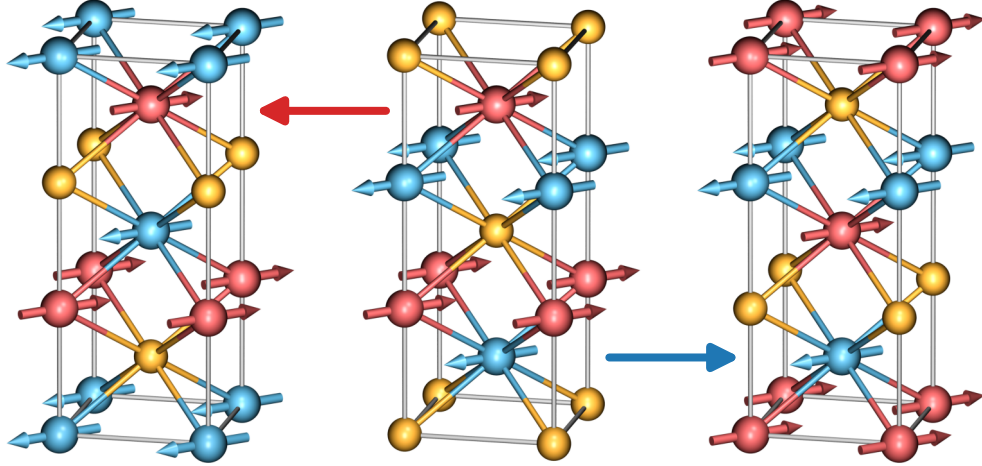


Abbildung 2.3: Darstellung der Mn_2Au Struktur, die beiden magnetischen Untergitter des $\text{Mn}_{\text{A/B}}$ sind in rot/blau dargestellt. In der Mitte die reguläre Einheitszelle, links bei Inversion um das blaue Atom und rechts bei Inversion um das rote Atom. Die Struktur bleibt jeweils gleich, nur die $\text{Mn}_{\text{A/B}}$ tauschen ihre Plätze. Grafik in Anlehnung an Železný u. a.^[51]

ohne „up-down“-Symmetrie entsteht. Für den Effekt ist eine gebrochene lokale Inversionssymmetrie nötig, die zu einer Spinpolarisation führt. Insgesamt gibt es 21 Punktgruppen, die diese Eigenschaft erfüllen^[51]. Die einzigen beiden bekannten Antiferromagneten mit diesen Eigenschaften sind das giftige CuMnAs ^[14] und das Mn_2Au ^[13,52].

Während bereits in Experimenten basierend auf den NSOT die AFMs CuMnAs und Mn_2Au mit Strömen geschaltet werden konnten^[14–16,52,53], sind die atomistischen Dynamiken nicht vollständig geklärt. Zum Schalten eines AFM müssen die induzierten Momente ein alternierendes Feld erzeugen, welches auf den Untergittern eines kollinearen AFM ein wechselndes Vorzeichen aufweist^{[13]*}.

Allgemein hat das Mn_2Au eine globale Inversionssymmetrie gegenüber dem Goldatom, wie in Abbildung 2.3 gezeigt, sofern ausschließlich die Atomsorten

Tauchert u.a.^[50] (siehe auch die Pressemitteilung der Universität Konstanz vom 31.03.2025)

*Allgemeiner: ein magnetisches Feld, welches die gleiche Symmetrie wie die magnetische Ordnung hat. Diese Felder heißen Néel-Ordnungs-Felder^[13].

2.4 RASHBA-EDELSTEIN-EFFEKT

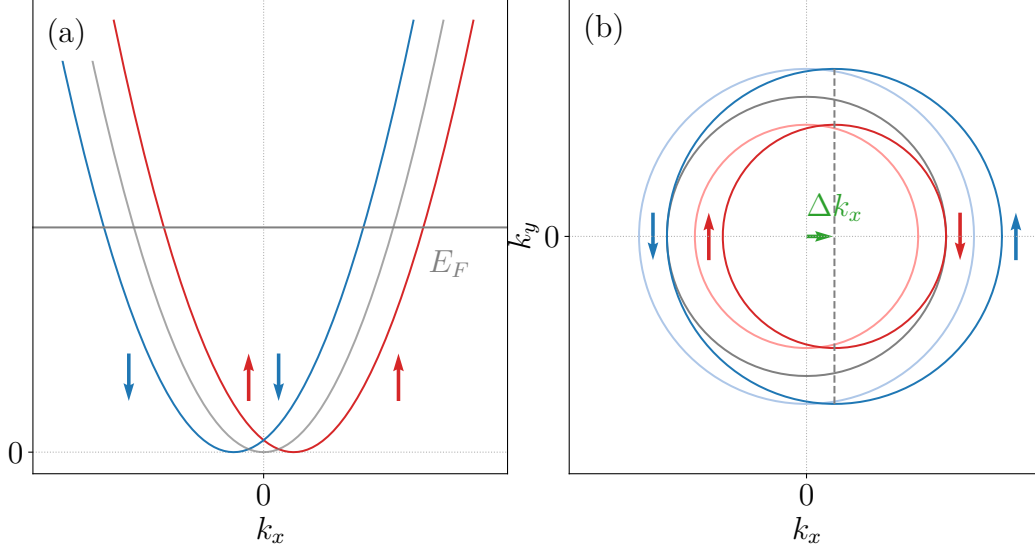


Abbildung 2.4: (a): Aufspaltung der Dispersionsrelation in Spin-↑ und Spin-↓ mit eingezeichneter Fermigrenze E_F und regulärer Dispersionsrelation (grau). (b): Fermifläche bei Anlegen eines Stroms, der zur Verschiebung Δk_x führt. Grafik in Anlehnung an Sánchez u. a. ^[49] und Nechaev u. a. ^[55]

betrachtet werden. Werden die beiden Mn Untergitter differenziert, bilden sie ihre gegenseitigen Inversionspartner^[13,17,51,54].

Es folgt der Rashba-Hamiltonian

$$H_{SOC} = \alpha_R(\vec{p} \times \hat{z}) \cdot \vec{S} \quad (2.20)$$

mit dem Elektronenimpuls $\vec{p}$, der Flächennormalen $\hat{z}$ auf der x - y -Fläche (bezüglich der die Inversionssymmetrie gebrochen ist) und dem materialabhängigen Rashba-Koeffizienten α_R ^[49]. Dieser führt zu einer Aufspaltung der Dispersionsrelation. Wird ein Strom j_x angelegt, was zu einer Verschiebung Δk_x führt, entsteht automatisch eine endliche Spinakkumulation, wie in Abbildung 2.4 zu sehen ist. Die Spin- und (auf gleichem Prinzip basierende) Bahn polarisation entspricht einem induzierten magnetischen Moment, welches die Stärke und Richtung der Polarisierungen angibt.

Anfangs wurde angenommen, der REE und die daraus folgenden induzierten Momente würden ausschließlich zu einer Spinpolarisation führen. Salemi u. a. ^[17] zeigten jedoch, dass auch eine Bahn polarisation erfolgt, die bei der anregenden Frequenz $\omega = 0$ etwa zwölfmal stärker ist als die des Spins. Zur

2 THEORIE DER SPINDYNAMIK

Berechnung der induzierten magnetischen Polarisation $\delta\vec{M} = \mu_B \delta(\vec{L} + 2\vec{S})$ mit den Beiträgen aus Bahn $\vec{L}$ und Spin $\vec{S}$ Komponenten als Reaktion auf das zeitabhängige elektrische Feld $\vec{E}$ wird $\delta\vec{M}$ in die Frequenzdomäne transformiert:

$$\delta M_i(\omega) = \sum_j \left[\chi_{ij}^L(\omega) + 2\chi_{ij}^S(\omega) \right] E_j(\omega) \quad (2.21)$$

Es müssen die REE-Suszeptibilitätstensoren $\chi^{S,L}$ berechnet werden, die von der Ausrichtung des zugehörigen Spins abhängig sind^[17]. Von Salemi u. a. wurden $\chi^{S,L}$ für Magnetisierungen der Untergitter in [110]- und [100]-Richtung aus der linearen Antwortfunktion berechnet. Die jeweils um 180° inversen Magnetisierungen sind punktsymmetrisch. Die Ab-initio-Rechnungen haben einen freien Parameter*, die elektronische Lebensdauer τ der Elektronenzustände, welche durch Elektron-Elektron-Stöße oder Phonon- und Defektstreuung abnehmen^[21]. In Anlehnung an Selzer^[57] wird in dieser Arbeit eine Lebensdauer von 100 fs verwendet. Je länger τ ist, desto stärker werden die induzierten Momente^[57]. Diese Daten bilden die Grundlage für die in dieser Arbeit verwendeten induzierten Momente. Aus den $\chi^{S,L}$ werden die induzierten Momente $\vec{s}_i$ (Spin) und $\vec{l}_i$ (Bahn)

$$\vec{s}_i = \chi^S(\vec{S}_i) \cdot \vec{E} \quad \text{und} \quad \vec{l}_i = \chi^L(\vec{S}_i) \cdot \vec{E} \quad (2.22)$$

berechnet.

Für ein konstantes elektrisches Feld $\vec{E}$ mit einer Stärke von 10^7 V m^{-1} und einer Magnetisierung der Spins bzw. der Untergitter (anti)parallel zur [110]- und [100]-Achse sind die erzeugten induzierten Momente in Abbildungen 2.5 und 2.6 abgebildet. Die Bahnkomponenten zeigen eine alternierende Symmetrie[†] bezüglich der Spinausrichtungen $\vec{S}$ (blass dargestellte Pfeile in der Mitte der Abbildungen). Sie stehen stets senkrecht zu $\vec{E}$. Die Spinmomente

*Ein eigentlich widersprüchlicher Satz, siehe: „Ab-initio-Methoden, aus der Quantenchemie stammender Begriff [...], während man in der Festkörpertheorie meistens den Begriff First-Principles-Methoden benutzt. Allgemein kann man als ab-initio-Methoden alle Verfahren der Elektronentheorie von Atomen, Molekülen und Festkörpern bezeichnen, die keine an die experimentellen Daten angepaßten Parameter verwenden. In diesem Sinn parameterfrei sind alle Methoden, bei denen entweder (im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung) alle Ein- und Zweielektronenintegrale explizit berechnet werden oder (im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie) theoretisch begründete Austauschkorrelationsfunktionale verwendet werden. Das Attribut ‚ab initio‘ (lat: von Anfang an) ist daher nicht so zu verstehen, daß solche Methoden frei von Näherungen sind. [...]“^[56]

[†]D. h. sie entsprechen je einem Néel-Ordnungs-Feld des Mn_2Au .

2.4 RASHBA-EDELSTEIN-EFFEKT

zeigen, je nach Winkel zwischen $\vec{E}$ und $\vec{S}$, eine komplexere Abhängigkeit in Amplitude und Richtung. Ist $\vec{E} \perp \vec{S}$ zeigen sie in die selbe Richtung wie ihre Bahn-Partner, bei $\vec{E} \parallel \vec{S}$ sind sie antiparallel.

Die induzierten Bahnmomente erzeugen wegen ihrer Symmetrie ein Verkanten der beiden Untergittermagnetisierungen, was in einer Netto-Magnetisierung im AFM resultiert. Bei einem $\vec{E}$ in $[110]$ hat das blaue Untergitter in Abbildung 2.5 ein induziertes Bahnmoment in $[1\bar{1}0]$, ebenso das in $[\bar{1}\bar{1}0]$ ausgerichtete rote Untergitter. Die schwächeren induzierten Spinmomente weisen eine umgekehrte Symmetrie auf und zeigen in $[\bar{1}10]$. Insgesamt dominieren die induzierten Bahnmomente und führen aufgrund des Austauschs zwischen den Untergittern zu einem starken, nicht alternierenden Drehmoment bzw. effektiven Austauschfeld, um welches die Untergitter anschließend präzedieren. Der Dämpfungsterm der Gleichung 2.8 sorgt für die Neuausrichtung entlang des Austauschfelds. Dieses Austauschfeld ist die Erklärung für die kurze Dauer der Schaltprozesse von nur wenigen Pikosekunden und die allgemeine ultraschnelle Dynamik der AFM^[9–11,21].

Wie Ross u. a.^[58] zeigten, kann ebenfalls durch optisch induzierte Drehmomente ein Néel-Ordnungs-Feld erzeugt werden, mit dem eine Manipulation von $\vec{L}$ möglich ist. Sie haben, ebenfalls per Computersimulation, die Auswirkungen eines gaußförmigen Laserpuls auf den Ordnungsparameter in Mn_2Au untersucht. Im Gegensatz zu den niedrigeren Frequenzen eines THzP weist der optische Puls höhere Frequenzen auf und regt deswegen keine NSOT an. Andererseits erzeugt der THzP vermutlich auch laserinduzierte Drehmomente^[58,59], die aber in dieser Arbeit nicht beachtet werden.

Im Fokus der aktuellen Forschung von Behovits und Kampfrath^[60] steht das Schalten mittels eines elektromagnetischen THzP. Hier werden die NSOT durch das sich schnell ändernde elektrische Feld des Lasers erzeugt. Um diese Schaltprozesse zu simulieren, müssen die $\vec{s}_i$ und $\vec{l}_i$ in Abhängigkeit von dem normierten Spin $\vec{S}_i$ und dem elektrischen Feld für jeden Zeitschritt neu berechnet werden. Eine einfache Näherung durch ein statisches externes Magnetfeld, wie sie in Selzer u. a.^[21] verwendet wurde, ist nicht mehr angemessen.

Zur Berechnung der induzierten Momente müssen die REE-Tensoren $\chi^{S,L}(\vec{S}_i)$ für die Spin- und Bahnkomponente zu jedem Zeitschritt neu berechnet werden. Das erfolgt aus den von Salemi u. a.^[17] mittels linearer Antwortfunktion bestimmten $\chi_{abinito}^{S,L}([1,0,0]^T)$ (siehe Abbildung 2.6) und $\chi_{abinito}^{S,L}([1,1,0]^T)$ (siehe Abbildung 2.5).

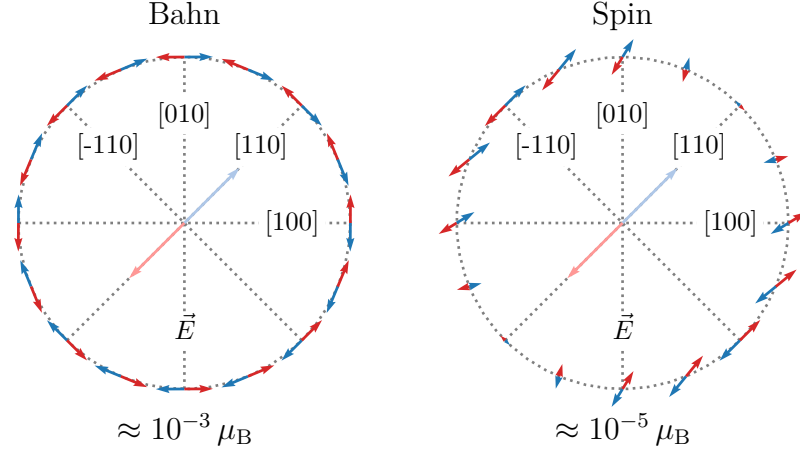


Abbildung 2.5: Die untergitterabhängigen (blau/rot) induzierten Momente in Abhängigkeit von der Richtung von $\vec{E}$ (graue Linien). Die Stärke von $\vec{E}$ entspricht 10^7 V m^{-1} . Die beiden Spins sind in $[110]$ bzw. $[\bar{1}\bar{1}0]$ ausgerichtet (blasse Pfeile). Die orbitalen Momente sind etwa zwei Größenordnungen stärker als die Spin-Momente und stehen immer senkrecht zu $\vec{E}$. Grafik in Anlehnung an Selzer u. a. ^[21]

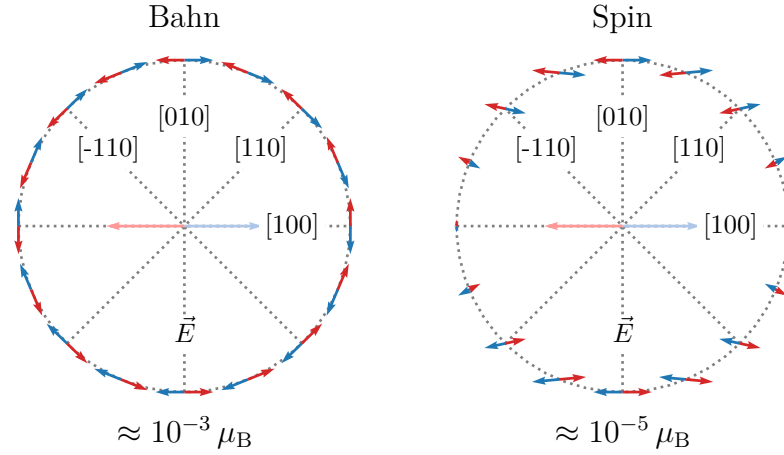


Abbildung 2.6: Gleiche Farben und Bedeutungen wie bei Abbildung 2.5. Die beiden Spins sind in $[100]$ bzw. $[\bar{1}00]$ ausgerichtet (blasse Pfeile). Wie zu sehen ist, sind die Momente um -45° gegenüber der Magnetisierung in $[110]$ bzw. $[\bar{1}\bar{1}0]$ verdreht. Grafik in Anlehnung an Selzer u. a. ^[21]

3 Parametrisierung der Spinmodelle

Ein Schaltprozess muss zunächst definiert werden, bevor seine Eigenschaften untersucht werden können. Unter Schalten wird die Rotation des Néelvektors (antiferromagnetischer Ordnungsparameter) $\vec{L}$ in der x - y -Ebene in einen neuen, stabilen Zustand verstanden. Die möglichen Endzustände sind in Mn_2Au durch zwei leichte Anisotropieachsen vierter Ordnung bestimmt und in Abbildung 3.1 schematisch mit dem aus der Anisotropie resultierenden Potential veranschaulicht. Diese Zustände befinden sich in den Richtungen $[110]$, $[\bar{1}10]$, $[1\bar{1}0]$ und $[\bar{1}\bar{1}0]$, wobei der Initialzustand der hier vorgestellten Simulationen in der Richtung $[1\bar{1}0]$ liegt. Das Ziel ist ein Schalten um $\pm 90^\circ$ in einen der beiden angrenzenden Zustände $[110]$ bzw. $[\bar{1}\bar{1}0]$, wie in Abbildung 3.1 abgebildet.

In Mn_2Au wird $\vec{L}$ aus der Differenz der beiden Untergittermagnetisierungen $\vec{M}_{A/B}$ gebildet. Als anschaulich interpretierbarer Parameter ist der relative Polarwinkel von $\vec{L} = \frac{1}{2} (\vec{M}_A - \vec{M}_B)$ als

$$\Delta\varphi_L = \angle[L_x, L_y, 0] - \angle[1\bar{1}0] \quad (3.1)$$

definiert, wodurch die Winkeländerung zum Initialzustand erfasst wird. Ein Schaltvorgang von $[1\bar{1}0]$ zu $[\bar{1}\bar{1}0]$ entspricht einem $\Delta\varphi_L$ von -90° , wie in Abbildung 3.1 veranschaulicht. Analog zu φ_L wird φ_M bzw. $\Delta\varphi_M$ als Winkel bzw. Winkeländerung der Magnetisierung $\vec{M}$ definiert. Während in reinem Mn_2Au diese nur durch ein Verkanten der Untergitter entsteht, ist die Magnetisierung des Py $\vec{M}_{\text{Py}}$ in der Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ der dominierende Beitrag:

$$\vec{M} = \vec{M}_A + \vec{M}_B + \vec{M}_{\text{Py}}. \quad (3.2)$$

Im Falle einer $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ -Doppelschicht gilt das Py als geschaltet, wenn es die Orientierung seines Ordnungsparameters in einen der vier Zustände wechselt. Diese Endzustände werden über die Kopplung an der Grenzschicht J_{inter} indirekt von dem Mn_2Au vorgegeben.

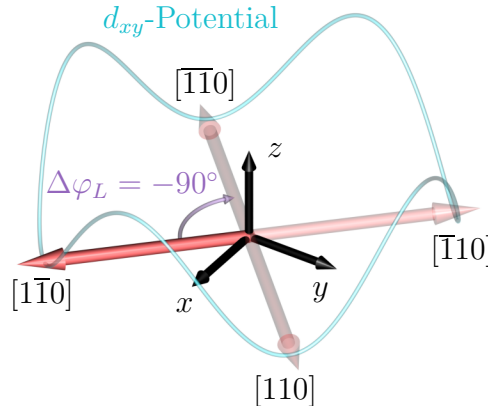


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Konfiguration des simulierten Mn_2Au . Der Initialzustand des Néelvektors $\vec{L}$ liegt in $[1\bar{1}0]$ Richtung.

3 PARAMETRISIERUNG DER SPINMODELLE

Im Zuge der ersten Untersuchungen^[13,15,52,61] zum Schaltverhalten von Mn_2Au wurde klar, dass es geschaltet werden kann. Der exakte Mechanismus (deterministisch – stochastisch, kohärent – Domänenwandbewegungen) konnte jedoch nicht erklärt werden. Daraufhin entwickelten Selzer u. a.^[21] ein atomistisches Heisenbergmodell, welches mit ab-initio-berechneten Austauschwechselwirkungen und Anisotropien parametrisiert ist. Ebenfalls ab-initio bestimmt wurden die von einem Strom induzierten Spin- und Bahnmomente, die bereits in Abschnitt 2.4 gezeigt wurden. Diese modellierten Selzer u. a. mit einem effektiven Zeemanfeld. Damit konnte gezeigt werden, dass der Schaltprozess durch ein Verkanten der beiden Mn-Untergitter und den daraus entstehenden großen Drehmomenten des Inter-Untergitteraustauschs getrieben wird^[21]. Der Schaltprozess in Mn_2Au ist bei endlicher Temperatur stochastisch und kohärent^[21].

Das effektive Zeemanfeld vernachlässigt, dass die induzierten Spin- und Bahnmomente abhängig von der jeweiligen Spinausrichtung sind. In hier vorgestellten Spinmodell wird der Ansatz von Selzer u. a. um spinabhängige induzierte Momente erweitert, die für jeden Spin in jedem Zeitschritt neu berechnet werden. Dazu werden die Suszeptibilitätsmatrizen der induzierten Momente aus den Ab-initio-Daten ermittelt. Anschließend wird das Mn_2Au -Modell von Selzer u. a. mit dem Py-Modell von Hinzke u. a. kombiniert, um die Doppelschicht zu simulieren. Ein wesentlicher Parameter ist die Kopplung an der Grenzschicht zwischen den beiden Metallen, die effektiv eine Anisotropie im Py erzeugt und die Resonanzfrequenz beeinflusst, siehe Abschnitt 3.4.

3.1 Experimentelle Untersuchungen

In experimentellen Untersuchungen der Arbeitsgruppe von Tobias Kampfrath an der FU Berlin, die Yannic Behovits durchführt, werden die Dünnschichten mit starken phasenstabilen singularen THzPs angeregt. Die erzeugten Spindynamiken werden mit einem magneto-optischen Effekt auf Basis eines Femtosekunden-Messpulses beobachtet. Schematisch ist das Verfahren in Abbildung 3.2 dargestellt^[22,60].

Das $\vec{E}$ -Feld des THzP ist parallel zu Mn_A^* , die induzierten NSOT der Bahnkomponente stehen senkrecht auf $\vec{E}$ (siehe Abbildung 2.5). Die Probe von Behovits und Kampfrath^[60] ist in der Mitte einer doppelkegelförmigen Antenne (vgl. Abbildung 3.2), die den vom $\vec{E}$ -Feld erzeugten Strom $\vec{j}$ verstärkt. In dem Modell wird nur das von dem Strom erzeugte elektrische Feld betrachtet, das

*Die Struktur der Doppelschicht wird in Abbildung 3.5 vorgestellt.

3.1 EXPERIMENTELLE UNTERSUCHUNGEN

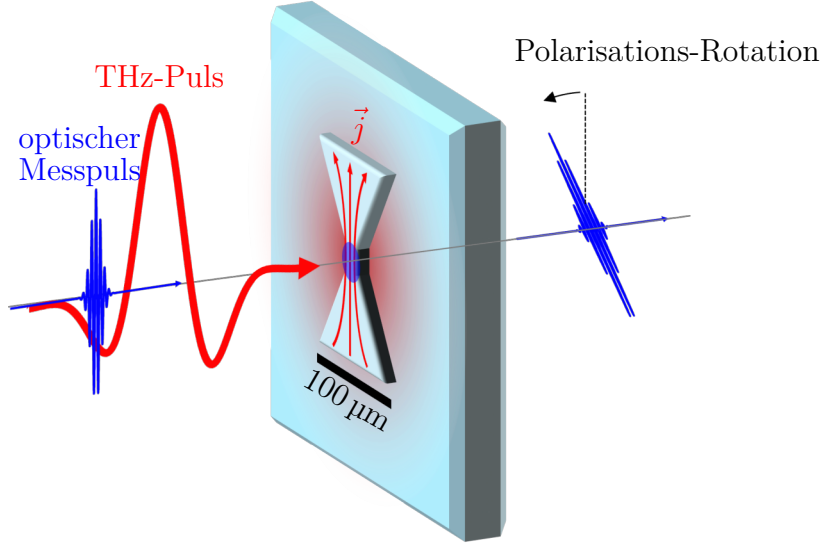


Abbildung 3.2: Schematischer Ablauf des experimentellen Aufbau von Behovits u. a.^[22] der Arbeitsgruppe Kampfrath der FU Berlin. Die Probe befindet sich in der doppelkegelförmigen Antenne, die den vom THzP erzeugten Strom $\vec{j}$ verstärkt. Danach folgt der linear polarisierte optische Messpuls, dessen Polarisationsänderung gemessen wird. Grafik entnommen aus Behovits und Kampfrath^[60] und modifiziert.

über die Leitfähigkeit σ mit $\vec{j}$ verbunden ist:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}. \quad (3.3)$$

Der so erzeugte Strom – bei dem im Experiment ein Schaltprozess fast aller Domänen des $\text{Mn}_2\text{Au|Py}$ beobachtet werden kann – entspricht einer Referenzfeldstärke E_0 von $3,6 \text{ MV m}^{-1}$. Zusätzlich erzeugt das elektrische Feld aufgrund der Erhaltung des Poynting-Vektors^[62] ein dynamisches magnetisches Feld $\vec{B}_{\text{laser}} = \frac{1}{c} \vec{z} \times \vec{E}$ ^[63] mit der Lichtgeschwindigkeit $c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$ und dem Einheitsvektor $\vec{z}$. Dieses Feld zeigt senkrecht zu $\vec{E}$ in die $[110]$ -Richtung. Mit einem externen Magnetfeld B_{const} kann das Py beeinflusst werden, um beispielsweise den Schaltprozess zu unterbinden.

Der Feldpuls wird von unseren Kollaborationspartnern in Berlin zur Verfügung gestellt und ist in Abbildung 3.3 abgebildet. Er besteht aus einem Hauptpuls (erster Puls) und zwei Reflexionen (zweiter bzw. dritter Puls) am Substrat. Die Feldstärke in der Probe ist nicht gleichmäßig verteilt, in einzelnen Bereichen ist sie wegen der Verstärkung durch die Antenne bis zu

3 PARAMETRISIERUNG DER SPINMODELLE

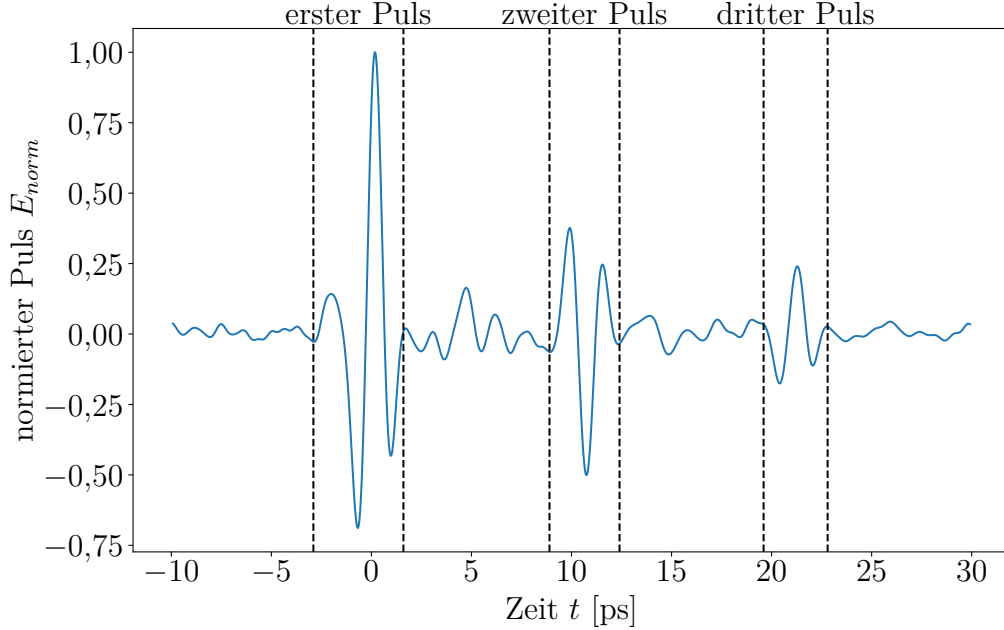


Abbildung 3.3: Der bei den Simulationen verwendete normierte THzP mit zwei Reflexionen. Er hat eine Gesamtdauer von 40 ps. Daten zur Verfügung gestellt von Behovits und Kampfrath^[60].

2,5-mal größer als im Referenzfeld. Das elektrische Feld wird im Weiteren in Einheiten von $E_0 = 3,6 \text{ MV m}^{-1}$ angeben.

Der Feldpuls steht als diskretisierte Zeit-Feldwert-Tabelle zur Verfügung. Er wird normiert und dann mit einer hardwarebeschleunigten Umsetzungstabelle auf Basis des CUDA *texture memory* gespeichert. Zwischen den Datenpunkten erfolgt eine lineare Interpolation. In Anhang A.4 werden die Interpolationsverfahren und die Implementierung detailliert erläutert.

Im Experiment wird das R -Signal gemessen, welches in der Relation

$$R \propto \langle |\vec{L}|^2 [1 - \cos(2 \langle \varphi_L \rangle)] \rangle \quad (3.4)$$

zu dem mittleren Néelvektor $\langle \vec{L} \rangle$ bzw. dessen Polarwinkel $\langle \varphi_L \rangle$ steht. Da die Probe eine laterale Ausdehnung von mehreren μm hat, besitzt sie Domänen. Um dies in den Simulationen ein Stück weit nachzubilden, wird über mehrere Simulationen mit unterschiedlichem Rauschen* gemittelt. Die einzelnen Simulationen können als Domänen der Probe interpretiert werden und spiegeln die stochastische Natur des Schaltprozesses wider. In diesem Sinne kann R mit

*Entspricht verschiedenen *Seeds* des Zufallszahlengenerators für das weiße Rauschen.

3.1 EXPERIMENTELLE UNTERSUCHUNGEN

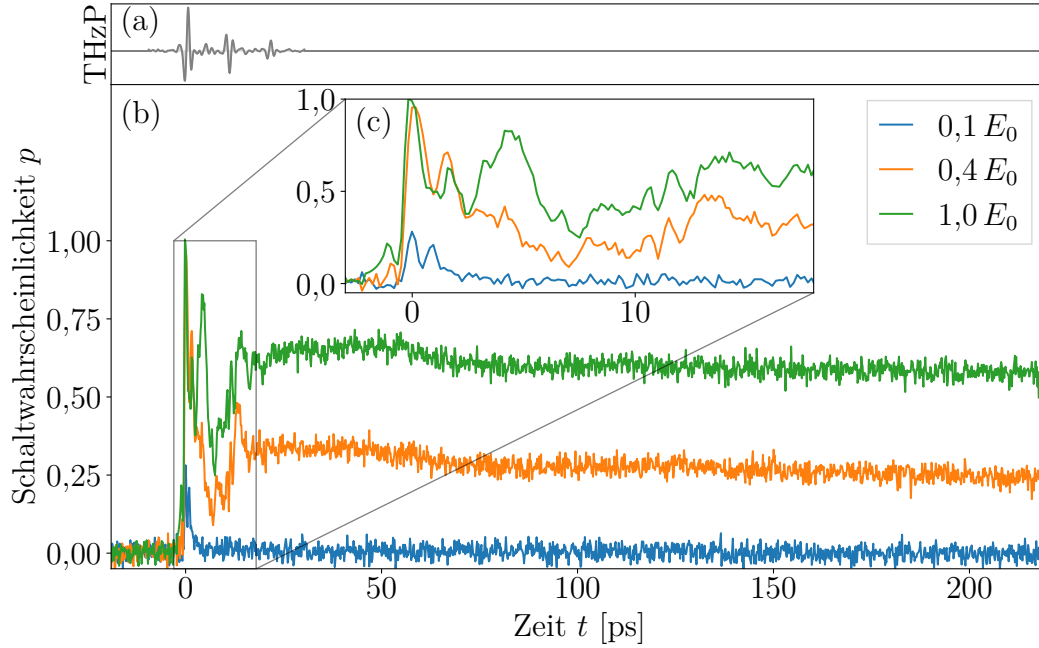


Abbildung 3.4: Die Schaltwahrscheinlichkeit p im Experiment, Gleichung 3.5, bei verschiedenen Feldstärken E über der Zeit. In (a) ist der anregende THzP, in (b) die resultierende Schaltwahrscheinlichkeit und in (c) ein Detail des Schaltprozesses. Daten von Behovits und Kampfrath^[60].

dem Übergang $\langle \varphi_L \rangle \rightarrow \langle \varphi_L \rangle - \langle \varphi_{L_0} \rangle = \langle \Delta \varphi_L \rangle$ als Schaltwahrscheinlichkeit

$$p = \frac{R + 1}{2} \quad (3.5)$$

interpretiert werden. Bei $R = \pm 1$ haben keine/alle Domänen um $\Delta \varphi_L = \pm 90^\circ$ geschaltet. Zu beachten ist, dass ein Schalten um $\pm 180^\circ$ im R -Signal nicht von einem nicht-schaltenden Zustand unterscheidbar ist, ebenfalls ist die Richtung $\pm 90^\circ$ nicht unterscheidbar.

Im Experiment konnte bereits ein Schalten der $\text{Mn}_2\text{Au|Py}$ -Doppelschicht beobachtet werden, das resultierende R -Signal respektive die mit Gleichung 3.5 berechnete Schaltwahrscheinlichkeit p sind in Abbildung 3.4 (b/c) dargestellt. Das Detail Abbildung 3.4 (c) zeigt, dass die Kurven bei $0,4 E_0$ und $1,0 E_0$ bei dem ersten Puls des THzP, Abbildung 3.4 (a), um $\pm 90^\circ$ schalten. Im weiteren Verlauf scheinen sie auf zwei verschiedene Niveaus zu relaxieren. Die atomistischen Hintergründe dieses Prozesses aufzuklären ist eine Motivation für die Entwicklung des $\text{Mn}_2\text{Au|Py}$ -Doppelschichtmodells in dieser Arbeit.

3.2 Néel-Spin-Bahn-Momente

Die in Abschnitt 2.4 vorgestellten induzierten Momente sind statisch bezüglich einer Magnetisierung in [100] bzw. [110]. Um sie spinabhängig zu berechnen, müssen sie an ein Modell der induzierten Momente angepasst werden. Nach einer kurzen Vorstellung des bisherigen Ansatzes der Annäherung durch ein effektives Zeemanfeld werden die Suszeptibilitätsmatrizen an die Daten aus Abschnitt 2.4 angepasst.

Die bisherigen Untersuchungen modellieren die NSOT als effektive, untergitterabhängige Zeeman-Felder^[13,21,24,64] und gehen dabei von statischen Feldern aus. Durch das Anlegen eines elektrischen Stroms konnte der Ordnungsparameter des Mn_2Au um 90° geschaltet werden. Dies entspricht einem Rechteck- $\vec{E}$ -Feldpuls senkrecht zu $\vec{M}_{A/B}$. Da die Bahn-Komponente dominiert und senkrecht auf $\vec{E}$ steht (siehe Abbildungen 2.5 und 2.6), ist die Approximation der induzierten Momente als ein untergitterabhängiges Magnetfeld $\vec{B}_i^{\text{ind}}$ möglich. Um einen Schaltvorgang zu provozieren, muss $\vec{B}_i^{\text{ind}}$ senkrecht zur Initialmagnetisierung sein. Das effektive Feld

$$\mu_s^d \vec{B}_i^{\text{ind}} = \sum_j J_{ij} \vec{s}_j + J^{sd} \vec{s}_i - \zeta \vec{l}_i \quad (3.6)$$

wird durch die induzierten Spin $\vec{s}_i$ - und Bahn $\vec{l}_i$ -Momente bestimmt, wobei ζ die Stärke der Spin-Bahn-Kopplung und J^{sd} die des intraatomaren Austauschs beschreibt. Der interatomare Austausch trägt durch die Wechselwirkungen J_{ij} mit den $\vec{s}_j$ der Gitternachbarn bei. Die Stärken von ζ und J^{sd} ergeben sich aus den Ab-initio-Daten. Die Spin-Bahn-Kopplung ζ wird aus der Energiedifferenz der $d_{3/2}$ - und $d_{5/2}$ -Resonanzen bestimmt und der intraatomare Austausch $J^{sd} = 50 \text{ meV}$ ^[21,57] aus dem Versatz der Spin-Up und -Down im s -Orbital. Für ζ gibt es zwei verschiedene Werte, 46 meV ($\tau = 50 \text{ fs}$)^[21] und 109 meV ($\tau = 100 \text{ fs}$)^[57]. Im Rahmen des Vergleichs der linearen Antworten von Modell und Experiment wird in Abschnitt 3.4.3 der für diese Arbeit passende Wert ausgewählt.

Abseits von einfachen Rechteck-Pulsen (bzw. konstanten Strömen) stößt diese Näherung an ihre Grenzen^[57]. In unserem Modell werden die NSOT durch das schnell wechselnde elektrische Feld $\vec{E}$ eines THzP erzeugt. Damit die Schaltprozesse simuliert werden können, müssen die induzierten Momente in Abhängigkeit von dem normierten Spin $\vec{S}_i$ und dem $\vec{E}$ -Feld für jeden Zeitschritt neu berechnet werden. Zur Berechnung der induzierten Momente müssen die REE-Tensoren $\chi^{S,L}(\vec{S}_i)$ für die Spin S - und Bahn L -Komponente bekannt sein. Aus Ab-initio-Rechnungen von Salemi u. a. sind die mittels

3.2 NÉEL-SPIN-BAHN-MOMENTE

linearer Antwortfunktion bestimmten $\chi_{abinito}^{S,L}([1, 0, 0]^T)$ und $\chi_{abinito}^{S,L}([1, 1, 0]^T)$ bekannt, aus denen einzelne Komponenten der $\chi^{S,L}(\vec{S}_i)$ berechnet werden können^[65,66].

3.2.1 Bestimmung der Momente

Die Momente in Gleichung 2.22 werden mit ihren jeweiligen magnetischen Moment μ_s und μ_l normiert. In Kugelkoordinaten lassen sich die (normierten) $\vec{S}_i$ durch ihre Euler-Winkel (ϑ_i, φ_i)

$$\vec{S}_i(\vartheta_i, \varphi_i) = [\cos \varphi_i \sin \vartheta_i, \sin \varphi_i \sin \vartheta_i, \cos \vartheta_i]^T \quad (3.7)$$

ausdrücken. Aus Ab-initio-Berechnungen und Anpassungen an die resultierenden Daten haben Salemi u. a.^[67] die Winkelabhängigkeiten der $\chi^{S,L}(\vec{S}_i)$ bestimmen können. Da $\vec{E} \cdot \vec{z} = 0$, also das elektrische Feld des THzP sich nur in der x - y -Ebene ausbreitet, vereinfacht sich $\chi^{S,L*}$ zu^[67]

$$\chi^{S,L}(\varphi_i, \vartheta_i) = \begin{bmatrix} C_1^{S,L} \cos \vartheta_i + C_2^{S,L} (1 - \cos 2\vartheta_i) \sin 2\varphi_i & C_3^{S,L} - C_2^{S,L} (1 - \cos 2\vartheta_i) \cos 2\varphi_i - C_4^{S,L} \cos 2\vartheta_i & 0 \\ -C_3^{S,L} - C_2^{S,L} (1 - \cos 2\vartheta_i) \cos 2\varphi_i + C_4^{S,L} \cos 2\vartheta_i & C_1^{S,L} \cos \vartheta_i - C_2^{S,L} (1 - \cos 2\vartheta_i) \sin 2\varphi_i & 0 \\ C_7^{S,L} \sin \vartheta_i \cos \varphi_i + C_8^{S,L} \sin 2\vartheta_i \sin \varphi_i & C_7^{S,L} \sin \vartheta_i \sin \varphi_i - C_8^{S,L} \sin 2\vartheta_i \cos \varphi_i & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.8)$$

Aus den Ab-initio-Daten von Salemi u. a.^[17] werden durch das Lösen des linearen Gleichungssystems

$$\begin{vmatrix} \chi_{abinito}^{S,L}([1, 0, 0]^T) = \chi^{S,L}(\varphi = 0^\circ, \vartheta = 90^\circ) \\ \chi_{abinito}^{S,L}([1, 1, 0]^T) = \chi^{S,L}(\varphi = 45^\circ, \vartheta = 90^\circ) \end{vmatrix} \quad (3.9)$$

die Konstanten $C_{2-3,5,7}^{S,L}$ bestimmt. Die so erhaltenen $C^{S,L}$ sind in Tabelle 3.1 gelistet, nicht aufgeführte Werte sind in unserem Modell null. Wie leicht zu sehen ist, ist $C_5^{S,L}$ wegen $E_z = 0$ irrelevant für unser Modell (vgl. Gleichung A.2). Die nicht bestimmten Konstanten sind aus den vorhandenen Daten auch nicht ermittelbar, da hierfür die $\chi^{S,L}$ für eine Spinorientierung in z -Richtung zur Verfügung stehen müssten. Aufgrund der Austauschwechselwirkung zwischen den Mn-Untergitter und der Anisotropien ist keine große Auslenkung in der S_z -Komponente zu erwarten.

*Vor Verwendung im *cuteLLG 2.0* Code wird $\chi^{S,L}$ in kartesische Koordinaten transformiert, um eine effizientere Berechnung zu ermöglichen. Details dazu finden sich im Anhang A.2.

3 PARAMETRISIERUNG DER SPINMODELLE

Tabelle 3.1: Konstanten der REE-Tensoren für Spin- und Bahnkomponenten. Die Vorzeichen beziehen sich auf beiden Untergitter $\begin{smallmatrix} \text{Mn}_\text{A} \\ \text{Mn}_\text{B} \end{smallmatrix}$. Die Elektronenzustandslebensdauer beträgt $\tau = 100$ fs. Nicht gelistete Konstanten sind in diesem Modell null.

Konstante $\{\cdot\}_i$	$C_i^S [\mu_B \text{ m V}^{-1}]$	$C_i^L [\mu_B \text{ m V}^{-1}]$
2	$\begin{smallmatrix} - \\ + \end{smallmatrix} 3,8 \cdot 10^{-12}$	$\begin{smallmatrix} - \\ + \end{smallmatrix} 1,8 \cdot 10^{-12}$
3	$\begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 4,8 \cdot 10^{-12}$	$\begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 2,409 \cdot 10^{-10}$
5*	$\begin{smallmatrix} + \\ + \end{smallmatrix} 1,9 \cdot 10^{-12}$	$\begin{smallmatrix} + \\ + \end{smallmatrix} 1,17 \cdot 10^{-11}$
7	$\begin{smallmatrix} + \\ + \end{smallmatrix} 4,9 \cdot 10^{-12}$	$\begin{smallmatrix} - \\ - \end{smallmatrix} 6,5 \cdot 10^{-12}$

Mit den $\vec{l}_i$ ist der Spin-Bahn-Kopplungs-Term^[68] implementiert als

$$\mathcal{H}_{\text{NSOT}} = \sum_i \left[\frac{\zeta \mu_s \mu_l \chi_i^L(\vec{S}_i) \cdot \vec{E}}{2\mu_B^2 \mu_l} \right] \cdot \vec{S}_i, \quad (3.10)$$

wodurch das magnetische Bahnmoment μ_l sich herauskürzt. Um die Ergebnisse der Ab-initio-Rechnungen auf den halbklassischen Hamiltonian zu übertragen, müssen Annahmen getroffen werden: Die Mn-Spins lassen sich als lokalisierte 3d-Elektronen betrachten, während die induzierten Momente freie Elektronen sind^[21]. Der Austausch zwischen diesen Elektronen wird für gewöhnlich als *sd*-Kopplung bezeichnet und fließt in unserem Modell als intraatomarer Austausch

$$\mathcal{H}_{\text{intra}} = \sum_i J^{sd} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_i \quad (3.11)$$

in den Hamiltonian ein. In dem Doppelschicht-Modell koppeln nur die lokalisierten und freien Spinnomente im Rahmen des interatomaren Austauschs, was in guter Übereinstimmung mit Sapozhnik u. a.^[69] ist:

$$\mathcal{H}_{\text{inter}} = \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_i^{[21]}. \quad (3.12)$$

3.3 SPINMODELLE DER METALLE

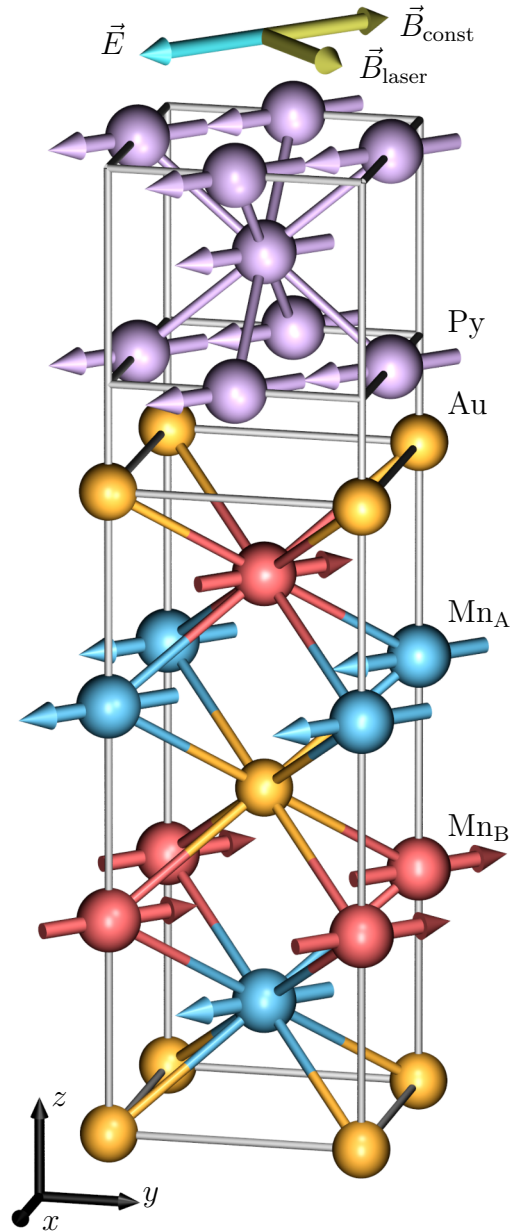


Abbildung 3.5: Die modellierte Struktur an der Grenzschicht der Doppelschicht im Initialzustand. In rot und blau die Mn_{A/B}-Atome, in Gold die nichtmagnetischen Au-Atome und in lila die des Py. Oben sind die Richtungen des elektrischen Feldes $\vec{E}$, und der beiden Magnetfelder $\vec{B}_{\text{const}}$ und $\vec{B}_{\text{laser}}$ dargestellt.

3.3 Spinmodelle der Metalle

Aus dem simulierten AFM/FM-Doppelschichtsystem ist in Abbildung 3.5 eine Einheitszelle schematisch dargestellt. Das Kürzel Py steht in diesem Kontext sinnbildlich für ein Atom der weichmagnetischen Legierung. Die Legierung besteht aus 20 % Eisen und 80 % Nickel, wobei deren Position in einem fcc-Gitter zufällig verteilt sind. Im Weiteren werden die beiden verwendeten Modelle vorgestellt, wobei das Mn_2Au -Modell in Selzer u. a. [21] und das Py-Modell von Hinzke u. a. [25] veröffentlicht wurde. Besonders an beiden Modellen ist, dass sie vollständig ab-initio-parametrisiert sind und keine effektiven Wechselwirkungen enthalten. Speziell für das Py wurden von anderen Forschern [24,64,70] Modelle mit Wechselwirkungen verwendet, die nicht zwischen Fe und Ni unterscheiden. Diese Modelle mit effektiven Wechselwirkungen sind ungenauer, verringern aber den Rechenaufwand.

Es wird darauf hingewiesen, dass das Modell zuerst auf einer modifizierten Version des Prozessor (*englisch*: central processing unit, CPU)-Codes *spinsim* entwickelt und dann später auf den Grafikprozessor (*englisch*: graphics processing unit, GPU)-Code *cuteLLG 2.0** portiert und weiter angepasst wurde. Bei den jeweiligen Resultaten ist vermerkt, wenn es sich um Ergebnisse handelt, die aus dem *spinsim*-Code kommen. Das Modell wurde auf dem *cuteLLG 2.0*-Code erweitert und angepasst; daraus ergeben sich Unterschiede

*Diese Konstante wird bei einem E -Feld in der x - y -Ebene nicht benötigt. Siehe Gleichung A.2.

*Welcher im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde. Basierend auf dem Code *cuteLLG*, maßgeblich von Andreas Donges entwickelt, sind im Wesentlichen folgende Neuerungen hinzugekommen:

- Entwicklung und Test des RMAT, welcher Heisenbergmodelle mit tensoriellen J_{ij} auch bei dotierten Materialien (z. B. Py) und Doppelschichten berechnen kann. Da er alle anderen Austauschmodi (Isotrop, Matrix, etc.) beinhaltet, wurden sie zugunsten einer besseren Les- und Wartbarkeit entfernt. Der Algorithmus und die Implementierung sind in Anhang A.3 beschrieben.
- Berücksichtigung und Berechnung der von einem elektrischen Feld induzierten Spin- und Bahn-Momente, welche für jeden Spin und jeden Zeitschritt berechnet werden, basierend auf den Suszeptibilitätstensoren für elektrische Felder in der x - y -Ebene, wie in Abschnitt 3.2 erklärt. Die Implementierung ist in Anhang A.2 zugänglich.
- Implementierung einer hardwarebeschleunigten Feld-Umsetzungstabelle für beliebige eindimensionale Feldverläufe im *texture memory*, siehe Anhang A.4.
- Diverse kleinere Verbesserungen der Geschwindigkeit (z. B. 10 % Geschwindigkeitssteigerung durch optimierte Speicher-Ausrichtung der Wechselwirkungsmatrizen) und Bedienbarkeit.
- Für ein isotropes Toy-Modell ist *cuteLLG 2.0* etwa sechszigmal schneller als der *spinsim*-Code.

3.3 SPINMODELLE DER METALLE

in den Resultaten.

3.3.1 Mn₂Au

Der metallische Antiferromagnet Mn₂Au kristallisiert in der Raumgruppe I4/mmm, wobei er eine Gitterkonstante von $a = 3,328 \text{ \AA}$ in der Grundfläche hat und entlang der z -Achse $c = 8,539 \text{ \AA}$ [71,72]. Eine Einheitszelle des AFM ist in Abbildung 3.5 dargestellt.

Im Rahmen seiner Dissertation entwickelte Severin Selzer ein ab-initio-parametrisiertes Modell des Mn₂Au, welches die Wechselwirkungen J_{ij} der einzelnen Mn-Atome miteinander enthält, das magnetische Moment $\mu_s = 3,74 \mu_B$ ermittelt und die Zwei-Ionen- und magnetokristalline Anisotropie beschreibt. Das Modell erreicht eine kritische Temperatur von $1680(3) \text{ K}$ [21], was im Vergleich zu 1610 K aus Monte-Carlo-Simulationen [20] plausibel erscheint. Mn₂Au erreicht bei etwa 900 K ein Peritektikum, was eine experimentelle Bestimmung der Néeltemperatur erschwert. Sie kann extrapoliert werden und bewegt sich im Bereich von 1300 bis 1600 K [71].

Mit einem räumlichen Limit von $2,7a$ ergibt sich ein Inter-Untergitteraustausch von $-371,13 \text{ meV}$, sowie ein Intra-Untergitteraustausch von $182,36 \text{ meV}$. Die Anisotropien werden aus der elektronischen Bandstruktur im Sinne des Earnshaw-Theorems [73] berechnet. Zusätzlich zu einer harten c -Achse durch die Anisotropien zweiter ($d_z = -0,62 \text{ meV}$) und vierter ($d_{zz} = -0,024 \text{ meV}$) Ordnung führt eine Anisotropie vierter Ordnung ($d_{xy} = 0,058 \text{ meV}$) zu zwei leichten Achsen in der Ebene. Daraus resultieren die vier in Abbildung 3.1 dargestellten Grundzustände des Néelvektors, wobei $[1\bar{1}0]$ als Initialzustand verwendet wird.

Der von Selzer u. a. [21] verwendete Hamiltonian zur Beschreibung des Systems lautet

$$\mathcal{H}_{\text{Mn}_2\text{Au}} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \vec{S}_i J_{ij} \vec{S}_j - \sum_i \left[d_z \vec{S}_{i,z}^2 + d_{zz} \vec{S}_{i,z}^4 + d_{xy} \vec{S}_{i,x}^2 \vec{S}_{i,y}^2 \right] - \mu_s \sum_i \vec{S}_i \vec{B}_i^{\text{ind}}, \quad (3.13)$$

wobei $\mu_s \vec{B}_i^{\text{ind}}$ das Feld aus Gleichung 3.6 ist, mit dem die NSOT aus Abschnitt 3.2 beschrieben wurden. Wie bereits dort erläutert, werden diese in dem Modell durch veränderliche induzierte Momente simuliert. Hierzu lässt sich Gleichung 3.13 um Gleichung 3.10 und Gleichung 3.11 ergänzen. Das Magnetfeld $\vec{B}$ ist nicht mehr untergitterabhängig, und der Hamiltonian $\mathcal{H}$

3 PARAMETRISIERUNG DER SPINMODELLE

hat die Form*

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (\vec{S}_i + \vec{s}_i) J_{ij} (\vec{S}_j + \vec{s}_j) - \sum_i [d_z \vec{S}_{i,z}^2 + d_{zz} \vec{S}_{i,z}^4 + d_{xy} \vec{S}_{i,x}^2 \vec{S}_{i,y}^2] \\ - \underbrace{\sum_i J^{sd} \vec{S}_i \vec{s}_i}_{\text{intraatomarer Austausch, Gleichung 3.11}} + \underbrace{\sum_i \frac{\zeta \mu_s \mu_l}{2\mu_B^2} \vec{S}_i \vec{l}_i}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung, Gleichung 3.15}} - \underbrace{\mu_s \sum_i \vec{S}_i \vec{B}}_{\text{Zeeman}}. \quad (3.15)$$

Mit $\vec{B} = \vec{B}_{\text{laser}} + \vec{B}_{\text{const}}$ kann beispielsweise das Py manipuliert werden, da es wegen der antiferromagnetischen Struktur keinen Einfluss auf das Mn₂Au hat.

3.3.2 Permalloy

Permalloy ist ein weichmagnetischer FM, der keine starken Anisotropien besitzt. Eine vorhandene kubische Anisotropie^[74] in der Ebene wird vernachlässigt. Das verwendete Modell ist von Hinzke u. a.^[25] entwickelt worden. Es wird als fcc-strukturiertes Material simuliert, wobei die einzelnen Gitterplätze zufällig besetzt werden. Die Gitterstruktur ist in Abbildung 3.5 dargestellt. Der Wert der Gitterkonstante beträgt $a_{3D} = 3,55 \text{ \AA}$ ^[75], die magnetischen Momente sind mit $\mu_{s,\text{Fe}} = 2,637 \mu_B$ und $\mu_{s,\text{Ni}} = 0,628 \mu_B$ angegeben^[25]. In Abbildung 3.6 sind die Austauschenergien in Abhängigkeit vom Abstand eines Referenzatoms zu sehen. Die Fe-Fe-Wechselwirkung ist langreichweitig. In der Kombination mit dem großen *halo*[†] erreicht das Modell die Grenzen

*Schlussendlich in der Implementierung wird das effektive Feld verwendet, wie bereits in Gleichung 2.16 beschrieben:

$$\vec{h} = -\frac{\partial \mathcal{H}(\vec{S}_i)}{\partial \vec{S}_i} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} (\vec{S}_j + \vec{s}_j) + 2 \sum_i \left[\begin{array}{c} d_{xy} S_{i,x} S_{i,y}^2 \\ d_{xy} S_{i,x}^2 S_{i,y} \\ d_z S_{i,z} + 2d_{zz} S_{i,z}^3 \end{array} \right] \\ + \underbrace{\sum_i J^{sd} \vec{S}_i}_{\text{intraatomarer Austausch}} - \underbrace{\sum_i \frac{\zeta \mu_s \mu_l}{2\mu_B^2} \vec{l}_i}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung}} + \underbrace{\mu_s \sum_i \vec{B}}_{\text{Zeeman}} \quad (3.14)$$

[†]Hier stoßen wir an einen großen Nachteil des CUDA-Codes: Speicherplatz. Zur Verarbeitung auf der Grafikkarte wird das Spingitter in Blöcke aufgeteilt, die von einem Satz Prozessoren gemeinsam bearbeitet werden. Für jeden dieser Blöcke müssen alle Wechselwirkungs-Spins abgespeichert werden. Für eine Blockgröße von 1 (ein einzelner Spin) muss eine (erheblich) größere Anzahl Spins abgespeichert werden, wie folgende Grafik verdeutlicht:

3.3 SPINMODELLE DER METALLE

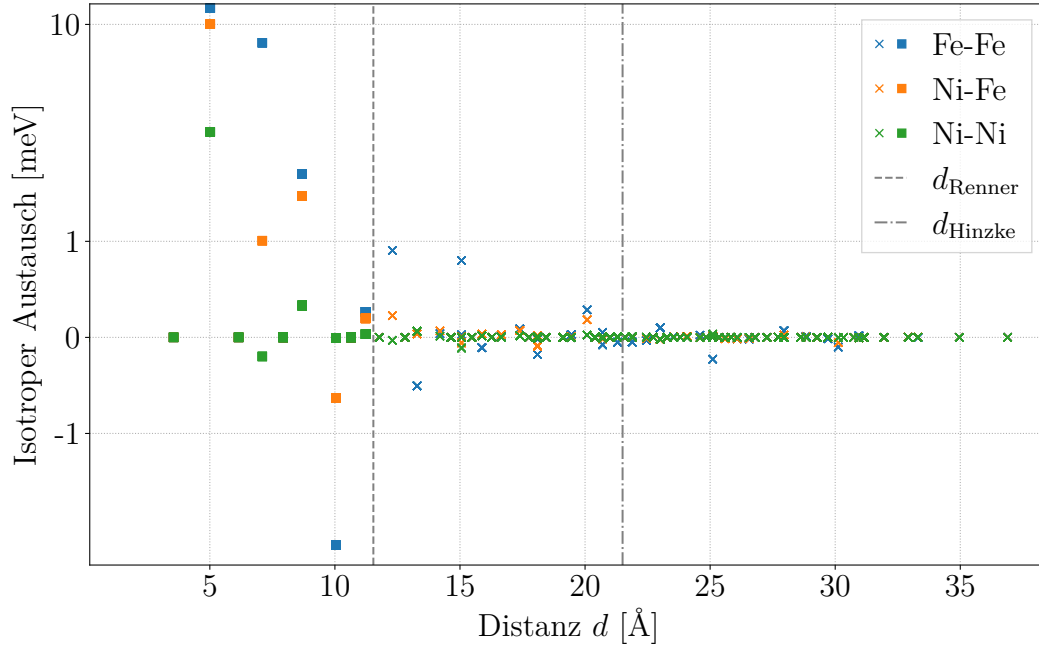
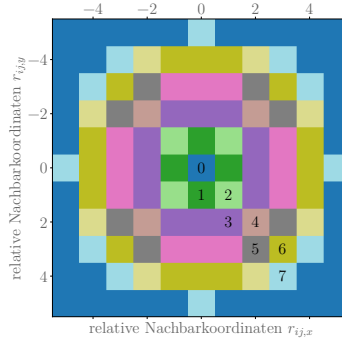


Abbildung 3.6: Die Wechselwirkungen (logarithmische Skala) von Hinzke u. a. ^[25] der einzelnen Atomsorten des Py in Abhängigkeit von der Distanz vom Referenzatom. Ebenfalls dargestellt sind die beiden Abschnittswerte d dieser Arbeit (Renner) und von Hinzke u. a. Die quadratischen Punkte sind im Modell inkludiert.



Wir betrachten hier nur sc-Gitter, da jedes Spingitter (bezeichnet das materialabhängige Gitter) im CUDA-Code als solches behandelt wird. Das (nach einer Koordinatentransformation) resultierende Gitter nennen wir Hostgitter (welches immer ein sc-Gitter ist). Dementsprechend sind die im Hostgitter als n -te Nachbarn bezeichneten Nachbarn nur die bezüglich der relativen Koordinaten r_{ij} der Austauschlisten, die in Koordinaten des Hostgitters ausgedrückt sind und nicht der tatsächlichen Kristallstruktur des Spingitters entsprechen. Wie viele Nachbarn ausgehend vom Rand des Blocks im Hostgitter abgespeichert werden müssen, kann unterschiedlich je nach Dimension sein, ist aber immer symmetrisch

3 PARAMETRISIERUNG DER SPINMODELLE

der verfügbaren GPU-Ressourcen und kann maximal eine Reichweite von $d_{\text{Renner}} = 11,54 \text{ \AA}$ nutzen. Die in das Modell integrierten Wechselwirkungen sind in Abbildung 3.6 durch quadratische Symbole hervorgehoben. Ein Teil der Fe-Fe-Wechselwirkungen wird in dem Modell nicht berücksichtigt, was sich auf die kritische Temperatur auswirkt. Während Hinzke u. a. eine kritische Temperatur von 650 K erreicht, ist sie mit den gekürzten Austauschlisten bei 571 K. Experimentell wird ein Wert von etwa 820 K erreicht^[76].

Der Hamiltonian des Mn_2Au , Gleichung 3.15, vereinfacht sich zu

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (\vec{S}_i + \vec{s}_i) J_{ij} (\vec{S}_j + \vec{s}_j) - \underbrace{\mu_s \sum_i \vec{S}_i \vec{B}}_{\text{Zeeman}}. \quad (3.16)$$

3.4 $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ Modell

Nach der Einzelbetrachtung der beiden Modelle stellt die Kombination zur Doppelschicht die zentrale Herausforderung dar. Die Wechselwirkungsmatrizen für beide Materialien bleiben gleich, müssen aber noch um die Kopplung an der Grenzschicht ergänzt werden. Bommanaboyena u. a.^[23] stellten fest, dass die Grenzschicht vollständig unkompensiert ist. Es koppelt immer das gleiche Mn-Untergitter (Mn_B in Abbildung 3.5) an der Grenzschicht an das Py, was zu einer gemeinsamen AFM/FM Domänenbildung führt. Sie bestimmten über Hystereschleifen die Koerzitivfeldstärke von 5000 Oe des angekoppelten Py, aus welcher die Kopplungsstärke mit $J_{\text{inter}} = -434 \text{ meV}$ ^[64] berechnet werden konnte. Diese starke Kopplung, die um Größenordnungen höher ist als in anderen Materialien wie CuMnAs ($\approx 200 \text{ Oe}$ ^[77]), führt zu langfristig stabilen Zuständen bei Raumtemperatur.

In dem hier vorgestellten Modell wird das fcc-strukturierte* Py so auf dem tetragonal strukturierten Mn_2Au platziert, dass jedes Mn_B vier nächste

in der Dimension (bedingt durch den Code) und heißt *halo* (englisch: umrahmen).

Wo ist nun das Problem? Ein `float3` Datentyp verbraucht 12 B Speicher. Der *shared memory*, ein schneller Speicherbereich, den sich die einzelnen Prozessoren eines Blocks teilen, hat eine Kapazität von 48 kB, was 4096 `float3` Datenobjekten entspricht. Somit ist der Platz für die Spins stark begrenzt, ein Abspeichern im (riesigen) *global memory* führt zu markanten Geschwindigkeitseinbußen.

In dem Spinmodell von Py verwenden wir eine Einheitszelle im Hostgitter mit den Dimensionen (1, 1, 4), weswegen in x - und y -Dimension der n -te Spingitter-Nachbar dem n -ten Nachbarn des Hostgitters entspricht. Für die z -Dimension unterscheiden sie sich jedoch untergitterabhängig, im schlechtesten Fall um $4n$. Weiteres zu dieser Transformation in Anhang A.1.

*Es gibt auch bcc-strukturiertes Py, wie von Jenkins u. a.^[70] verwendet.

3.4 MN₂AU|PY MODELL

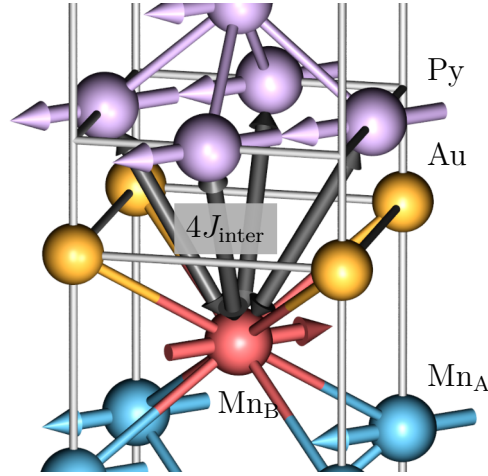


Abbildung 3.7: Ein Ausschnitt aus Abbildung 3.5 mit gleicher Farbgebung. Eingezeichnet ist die simulierte Grenzschicht-Wechselwirkung J_{inter} zwischen dem letzten Mn_B und der ersten Py-Schicht.

Py-Nachbarn hat, schematisch in Abbildung 3.7 dargestellt. Die Kopplung wird in dem Modell über eine effektive isotrope Wechselwirkung mit den nächsten Nachbarn simuliert, es ergeben sich vier Kopplungspartner.

Diese Art der Wechselwirkung ist in Übereinstimmung mit Jenkins u. a. [70]. Eine andere Möglichkeit ist es, eine 1:1 Kopplung zwischen Mn_B und Py zu realisieren. Hierbei müsste dann die Grenzschichtkopplung J_{inter} stärker sein als bei vier Kopplungspartnern.

3.4.1 Kritische Temperatur und Gleichgewichts-Kurve

Zur Kontrolle der Gleichgewichtseigenschaften wird eine Gleichgewichtskurve aufgenommen, die den Ordnungsparameter des Materials in Abhängigkeit von der Temperatur zeigt. In ihr können verschiedene Phasenübergänge betrachtet werden, so der bei steigender Temperatur stattfindende Übergang 2. Ordnung von (anti)-ferromagnetischer Ordnung zu paramagnetischem Verhalten [26,78]. Der Verlauf des Ordnungsparameters wird bei einem solchen Übergang mit

$$\text{Ordnungsparameter} = \begin{cases} A \left(1 - \frac{T}{T_C}\right)^\beta & T \leq T_C \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.17)$$

beschrieben, wobei T_C die kritische Temperatur und β der kritische Exponent ist. Dieser ist erwartungsgemäß im Bereich von $0,32 \lesssim \beta \lesssim 0,36$ [79].

3 PARAMETRISIERUNG DER SPINMODELLE

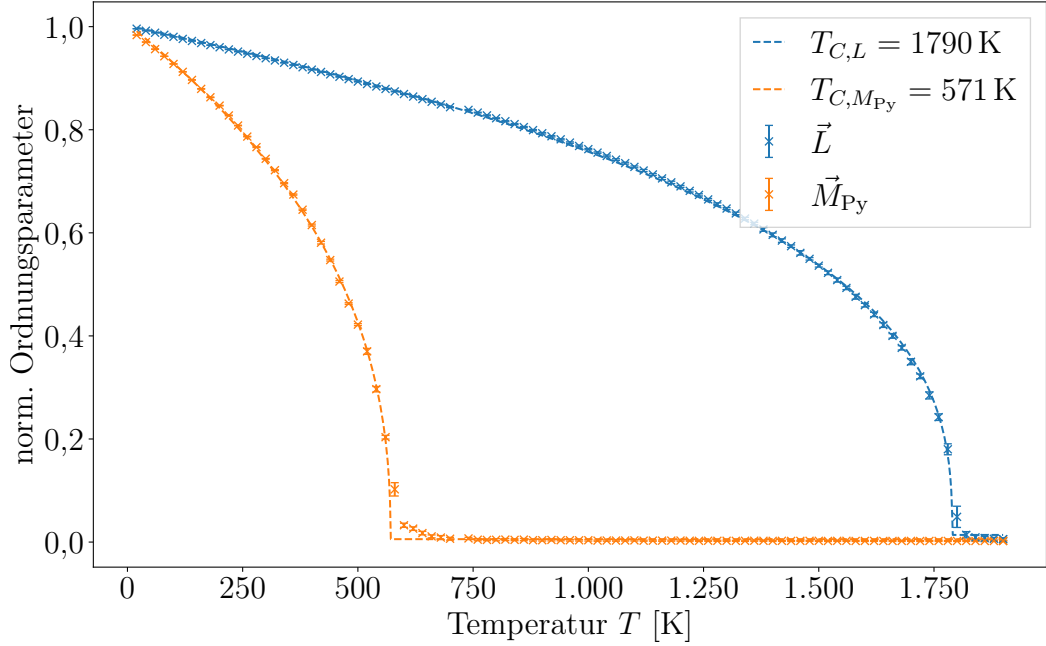


Abbildung 3.8: Gleichgewichtskurve der AFM/FM-Doppelschicht: Die Ordnungsparameter des Mn_2Au (Néelvektor) und Py (Magnetisierung) aufgetragen über der Temperatur. Mit einer Anpassung von Gleichung 3.17 an die Kurven wurden die kritischen Temperaturen zu $T_{C,\text{Mn}_2\text{Au}} = 1790 \text{ K}$ und $T_{C,\text{Py}} = 571 \text{ K}$ bestimmt.

Für die Gleichgewichtskurve der Doppelschicht wird ein System der Größe $78 \times 78 \times 216$ Spins genutzt, was 1,3 Millionen Spins entspricht. Die Schichtdicken der beiden Metalle passen zu dem Film von Behovits und Kampfrath^[60]. In Abbildung 3.8 ist die Gleichgewichtskurve der AFM/FM-Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ abgebildet. Für Py ist der Ordnungsparameter die Magnetisierung $\vec{M}_{\text{Py}}$, für Mn_2Au der Néelvektor $\vec{L}$. Während der Phasenübergang des Mn_2Au mit 1790 K etwas über dem von Selzer u. a.^[21] liegt, ist die kritische Temperatur des Py mit 571 K markant unter dem Wert 650 K^[25]. Dies liegt an der gekürzten Austauschliste, siehe Abbildung 3.6, und dem damit geringeren inter-atomaren Austausch.

3.4.2 Resonanzfrequenzen und Grenzschichtkopplung

Eine Schlüsselrolle in dem Modell der Doppelschicht bildet die Wechselwirkung J_{inter} an der Grenzschicht. Die Wechselwirkung wird als eine effektive Nächste-Nachbarn-Wechselwirkung modelliert, der Gesamtaustausch eines Grenzschichtatoms ist $4J_{\text{inter}}$. Dies steht im Einklang mit Jenkins u. a.^[70] und Bommanaboyena u. a.^[23] und wird als freier Parameter behandelt, da hier

3.4 MN₂AU|PY MODELL

keine Ab-initio-Daten zur Verfügung stehen. Festgesetzt werden soll J_{inter} durch die longitudinale Resonanzfrequenz der M_z -Komponente des Py. In den Untersuchungen von Behovits und Kampfrath^[60] wird mit einer ferromagnetischen Resonanzmessung eine Frequenz im Bereich von 14 bis 17 GHz für diese Eigenmode gefunden.

Gemäß Kittel^[8] ist die Resonanzfrequenz f_{res} eines Ferromagneten gegeben durch

$$f_{\text{res}} = \frac{\gamma}{2\pi} \sqrt{B(B + \mu_0 M)}, \quad (3.18)$$

wobei γ das gyromagnetische Verhältnis, B ein externes Magnetfeld und M die Magnetisierung des FM ist. Im Falle der Grenzschicht entspricht das von J_{inter} erzeugte effektive Magnetfeld dem $\vec{B}$ und bestimmt maßgeblich die Resonanzfrequenz des ansonsten anisotropiefreien Py. Um das Modell an das Experiment anzupassen, wird das noch freie J_{inter} so verändert, dass die Eigenmoden von Modell und Simulation übereinstimmen. Al-Hamdo u. a.^[64] verwendete eine aus Bommanaboyena u. a.^[23] berechneten Kopplung von -434 meV und erhielt damit in einer 6 nm dicken Schicht Py eine f_{res} von etwa 26 GHz.

Die hier berechneten Resonanzfrequenzen sind mit einem frühen Spinmodell auf dem modifizierten *spinsim*-CPU-Programm berechnet worden. Die Daten sind nicht uneingeschränkt auf spätere Ergebnisse übertragbar, da sich die Parameter geändert haben, bieten jedoch einen guten Ausgangspunkt, um den exakten Kopplungswert zu finden. Dieser wird in Abschnitt 3.4.3 ermittelt.

In dem Modell wird J_{inter} so angepasst, dass die im Experiment beobachtete Frequenz erreicht wird. In einem ersten Schritt wird die Doppelschicht mit einem THzP bei verschiedenen Kopplungswerten angeregt und dann die Frequenz bestimmt. In Abbildung 3.9 sind die Resonanzfrequenzen als Funktion von J_{inter} dargestellt. Sie wurden mittels Anpassung einer Lorentz-Funktion an das Fourierspektrum bestimmt.

Wie zu sehen ist, führt entweder eine schwache Kopplung oder eine starke Kopplung zu einer Resonanzfrequenz von ≈ 16 GHz. Im Fall einer unendlich großen Kopplung entspricht dies einem Modell, bei dem die Grenzschicht aus einem Atom besteht, das für Py die Wechselwirkungen wie mit einem Py Atom hat, aber für Mn₂Au wie ein Mn_B Atom wirkt*. Im Falle schwacher Kopplung lässt sich die Resonanzfrequenz ebenfalls auf etwa 16 GHz anpassen,

*Es muss natürlich das Vorzeichen für eine der beiden Wechselwirkungen beachtet werden, da $J_{\text{inter}} < 0$ ist.

3 PARAMETRISIERUNG DER SPINMODELLE

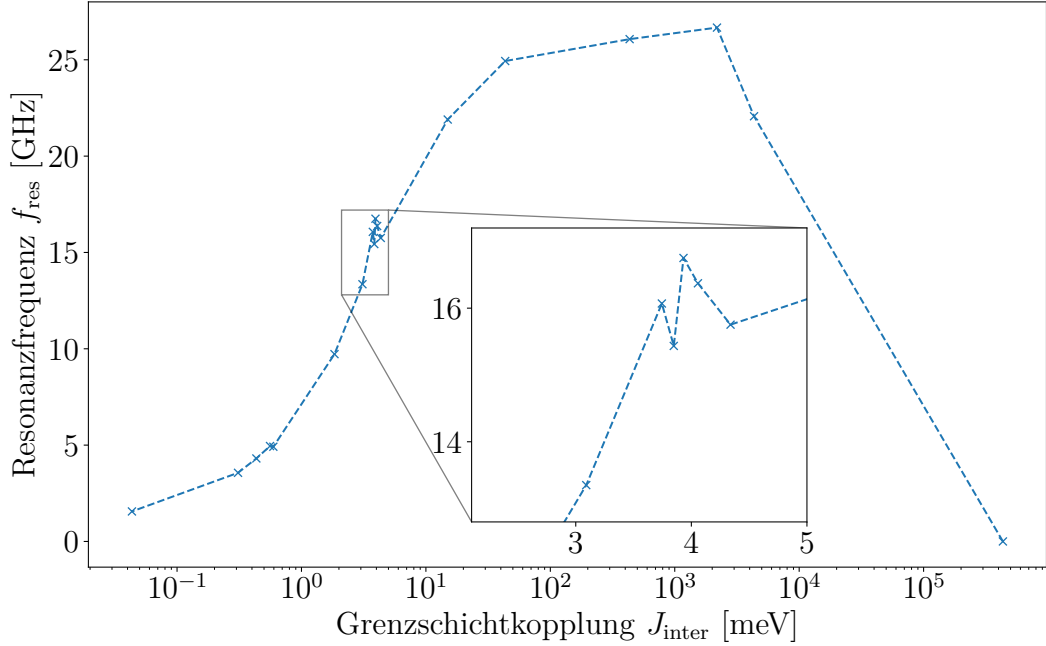


Abbildung 3.9: Die longitudinale Resonanzfrequenz der M_z -Komponente des Py nach Anregung mit einem THzP, berechnet mit dem *spinsim*-Code. Der Gilbert-Dämpfungsparameter α_{Py} beträgt 0,008.

wobei die exakte Frequenz thermisch schwankt und nicht aus einer einzelnen Simulation ermittelbar ist. Das ist im Detail in Abbildung 3.9 zu sehen.

Durch iterative Anpassung erzielt das Modell mit einem $J_{\text{inter}} = -3,8 \text{ meV}$ eine Resonanzfrequenz f_{res} von ca. 15 GHz im Spinmodell des *spinsim*-Codes. Im *cuteLLG 2.0* mit gekürzten Austauschlisten und verbesserten Parametern resultiert sie in 10 GHz. Die Gilbert-Dämpfung α_{Py} beträgt dabei in beiden Programmen 0,008. Dieser Wert für J_{inter} liegt in einer vergleichbaren Größenordnung mit den von Al-Hamdo u. a. [64] verwendeten $J_{ij}^{\text{Mn,Py}}$ und ist ähnlich zu $J_{ij}^{\text{Mn,Mn}}$ von Selzer u. a. [21], sofern man nur die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung einbezieht*. Ein Vergleich verschiedener Wechselwirkungen von Heisenberg-Modellen zwischen den Metallen ist in Tabelle 3.2 aufgeführt.

3.4.3 Lineare Antwort

In diesem Abschnitt wird das Modell abschließend mit dem Experiment abgeglichen. Die experimentellen Daten wurden von Behovits u. a. [82] erhoben.

*Auch im Vergleich zum nicht direkt vergleichbaren von Mounkachi u. a. [80] untersuchten MnFe_2O_4 liegt J_{inter} in ebenfalls der gleichen Größenordnung wie $J_{ij}^{\text{Mn,Fe}}$. Dies sind die einzig verfügbaren Ab-initio-Daten, die eine Mn-Fe-Wechselwirkung beinhalten.

3.4 MN₂AU|PY MODELL

Tabelle 3.2: Wechselwirkungen $J_{ij}^{\nu,\vartheta}$ in Einheiten von meV zwischen den Metallen ν und ϑ aus verschiedenen Datensätzen. Py bezieht sich auf eine effektive Wechselwirkung, bei der nicht zwischen Fe und Ni unterschieden wird. Werte ohne Referenz beziehen sich auf diese Arbeit. Mn-Py ist die Grenzschnittkopplung J_{inter} . Referenzen: Khmelevskiy und Mohn^[20], Selzer u. a.^[21], Hirst u. a.^[24], Hinzke u. a.^[25], Al-Hamdo u. a.^[64], Hirst u. a.^[81] und Jenkins u. a.^[70], effektive Wechselwirkungen sind mit † markiert. Für Mn verwendete Hirst u. a.^[24] die Mn Parameter von Hirst u. a.^[81].

$J_{ij}^{\nu,\vartheta}$ [meV]	Mn	Fe	Ni	Py
Mn	39,28 ^[21]			−3,85 †
	8,82 ^[81]			−3,12 † ^[24]
	91,70 ^[20,70]			−433,91 † ^[64]
				−19,86 † ^[70]
Fe		12,40 ^[25]	10,04 ^[25]	
Ni			2,39 ^[25]	
Py				14,11 † ^[64]
				38,96 † ^[24]
				61,88 † ^[70]

Um einzuschätzen, wie gut das Modell mit den realen Materialeigenschaften übereinstimmt, wird die Reaktion auf einen Puls im linearen Regime verglichen. Hierfür wird die Doppelschicht aus dem Berliner Experiment mit einer Mn₂Au-Schichtdicke von 30 nm, was etwa 36 Einheitszellen entspricht, simuliert. Die Py-Schichtdicke beträgt 6 nm, umgerechnet ≈ 18 Einheitszellen. In der Ebene wird eine Fläche von $22 \times 22 \text{ nm}^2$ simuliert. So ergibt sich eine Gittergröße von $66 \times 66 \times 216$ und etwa eine Million Spins. Die Temperatur beträgt, sofern nicht anders beschrieben, 300 K. Modifizierbare Parameter sind neben der Grenzschnittkopplung J_{inter} die Gilbert-Dämpfungen α_{Mn} und α_{Py} , sowie der Spin-Bahn-Kopplungsparameter ζ des Mn₂Au. Die Eigenfrequenzen und Magnonendämpfung des Mn₂Au in der Mn₂Au|Py-Doppelschicht werden mit denen aus dem Experiment verglichen. Behovits u. a.^[82] fanden hier eine Frequenz von 0,62 THz und eine Dämpfung von $2,3 \text{ ps}^{-1}$. Anschließend wird die Gilbert-Dämpfung des Py angepasst. Diese Anpassungen erfolgen mit dem aus *spinsim* ermittelten Kopplungswert $J_{\text{inter}} = -3,85 \text{ meV}$, mit dem final die M_z -Resonanzfrequenz des Py später festgesetzt wird.

Anfangs werden die beiden ζ -Werte für die Spin-Bahn-Kopplung aus Abschnitt 2.4, 46 meV^[21] und 109 meV^[57], verglichen. Wie in Abbildung 3.10

3 PARAMETRISIERUNG DER SPINMODELLE

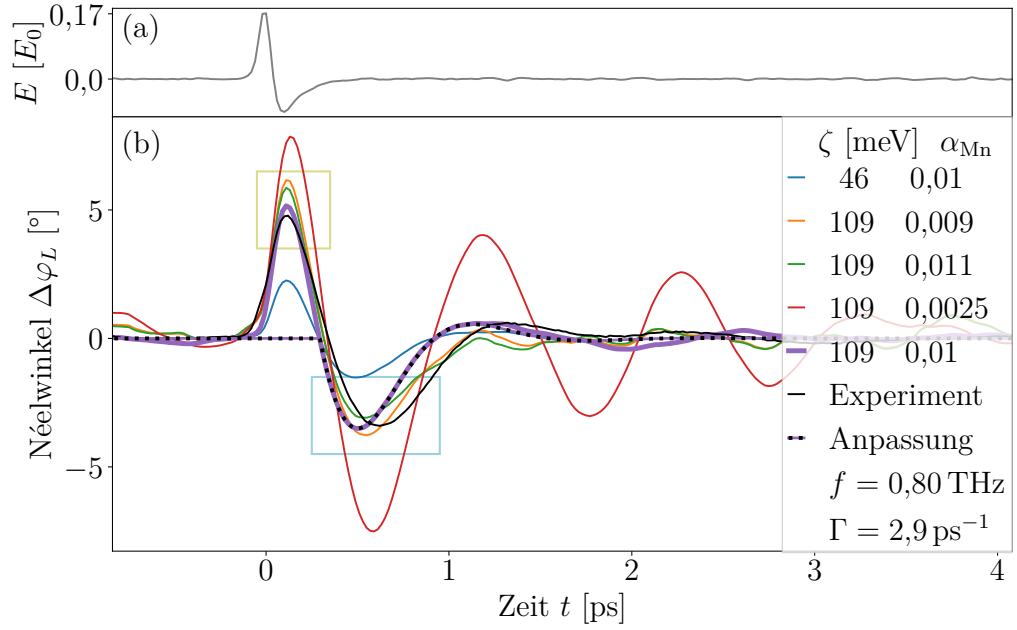


Abbildung 3.10: Die lineare Antwort (b) des Mn in der Doppelschicht $Mn_2Au|Py$ auf den in (a) gezeigten THzP mit einem Maximalfeld von $0,8 MV m^{-1}$. Im Vergleich die beiden Spin-Bahn-Kopplungen $\zeta = 46 meV$ ^[21] und $108,98 meV$ ^[57]. Die Kurve mit $\zeta = 109 meV$ und $\alpha_{Mn} = 0,1$ (dicke Linie) wurde mit Gleichung 3.19 angepasst und hat die später verwendeten Parameter. Die experimentellen Daten sind von Behovits u. a.^[82]

3.4 MN₂AU|PY MODELL

ersichtlich, führt 46 meV zu einer Auslenkung von 2,3° im ersten Maximum (grüner Kasten), was etwa der Hälfte des Experiments (4,8°) entspricht. Die stärkere Spin-Bahn-Kopplung führt zu einer Auslenkung von 5,1° (jeweils $\alpha_{\text{Mn}} = 0,01$). Der ζ -Wert ist konsistent mit der in Selzer^[57], wie auch in dieser Arbeit, verwendeten Elektronenlebensdauer $\tau = 100$ fs. Betrachtet werden nun Variationen der Dämpfung: Ein sehr geringes α_{Mn} von 0,0025 kann das stark gedämpfte System nicht widerspiegeln, es schwingt lange aus. Bei $\alpha_{\text{Mn}} = 0,009$ und 0,011 wird die Antwort größer (6,1° respektive 5,9°), die Auslenkung im ersten Minimum (blauer Kasten) ist bei 0,011 zu klein und bei 0,009 zu groß. Hier ist 0,01 bei 3,5° und das Experiment bei 3,4°, die Abweichung liegt bei 3 %. Für einen Film aus reinem Mn₂Au maßen Behovits u. a.^[22] eine Gilbert-Dämpfung von 0,008, in der Mn₂Au|Py-Doppelschicht fanden sie ebenfalls 0,01^[60], was in guter Übereinstimmung mit anderen Arbeiten^[21,24,61,70,81] ist.

Wird an die lineare Antwort mit $\zeta = 109$ meV und $\alpha_{\text{Mn}} = 0,1$ (dicke Linie in Abbildung 3.10 (b)) ein gedämpfter Harmonischer Oszillator

$$A(t) = \frac{A}{2\pi f} \sin(2\pi f(t - t_0)) \exp(-\Gamma(t - t_0)) \Theta(t - t_0) \quad (3.19)$$

angepasst, so ergibt sich die Dämpfung $\Gamma = 2,9(7)$ ps⁻¹ und die Eigenfrequenz $f = 0,80(5)$ THz. Hierbei notiert Θ die Heaviside-Funktion. Im Rahmen der Unsicherheiten der Anpassung ist die Dämpfung des Modells mit dem Experiment in Übereinstimmung.

Neben der Magnonendämpfung im Mn₂Au bleibt die Gilbert-Dämpfung α_{Py} des Py ein zentraler Parameter, der den Untersuchungen zufolge einen erheblichen Einfluss auf das Schaltverhalten hat. Zur Analyse wird das System mit einem Rechteckpuls der Stärke $1,0 E_0$ angeregt (siehe Abbildung 3.11 (a)). Das Mn₂Au schaltet daraufhin seinen Ordnungsparameter um 90° und das Py folgt diesem. Dies löst eine Präzession aus, die zu einer Auslenkung in M_z führt. Diese Bewegung konnte auch experimentell beobachtet werden und dient dem direkten Vergleich mit den Simulationen.

Für eine Grenzschnittkopplung von $J_{\text{inter}} = -3,8$ meV ergeben sich die in Abbildung 3.11 (b) dargestellten Antworten. Die simulierten Kurven wurden jeweils gemäß Gleichung 3.19 angepasst; daraus ergeben sich die Dämpfungskonstante Γ sowie die Resonanzfrequenz f_{res} .

Wie aus der LLG, Gleichung 2.8, zu erwarten, steigt Γ mit zunehmendem α_{Py} an (Abbildung 3.11 (c)), da der Dämpfungsterm stärker wirkt und somit die Relaxation beschleunigt. Gleichzeitig sinkt die Larmor-Frequenz ω (bzw.

3 PARAMETRISIERUNG DER SPINMODELLE

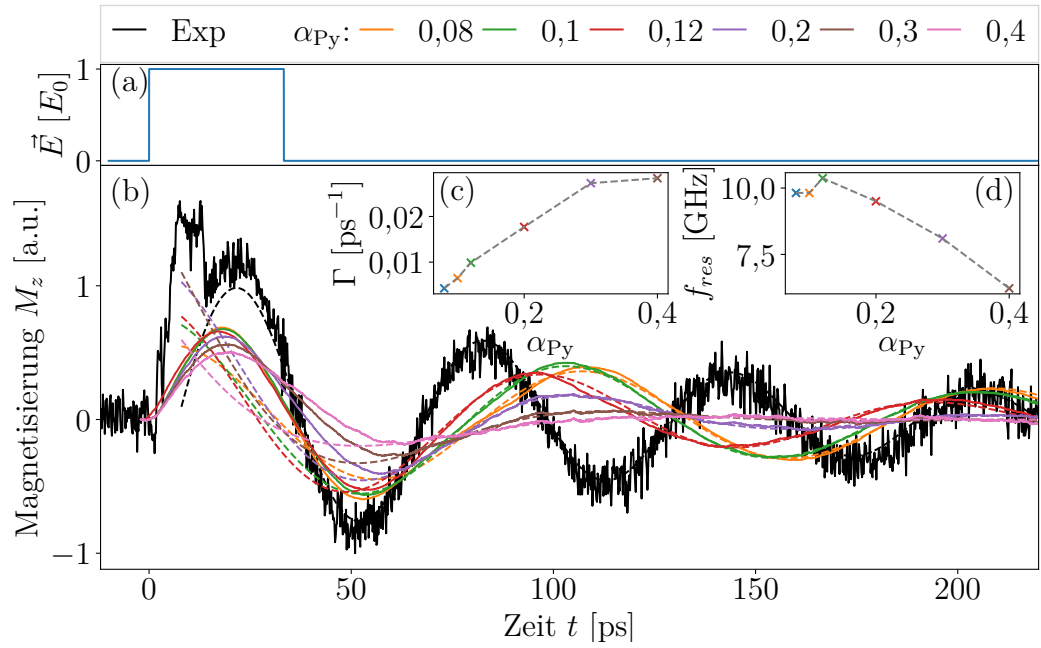


Abbildung 3.11: Die linearen Antworten (b) der M_z -Komponente des Py in der Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ bei verschiedenen Werten von α_{Py} auf den Rechteckpuls (a) mit $E = 1,0 E_0 = 3,6 \text{ MV m}^{-1}$. Die Dämpfungsparameter (c) und Resonanzfrequenzen (d) sind aus Anpassungen mit Gleichung 3.19 bestimmt worden.

3.4 MN₂AU|PY MODELL

f_{res}), wie in Gleichung 2.9 beschrieben, mit wachsendem α_{Py} merklich ab (Abbildung 3.11 (d)).

Im Experiment ergibt sich eine Eigenmode bei 16,41(4) GHz mit einer Dämpfung von 0,0084(3) ps⁻¹. Durch lineare Interpolation der simulierten Dämpfungswerte im Bereich $\alpha_{\text{Py}} = 0,08$ bis 0,3 wurde eine optimale Übereinstimmung bei $\alpha_{\text{Py}} = 0,13$ gefunden (siehe Abbildung 3.11 (c)).

Die Resonanzfrequenz des Py wird im letzten Schritt feinjustiert. Wieder schaltet ein Rechteckpuls, Abbildung 3.12 (a) mit der Stärke 1,0 E_0 den Néelvektor des Mn₂Au, woraufhin die Magnetisierung $\vec{M}$ des Py folgt. Aufgrund der starken Anregung kehrt das Py jedoch nach ca. 150 ps das Mn₂Au erneut um. Für die Bestimmung der Resonanzfrequenz von M_z durch die schnelle Fouriertransformation (*englisch*: fast fourier transformation, FFT) ist dieses Rückschalten jedoch irrelevant.

Zur Frequenzanalyse wird der Ausschwingvorgang (Abbildung 3.12 (b)) über 1000 ps hinweg simuliert.* Die resultierenden FFTs für $t > 200$ ps sind in Abbildung 3.12 (c) gemeinsam mit den entsprechenden Lorentz-Anpassungen dargestellt. Aus diesen Anpassungen wird die Resonanzfrequenz f_{res} extrahiert und in Abbildung 3.12 (d) zusammengefasst.

Einige Fit-Ergebnisse schlagen sichtbar fehl, was an den geringen Signalamplituden – etwa bei -14,0 meV – liegt. Die entsprechenden Datenpunkte sind in (d) rot markiert. Niedrige Kopplungsenergien führen zu Frequenzen, die von der tatsächlichen Resonanz deutlich abweichen. Die Kopplung bei -21 meV trifft mit 14,9 GHz die Resonanzfrequenz am zuverlässigsten und ist in Abbildung 3.12 (b) und (c) durch eine dicke Linie hervorgehoben. Die Stärke der Kopplung ist auch im Vergleich zu den Mn-Mn-Wechselwirkungen des Modells in der gleichen Größenordnung, siehe Tabelle 3.2.

Für die weiteren Simulationen konnten die Parameter im linearen Regime gut an das Experiment angepasst werden. Der folgende Abschnitt widmet sich der nichtlinearen Dynamik.

*Während die Simulation mit dem ursprünglichen *spinsim*-Code etwa vier bis sechs Wochen benötigte, kann *cuteLLG 2.0* dieselbe Simulation in rund 18 Stunden durchführen.

3 PARAMETRISIERUNG DER SPINMODELLE

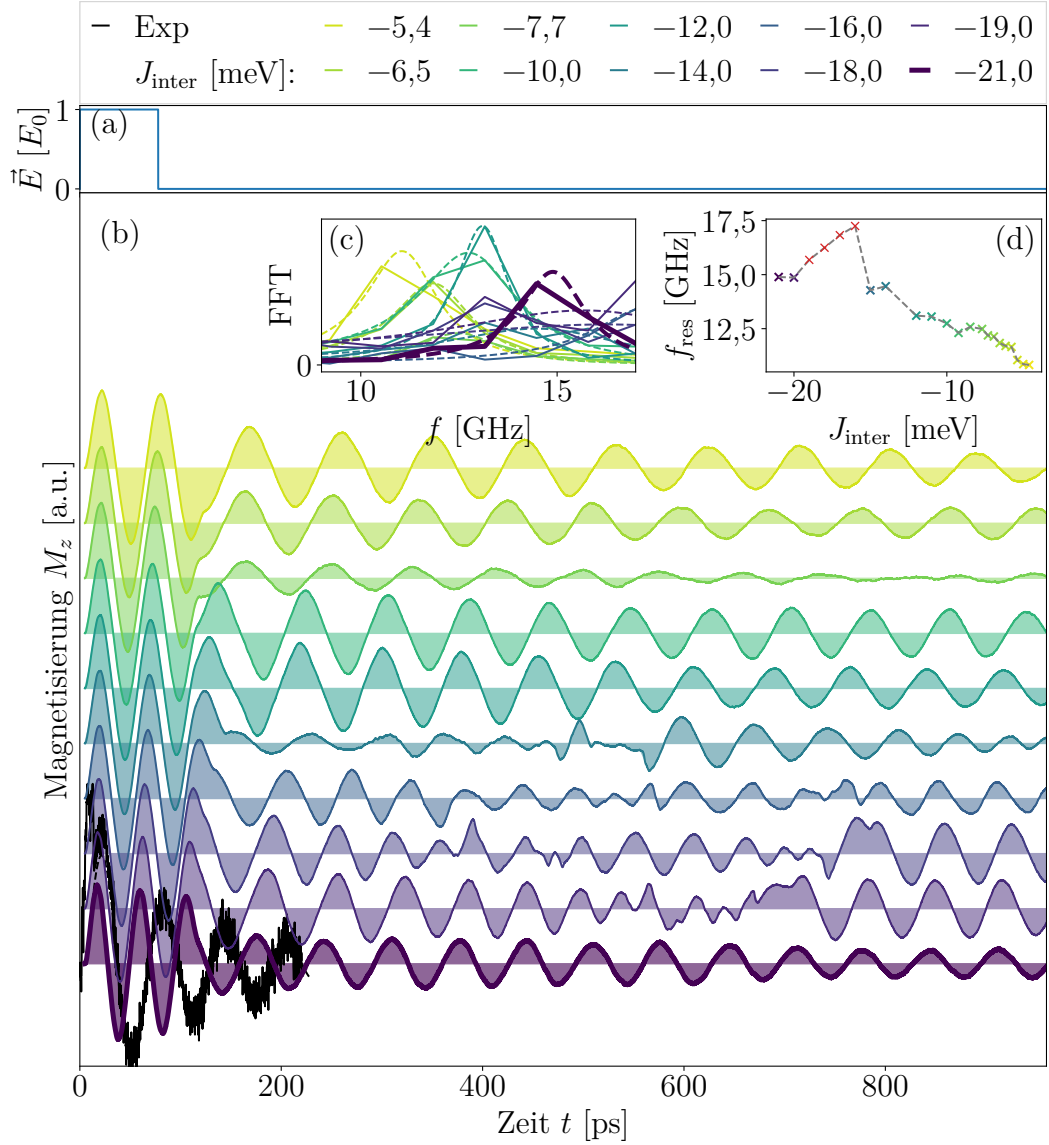


Abbildung 3.12: Die Resonanzfrequenzen der M_z -Komponente bei verschiedenen Grenzschnittkopplungen J_{inter} : (a) Der anregende Rechteckpuls mit einer Stärke von $1,0 E_0$, (b) die resultierenden M_z Kurven über der Zeit. In (c) die Fourierspektren der Kurven mit Lorentz-Anpassungen, aus denen die Resonanzfrequenzen (d) bestimmt werden. Die nicht aufgeführten Kopplungswerte sind in Abbildung A.6 abgebildet. Die dick hervorgehobene Linie markiert den später gewählten Kopplungswert, in schwarz dahinter die experimentelle Kurve.

4 THz-Puls induziertes Schalten

DAS im vorherigen Kapitel entwickelte Spinmodell zur Simulation NSOT-getriebener Schaltprozesse in Mn_2Au und $\text{Mn}_2\text{Au|Py}$ wird eingesetzt, um die mikroskopischen Vorgänge während des Schaltvorgangs zu analysieren. Im Rahmen der Modellentwicklung sind zunächst Schaltprozesse im reinen Mn_2Au untersucht worden und darauf aufbauend wurde das Modell zur Beschreibung der Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au|Py}$ erweitert.

Die so gewonnenen Ergebnisse ermöglichen einen Vergleich zwischen den Schaltcharakteristika des reinen Mn_2Au und der Doppelschicht. Die folgenden Abschnitte präsentieren die simulierten Schaltverläufe in Mn_2Au und $\text{Mn}_2\text{Au|Py}$. Sie zeigen dabei nicht nur die Zeitentwicklung der Ordnungsparameter, sondern auch die schichtaufgelöste Dynamik auf atomarer Ebene.

4.1 Reines Mn_2Au

Der Hamiltonian des reinen Mn_2Au ist bereits in Gleichung 3.15 aufgestellt worden. Er beinhaltet die induzierten Momente. Es wird ein System mit einer Grundfläche von $22 \times 22 \text{ nm}^2$ simuliert, das eine Dicke von 30 nm hat, was 66×66 Einheitszellen in der Grundfläche und 36 Einheitszellen in z -Richtung entspricht. Insgesamt werden ca. 600 000 Spins simuliert. Das System hat periodische Randbedingungen in x - und y -Richtung, in z offene. Die im Abschnitt 3.4.3 ermittelten Werte für die Spin-Bahn-Kopplung $\zeta = 109 \text{ meV}$ und für die Gilbert-Dämpfung $\alpha_{\text{Mn}} = 0,01$ werden verwendet*.

Es werden für verschiedene Feldstärken je ein Ensemble von 50 Schaltsimulationen mit dem THzP, Abbildung 4.1 (a), bei 300 K durchgeführt und aus diesen der mittlere Néelwinkel $\langle \Delta\varphi_l \rangle$ gebildet. Das Ensemble für jeden Feldstärkewert ist in Abbildung A.7 abgebildet, die einzelnen Simulationen

*Die vorgestellten Daten sind von dem *cuteLLG 2.0*-Code erzeugt. Die ersten Simulationen zum reinen Mn_2Au sind mit der modifizierten Version des CPU-Codes *spinsim* erstellt worden. Hierbei sind jedoch eine Elektronenlebensdauer τ von 50 fs und daraus abgeleitete REE-Konstanten genutzt worden. Die Konstanten sind in Anhang A.2.2 gelistet. Außerdem war der THzP noch eine analytische Funktion, die an einen anderen Messpuls angepasst wurde und so keine komplexeren Pulsformen darstellen konnte. Dieser ist in Dannegger^[83] (Abbildung 11.4.) abgebildet. Trotz der bereits auf S. 28 genannten Nachteile der GPU überwiegt der Geschwindigkeitsvorteil so stark, dass die Simulationen hier mit dem *cuteLLG 2.0*-Code wiederholt wurden, um über ausreichend viele Simulationen mitteln zu können. Das angepasste *spinsim*-Programm ist als eine Art *proof-of-concept* zu verstehen. Zudem trug die Modifizierung zweier verschiedener Programme zur Lösung der LLG in einem Vielteilchensystem zum tieferen Verständnis des Autors von der Funktionsweise Atomistischer-Spindynamik-Software bei.

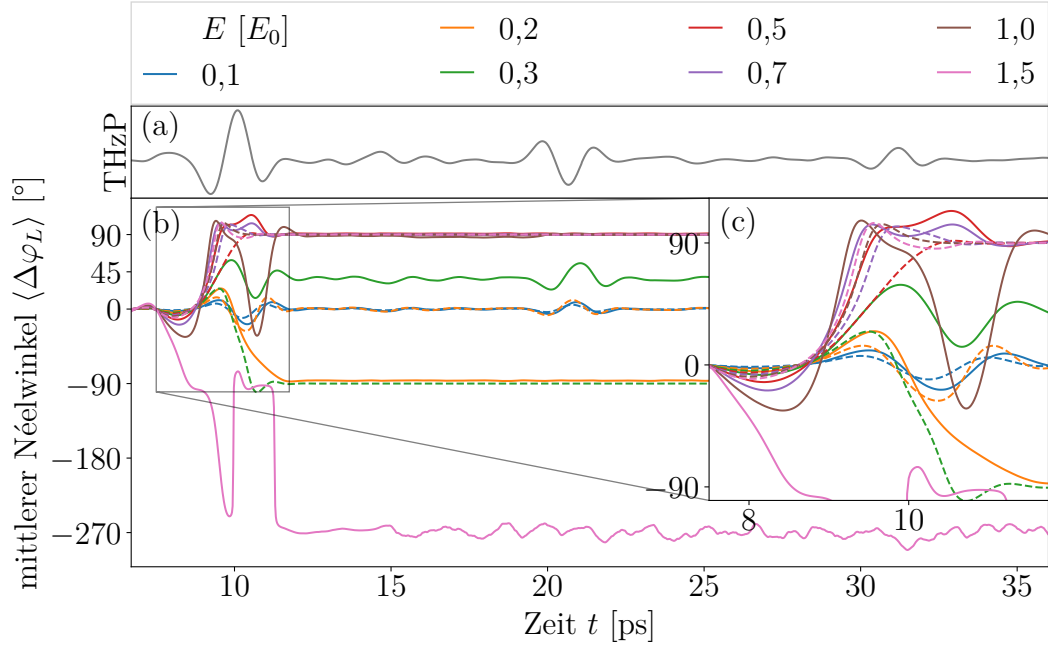


Abbildung 4.1: Die Auslenkung des mittleren Néelwinkels bei 300 K (durchgezogene Linien) $\langle \Delta \varphi_L \rangle$ in (b) in Reaktion auf den THzP (a) mit verschiedenen Feldstärken. Die gestrichelten Linien zeigen das deterministische Verhalten bei 0 K. Ein Detail des Schaltvorgangs ist in (c) abgebildet.

haben sehr ähnliche Trajektorien. Erst bei größeren Feldstärken driften die Simulationen mehr auseinander, da energetisch mehr Pfade möglich sind. Für 0,5 und 0,7 E_0 ist die Streuung am geringsten.

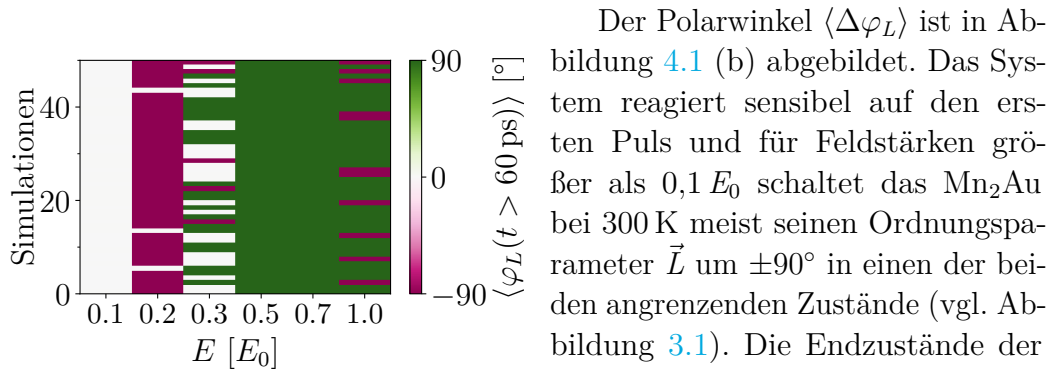


Abbildung 4.2: Übersicht über die Endzustände der Mn₂Au Simulationen bei verschiedenen Feldstärken E .

Der Polarwinkel $\langle \Delta \varphi_L \rangle$ ist in Abbildung 4.1 (b) abgebildet. Das System reagiert sensibel auf den ersten Puls und für Feldstärken größer als 0,1 E_0 schaltet das Mn₂Au bei 300 K meist seinen Ordnungsparemeter $\vec{L}$ um $\pm 90^\circ$ in einen der beiden angrenzenden Zustände (vgl. Abbildung 3.1). Die Endzustände der einzelnen Simulationen des Ensembles, ermittelt durch Mittlung von φ_L für Zeiten t größer als 60 ps, sind für verschiedene Feldstärken in Abbildung 4.2 nachzuvollziehen.

4.1 REINES Mn_2Au

Nur bei $1,5 E_0$ schaltet das Mn_2Au bei um -270° , mit einem kleinen Plateau bei -90° . Der Zustand von ca. 45° bei $0,3 E_0$ bedeutet, dass etwa die Hälfte der Simulationen um 90° geschaltet haben und die andere Hälfte nicht, vgl. Abbildung A.7. Der zweite Puls bei 20 ps hat auf die geschalteten Systeme keinen Einfluss mehr, da das $\vec{E}$ -Feld keine NSOT mehr erzeugt (vgl. Abbildung 2.5 mit $\vec{E} = [\bar{1}10]$ und $\vec{M} = [110]$). Das ist eine Bestätigung für eine korrekte Implementierung der induzierten Momente, da die Simulation die (nicht) erwartete Reaktion (nicht) hervorruft (keine NSOT, wenn $\vec{E} \perp \vec{L}$). Der um 45° geschaltete Feldstärkewert $0,3 E_0$ reproduziert diese Antwort ebenfalls und stärker als die Kurve mit $0,1 E_0$, da das Feld größer ist. Der zweite Puls reicht nicht aus, um die nicht geschalteten Simulationen doch noch zu Schalten.

Der Schaltprozess, detailliert in Abbildung 4.1 (c) gezeigt, dauert nur eine Pikosekunde. Ob um -90° oder $+90^\circ$ geschaltet wird, bestimmt die Polarisierung des $\vec{E}$ -Felds (vgl. dazu Abbildung 2.5 für $\vec{E}$ in $[\bar{1}10]$ und $[1\bar{1}0]$). Die ändert sich im THzP, Abbildung 4.1 (a), zwischen den Mini- und Maxima des ersten Pulses. Das unterschiedliche Schaltverhalten lässt darauf schließen, dass bei $0,2$ und $1,5 E_0$ das zweite bzw. erste Minimum schaltet, während bei den größeren Feldern das Maximum $\vec{L}$ bereits soweit rotiert, dass das $\vec{E}$ -Feld keine (ausreichend großen) NSOT erzeugen kann. Bei $0,5$ und $0,7 E_0$ rotiert $\vec{L}$ über den 90° -Zustand raus, wo bei ca. 11 ps eine Reaktion auf das zweite Minimum zu sehen ist. Besonders ausgeprägt ist sie bei $1,0 E_0$.

Wie die deterministische und die stochastische Kurve von $0,2 E_0$ zeigen, schaltet das Mn_2Au bei 300 K früher als bei 0 K. Es kann die thermische Energie nutzen, um über die Anisotropiebarriere zu gelangen. Bemerkenswert ist, dass diese thermische Anregung bei $1,5 E_0$ sogar zu einer -270° -Rotation führt, während der deterministische Pfad 90° schaltet. Sie gelangen über zwei verschiedene Wege in den gleichen Endzustand*.

Die Schaltvorgänge in Abbildung 4.3 zeigen ein ähnliches Verhalten wie die von Selzer u. a. ^[21] (Abb. 6) mit einem effektiven Magnetfeld simulierten Prozesse für eine Feldstärke von $E = 10 \text{ MV m}^{-1}$. Wie in der $0,2 E_0$ -Kurve ersichtlich, verkanten die Mn-Untergitter in z -Richtung gegeneinander, wie auch Selzer u. a. sehen konnten. Bemerkenswert ist, dass die Simulationen bereits bei einem etwa 30-fach kleineren Feld schalten und Prozesse wie das Zurückschalten ($1,0 E_0$) und Schalten über mehrere Zustände ($1,5 E_0$) simulieren können. Diese Prozesse können nicht mit einem statischen Zeeman-Feld modelliert werden.

*Da 360° -symmetrisch, siehe Abbildung 3.1.

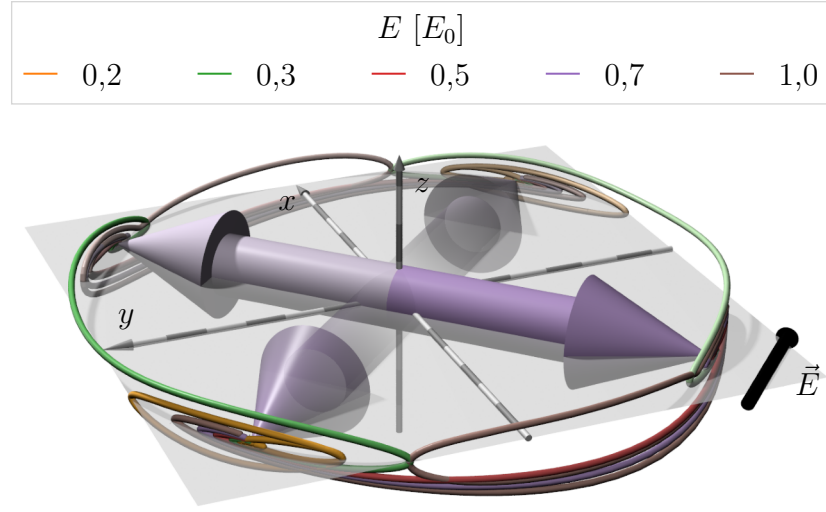


Abbildung 4.3: Die deterministischen Schaltpfade der beiden Mn-Untergittermagnetisierungen $\vec{M}_{A/B}$ bei verschiedenen Feldstärken $\vec{E}$. Die Pfeile zeigen den Start (blass)- und Endzustand der $0,7 E_0$ -Kurve an. Die M_z -Komponenten sind um den Faktor 20 skaliert.

Die schaltenden Prozesse relaxieren in den Endzustand mit der gleichen Präzessionsbewegung wie bei Selzer u. a. Diese Dynamik entspricht der des Annähern eines Spins an ein Magnetfeld, siehe Abbildung 2.2.

4.1.1 Schichtaufgelöst

Die atomistischen Vorgänge während eines Schaltprozesses sind noch nicht vollständig geklärt. In den experimentellen Proben kann der Prozess nur im Mittel über das gesamte Material untersucht werden. Die Simulationen bieten die Möglichkeit, auf einzelne Schichten oder sogar spezifische Spins zuzugreifen. Der im Folgenden betrachtete schichtaufgelöste Schaltprozess in Mn_2Au gibt Aufschlüsse darüber, wie die Spins ihre Orientierung ändern. Die Magnetisierung der einzelnen Schichten wird entlang der z -Achse betrachtet (offener Rand), da in x - und y -Richtung keine Symmetriebrechung stattfindet, vgl. Abbildung 3.5. Da das elektrische Feld auf alle Spins zeitgleich einwirkt, wird ein mehrheitlich kohärenter Schaltprozess und keine Inhomogenität innerhalb einer Schicht erwartet.

Die Magnetisierung $\vec{M}$ einer Schicht wird berechnet aus dem Mittelwert der Spins in der x - y -Ebene auf Höhe z . Die Magnetisierung der Mn_B -Spins ist dafür invertiert worden, wodurch im Prinzip die Néelordnung dargestellt

4.1 REINES Mn_2Au

wird. Der Polarwinkel $\Delta\varphi_L$ pro Schicht wird aus

$$\Delta\varphi_L = \arctan2(M_y, M_x) - \varphi_{L_0} \quad (4.1)$$

berechnet, wobei φ_{L_0} der Winkel des Anfangszustands ist und über alle Zeiten und Schichten gleich bleibt. Die Auslenkung $\angle M_z$ der M_z -Komponente wird aus $\angle M_z = \arcsin(M_z)$ berechnet.

Die Abbildung 4.5a zeigt eine der geschalteten Simulationen aus dem Ensemble mit einer Feldstärke E von $0,3 E_0$, über die für Abbildung 4.1 gemittelt wurde. In (a) zeigt der relative Azimuthalwinkel $\Delta\varphi_L$, dass die Dynamik zwischen 8 bis 11 ps stattfindet und das Mn_2Au aus dem Initialzustand um 90° schaltet. Die Entwicklung über die Zeit zeigt, dass der Schaltprozess kohärent abläuft. Es gibt keine sichtbaren Domänenwände.

Die Auslenkung $\angle M_z$ scheint auf den ersten Blick thermisch zu fluktuieren. Bei genauerer Betrachtung nimmt die Amplitude während des Schaltprozesses (8,4 bis 9,1 ps) an den offenen Rändern zu, vor- und nachher ist sie geringer. Ein ähnliches Verhalten ist in der in Abbildung 4.5b abgebildeten, nicht geschalteten Simulation zu sehen. In dieser ist ebenfalls kohärentes Verhalten sichtbar, mit dem die Spins auf die NSOT reagieren. Die Auslenkung $\angle M_z$ scheint auch bei 9,5 und 10,6 ps Extremwerte anzunehmen. Ein solches Bild zeigt sich auch bei der Betrachtung der $\angle M_z$ über der Zeit.

Wieder werden die zwei verschiedenen Simulationen aus Abbildung 4.5 betrachtet. In Abbildung 4.6 (a–c) ist die geschaltete Simulation und in Abbildung 4.6 (d–f) die, die nicht geschaltet hat, gezeigt. Um das thermische Rauschen in der M_z -Magnetisierung zu glätten wird ein Savitzky-Golay-Filter^[84] mit einer Fensterlänge von 100 Datenpunkten (entspricht 2 ps) und einem Regressionspolynom fünfter Ordnung verwendet. Die so geglätteten Magnetisierungen der beiden Mn-Untergitter sind in Abbildung 4.6 (b/e) abgebildet, in (a/d) ist der Néelwinkel $\Delta\varphi_L$ zu sehen. In den eingefärbten Bereiche haben beide Untergitter gleiches Vorzeichen, sie verkanten. In (c/f) ist der THzP zu sehen, dessen erster Puls in drei Abschnitte eingeteilt ist.

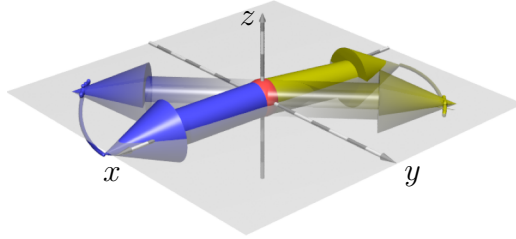
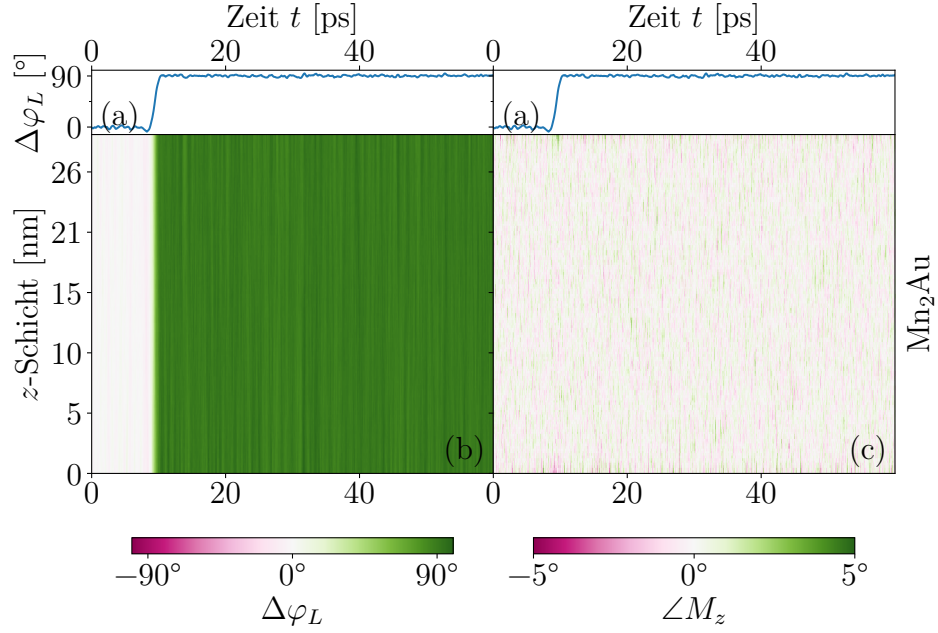
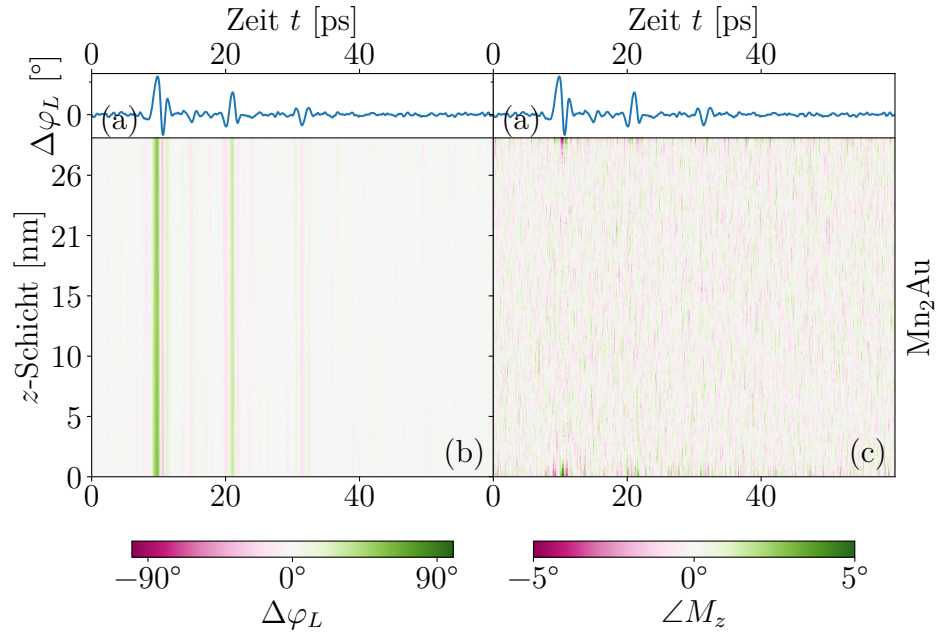


Abbildung 4.4: Schaltpfade in reinem Mn_2Au bei 9,36 ps. Die M_z -Komponente ist mit dem Faktor 20 skaliert.

4 THZ-PULS INDUZIERTES SCHALTEN



a Die geschaltete Simulation.



b Die nicht-geschaltete Simulation.

Abbildung 4.5: Schichtaufgelöste Anregungen des Mn₂Au bei $0,3 E_0$. In beiden Abbildungen a und b ist je in (a) der $\Delta\varphi_L$ über der Zeit aufgetragen. In den Graphen (b/c) sind für verschiedene Zeiten der pro Schicht in z -Richtung gemittelte Polarwinkel $\Delta\varphi_L$ (b) und die Auslenkung $\angle M_z$ (c) abgebildet.

4.1 REINES Mn_2Au

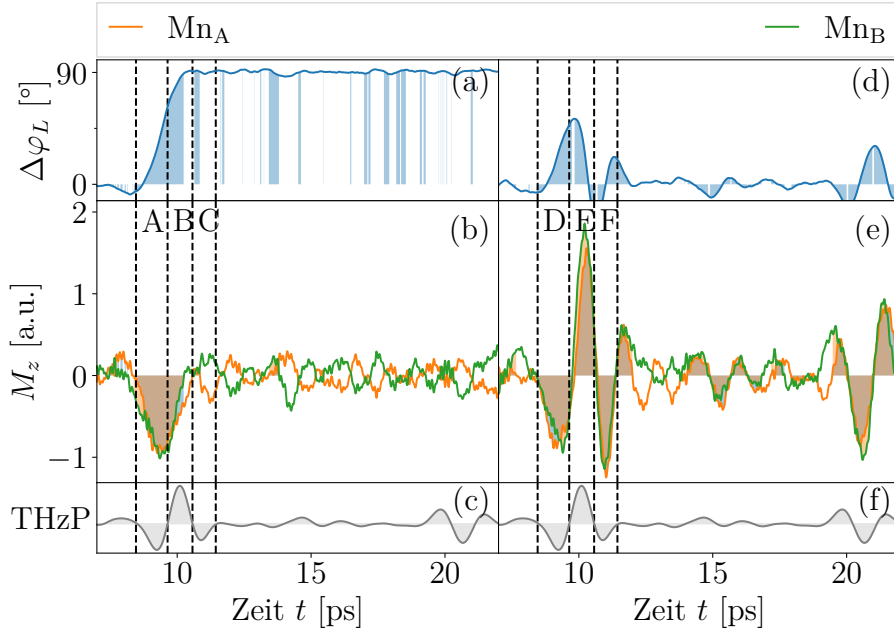


Abbildung 4.6: Die M_z -Verkantung bei einer Feldstärke von $0,3 E_0$ je einer Simulation die geschaltet ist, (a–c), und die nicht geschaltet ist, (d–f). Erstere ist in Abbildung 4.5a abgebildet. In (a/d) ist der Néelwinkel $\Delta\varphi_L$ abgebildet. Die M_z der beiden Untergitter sind in (b/e) zu sehen, Bereiche, in denen beide gleiches Vorzeichen haben, sind eingefärbt (gleiche Einfärbungen in (a/d)). Der THzP ist in (c/f) abgebildet.

In Abschnitt A erzeugt der THzP eine starke Verkantung der Untergitter, die für 9,36 ps in Abbildung 4.4 zu sehen ist, in deren Folge der Schaltprozess startet. Im Abschnitt B wechselt das Vorzeichen des THzP und die Verkantung nimmt ab. Da die Spins bereits um mehr als 45° rotiert sind, verlieren die induzierten Momente an Stärke, siehe Gleichung 2.22. Der zweite Vorzeichenwechsel des THzP in Abschnitt C hat nur einen geringen Einfluss, die Untergitter verkanten minimal aufgrund thermischer Schwankungen. Dies ist auch bei dem zweiten Puls bei 20 ps zu sehen. Anders in Abschnitt D: Der Puls sorgt zwar für eine etwa gleich starke Verkantung, die führt jedoch nicht schnell genug zu einer Änderung von $\Delta\varphi_L$ und sowohl die NSOT, wie auch die Anisotropie, verhindern das Schalten in Abschnitt E. In Abschnitt F wird eine noch stärkere Verkantung als in D erzeugt, die aber zu keinem Schaltprozess führt.

Zusammen mit der schichtaufgelösten Betrachtung zeigt sich, dass das Mn_2Au in der Ebene kohärent schaltet, die M_z -Magnetisierung aber nur durch

einige wenige Spins verursacht wird. Die Spins mit großen M_z -Komponenten an den Rändern sind gerade gegenläufig, weswegen sie keinen (großen) Beitrag zur Gesamtmagnetisierung leisten. Auch für andere Feldstärken ($0,7$ und $1,0 E_0$)* bestätigt sich diese Beobachtung.

4.2 $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$

Nachdem bereits im letzten Abschnitt das reine Mn_2Au -Modell auf sein Schaltverhalten untersucht worden ist, steht jetzt die Doppelschicht im Fokus. Zentrale Motivation hinter der Entwicklung des Doppelschichtmodells ist es, die atomistischen Dynamiken während dem Schaltprozess des Experiments, siehe Abbildung 3.4, darzustellen und einzuordnen. Im Vergleich mit dem Experiment in Berlin wird bestimmt, in welchen Punkten unser Modell mit den Messungen übereinstimmt und sie erklärt. Besonders interessant ist, wie die Py-Magnetisierung sich bei Schaltprozessen des Mn_2Au verhält. Nach einer Beschreibung der Systemparameter wird die Schwellenstärke des elektrischen Felds $\vec{E}$, ab dem die Doppelschicht schaltet, bestimmt. Im Weiteren wird der Schaltprozess wieder schichtaufgelöst, wie in Abbildung 4.5, betrachtet, um Änderungen in den atomistischen Vorgängen zu untersuchen.

Systemparameter: Der im Experiment aus Berlin^[60] verwendete Dünnfilm hat eine Mn_2Au -Schichtdicke von 30 nm, was in dem Modell ≈ 36 Einheitszellen entspricht. Die Py-Schichtdicke beträgt 6 nm, die ≈ 18 Einheitszellen entspricht. In der Ebene wird eine Fläche von $22 \times 22 \text{ nm}^2$ simuliert. So ergibt sich eine Gittergröße von $66 \times 66 \times 216$, wobei eine Einheitszelle $1 \times 1 \times 4$ groß ist. Die Temperatur beträgt 300 K. Für die Spin-Bahn-Kopplung und die Gilbert-Dämpfung des Mn_2Au werden die Parameter des reinen Materials, siehe Abschnitt 4.1, übernommen. Wie in Abschnitt 3.4.3 festgestellt wurde, hat das Py in dem Modell eine Gilbert-Dämpfung von $\alpha_{\text{Py}} = 0,13$. Die Grenzschichtkopplung J_{inter} beträgt $-21,0 \text{ meV}$. Das konstante Magnetfeld B_{const} ist, außer explizit benannt, ausgeschaltet.

4.2.1 Dynamik der Doppelschicht

Zur Untersuchung der Dynamik der Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ werden für Feldstärken von $0,1$ bis $2,0 E_0$ je ein Ensemble von 50 Simulationen aufgenommen und aus diesen die Schaltwahrscheinlichkeit p_{sim} berechnet. Die

*Die zugehörigen Graphen sind im Anhang A.7 zu finden, Abbildung A.8 und Abbildung A.9.

4.2 $\text{Mn}_2\text{Au|Py}$

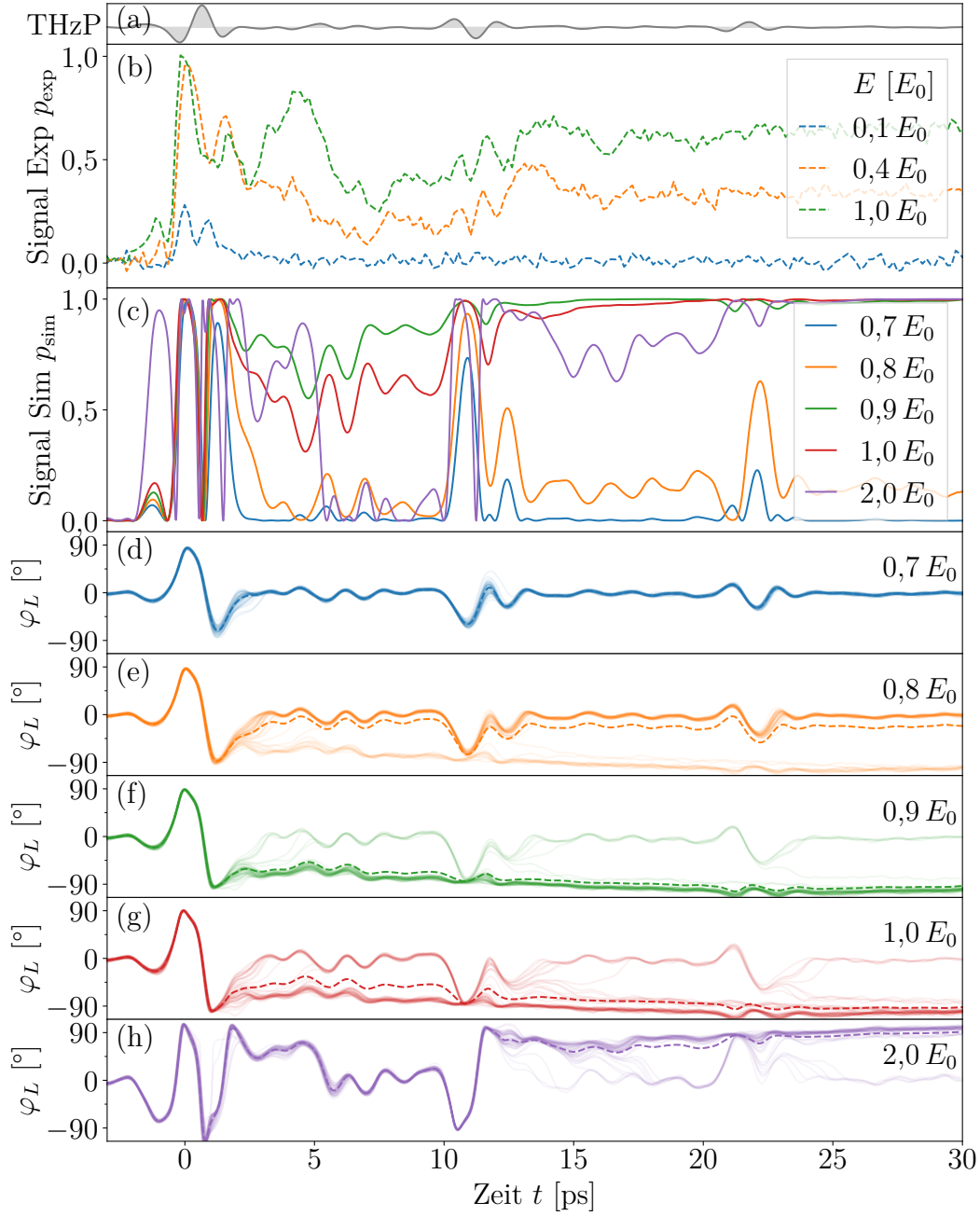


Abbildung 4.7: Bestimmung der Grenzfeldstärke des THzP (a) in der Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au|Py}$ im Vergleich zu den experimentellen Daten bei 300 K. In (b) ist das p_{exp} -Signal des Experiments gezeigt, wie auch in Abbildung 3.4. Die simulierten Kurven mit der Schaltwahrscheinlichkeit p_{sim} , Gleichung 3.5, sind in (c) zu sehen. Die bei verschiedenen Feldstärken aufgenommenen Ensembles von 50 Kurven sind in (d–h) abgebildet, wobei die gestrichelte Linie den mittleren Néelwinkel $\langle \varphi_L \rangle$ des Ensembles darstellt, der in (c) abgebildet ist.

resultierenden Daten sind in Abbildung 4.7 (c) abgebildet. Im Vergleich dazu sind die auch in Abbildung 3.4 dargestellten p_{exp} -Signale aus dem Experiment in Abbildung 4.7 (b) zu finden. Die bereits dort festgestellte Dynamik, dass nach dem ersten Puls des THzP p_{exp} auf ein Plateau relaxiert, können wir erstmals für $0,8 E_0$ beobachten. Für größere Feldstärken steigt der Wert auf 1.

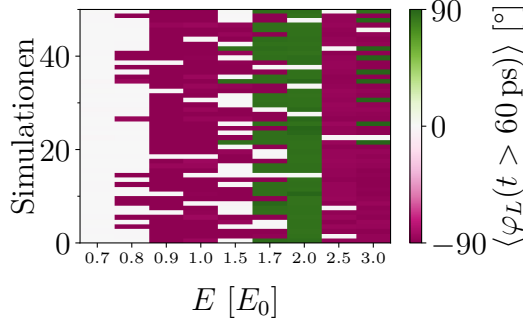


Abbildung 4.8: Übersicht über die Endzustände der $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ Simulationen bei verschiedenen Feldstärken.

In der $1,0 E_0$ Kurvenschar, Abbildung 4.7 (g), schaltet der erste Puls des THzP die meisten Simulationen, die Kurve bei doppelter Feldstärke, Abbildung 4.7 (h) bleibt bis zum zweiten Puls einheitlich und schaltet erst dann. Da diese aber eine invertierte Polarisation hat, dreht das $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ um 90° statt -90° . Der zweite Puls ist etwa halb so stark wie der erste, was die Verdopplung erklärt. Diese Beobachtung zeigt, dass die induzierten Momente die erwartete Symmetrie widerspiegeln, sowohl

in der Feldstärke, wie auch in der Polarisation.

Die Prozesse um die Schwellenfeldstärke zeigen die stochastische Natur auf: bei $0,7 E_0$, Abbildung 4.7 (d), schaltet kein Prozess. Es gibt auch keine abtrünnigen Kurven, es ist eine fast schon deterministische Kurve. Bei Erhöhung der Feldstärke auf $0,8 E_0$, Abbildung 4.7 (e), oder $0,9 E_0$, Abbildung A.11 (f), ist die stochastische Natur deutlicher zu sehen. Der erste Puls schaltet die meisten Trajektorien (nicht), bei dem zweiten finden nur noch einzelne Nachzügler ihren Endzustand. Aus diesem Grund gibt es nach dem ersten Puls das Plateau in p_{sim} , Abbildung A.11 (c), welches beim zweiten Puls steigt. Der Relaxationsprozess in den experimentellen Daten, der bei den Feldstärken $0,4 E_0$ und $1,0 E_0$ in Abbildung A.11 (b) zu sehen ist, kann so erklärt werden. Die Schaltpfade in Abbildung 4.7 (e) und (f) sehen ähnlich aus, welchen die Mehrheit der Simulationen nimmt, ändert sich aber schlagartig. Für $1,0 E_0$ ist der mittlere Néelwinkel mehr zwischen den beiden Hauptfaden, was darauf hindeutet, dass wieder weniger Simulationen schalten.

Auffällig ist der scharfe Übergang, mit dem die Schaltwahrscheinlichkeit p_{sim} von 0 bei einer Anregung mit $0,7 E_0$ auf 1 bei $0,9 E_0$ ansteigt. Im Vergleich dazu zeigt das Experiment ein deutlich anderes Verhalten: Dort wächst das p_{exp} -Signal nur allmählich mit der Feldstärke, während die Simulation einen abrupten Wechsel darstellt. Die Feldstärke im Experiment ist, anders als in

4.2 $\text{Mn}_2\text{Au|PY}$

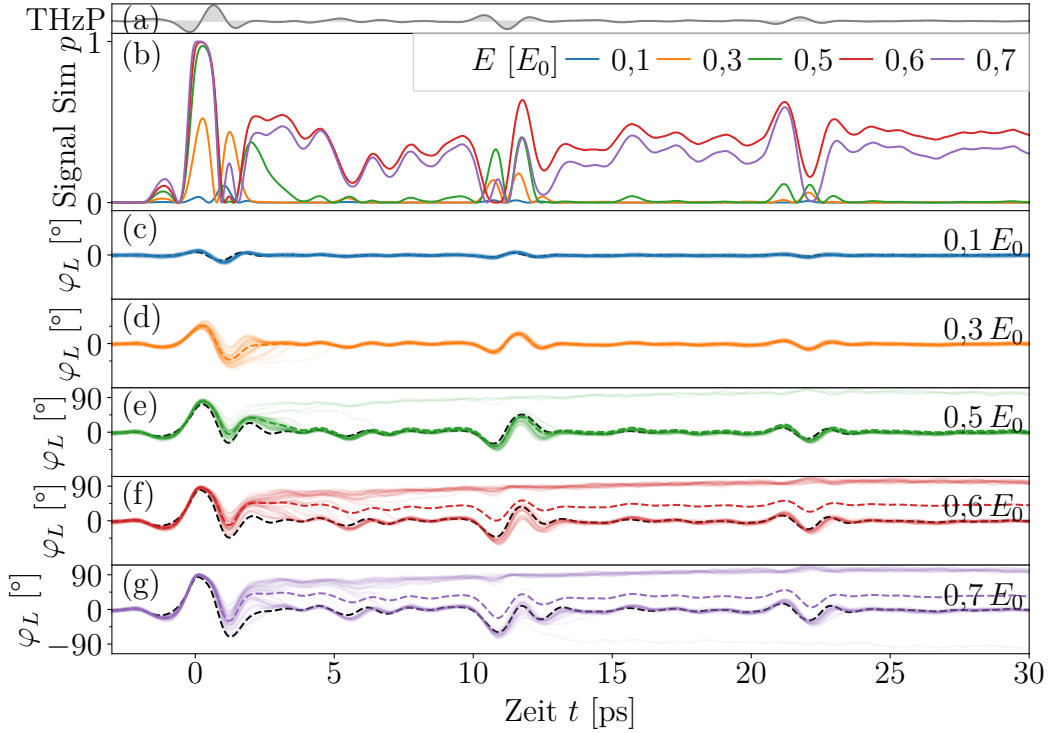


Abbildung 4.9: Schaltprozesse in der Doppelschicht bei 500 K. In (a) ist der anregende THzP und in (b) das resultierende p -Signal abgebildet. Die Ensembles für die verschiedenen Feldstärken sind mit den mittleren Néelwinkeln bei 500 K (gestrichelt) und 300 K (siehe Abbildung 4.7, schwarz gestrichelt, außer für $0,3 E_0$) dargestellt.

den Simulationen, nicht über die ganze Probe homogen. Das bis zu 2,5-mal größere Feld kann zu solchen Effekten führen.

Das stochastische Verhalten wird in der Simulation ausschließlich durch die Temperatur beeinflusst. Eine Erhöhung der Temperatur auf 500 K führt zu einer geringeren Grenzfeldstärke als bei 300 K, wie in Abbildung 4.9 ersichtlich ist. Bereits bei $0,5 E_0$ treten erste Schaltprozesse auf, und für größere Feldstärken von $0,6$ und $0,7 E_0$ bildet sich ein Plateau im p -Signal aus, ähnlich wie in den Experimenten und Simulationen in Abbildung 4.7 (b) und (c). Das Plateau steigt langsamer mit der Feldstärke als bei 300 K, siehe Abbildung 4.9 (b).

Eine Erhöhung der Temperatur kann beispielsweise durch die vom THzP-Puls deponierte Energie in der Probe verursacht werden.

Was alle Ensembles gemeinsam haben ist, dass sich die Dynamik grundlegend von der des reinen Mn_2Au in Abbildung 4.1 unterscheidet. Während

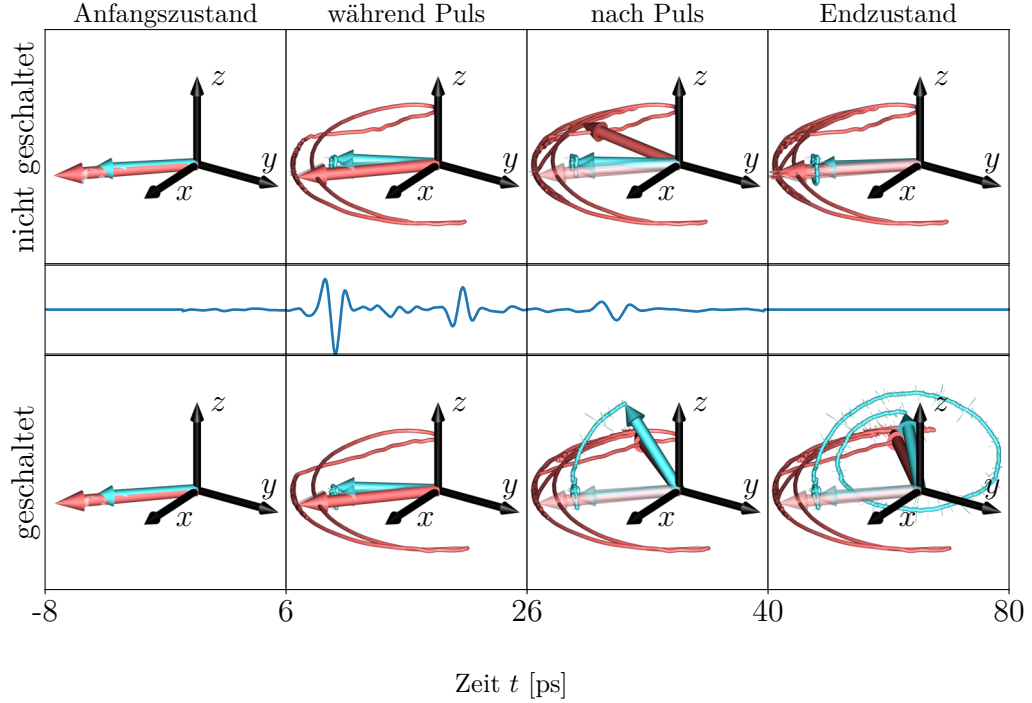


Abbildung 4.10: (Kein-)Schaltprozess einer $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ -Doppelschicht, in blau die Magnetisierung $\vec{M}$ des Py und in rot der Néelvektor $\vec{L}$ des Mn_2Au . In der Mitte ist schematisch der THzP aus Abbildung 3.3 gezeichnet. Wie leicht zu sehen ist, sind die Schaltpfade bis etwa 40 ps sehr ähnlich. Falls das Mn_2Au schaltet präzediert $\vec{M}$ markant um $\vec{L}$, falls nicht reorientiert sich $\vec{L}$ parallel zu $\vec{M}$.

dort der Schaltprozess nur wenige Pikosekunden dauert und der erste Puls den größten Einfluss hat, sind die Dynamiken in der Doppelschicht langsamer und der zweite Puls hat mehr Einfluss. Offenbar ist der beobachtete Effekt auf den Einfluss des Py auf das Mn_2Au zurückzuführen. Im Folgenden wird dieser Zusammenhang genauer betrachtet.

4.2.2 Die zwei Wege

Um den Effekt des Py auf das Mn_2Au nachzuvollziehen, sind zwei verschiedene Kurven des Ensembles bei $1,0 E_0$ aus Abbildung A.11 (g) in Abbildung 4.10 dargestellt. In rot ist der Néelvektor $\vec{L}$ und in blau die Py-Magnetisierung $\vec{M}$ abgebildet. Die Schaltpfade sind bis etwa 26 ps nahezu identisch, $\vec{L}$ oszilliert zwischen -90° und 90° hin und her. Danach fängt entweder $\vec{M}$ an um $\vec{L}$ zu präzedieren oder $\vec{L}$ schaltet zurück in den Initialzustand $[1\bar{1}0]$, wo $\vec{M}$ eine

4.2 MN₂AU|PY

kleine Präzession ausführt.

Die Präzession des Py führt zu einer Auslenkung in der z -Richtung. Im Verfahren der Anpassung der Grenzschnittkopplung in Abschnitt 3.4.3 ist das Modell an eben die resultierende Frequenz angepasst worden. Ein Verändern der Frequenz bzw. Grenzschnittkopplung führt dazu, dass die Simulationen ein anderes Schaltverhalten zeigen. Wird die mit dem *spinsim*-Code berechnete (falsche) Grenzschnittkopplung, Abbildung 3.9, verwendet, schaltet fast keine Simulation bei bis zu $3,5 E_0$ großen Feldstärken, siehe Abbildung 4.11. Die einzelnen Pfade und mittleren Polarwinkel sind in Abbildung A.10 zu finden. Daraus folgt, dass die Grenzschnittkopplung einen großen Einfluss auf den Schaltprozess hat.

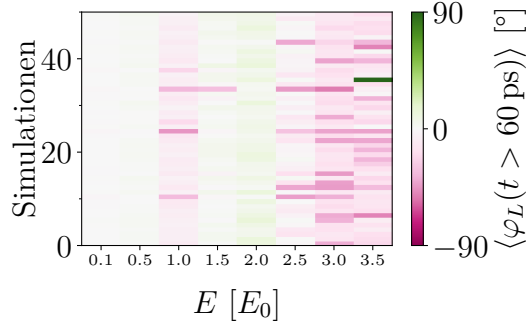


Abbildung 4.11: Übersicht über die Endzustände der Mn₂Au|Py-Simulationen bei verschiedenen Feldstärken und der Grenzschnittkopplung $J_{\text{inter}} = -3,8 \text{ meV}$.

Falls die Feldstärke ausreicht um das Mn₂Au zu schalten, zeigt die Betrachtung aus Abbildung 4.10, dass es zwei mögliche Wege gibt: Entweder das Py folgt dem Mn₂Au, oder das Py bewirkt ein rückstellendes Moment auf das Mn₂Au. Mit einer schichtaufgelösten Betrachtung wird im folgenden Abschnitt der Schaltprozess in der Doppelschicht auf atomistischer Ebene nachvollzogen.

Die Präzession ist vergleichbar mit dem in Abbildung 2.2 dargestellten Fall eines Makrospins (hier die Py-Magnetisierung), der unter dem Einfluss eines externen Magnetfelds $\vec{B}$ (hier die Grenzschnitt-Anisotropie) steht. Mit der daraus folgenden Gleichung 2.9 für die Resonanzfrequenz $\omega = 2\pi \cdot 14,9 \text{ GHz}$ kann das vom Mn₂Au erzeugte effektive Feld B abgeschätzt werden. Mit $\gamma = 1,760\,859\,630\,23 \cdot 10^{11} \text{ rad/s/T}$ folgt ein Feld der Stärke 541 mT.

4.2.3 Schichtaufgelöst

Während die Schaltprozesse in reinem Mn₂Au, wie sowohl die Untersuchungen von Selzer u. a.^[21] als auch das erweiterte Modell zeigen konnten, kohärent ablaufen, verändert sich das Schaltverhalten des Mn₂Au in der Doppelschicht deutlich. Wie bereits für das reine Mn₂Au wird wieder die Magnetisierung

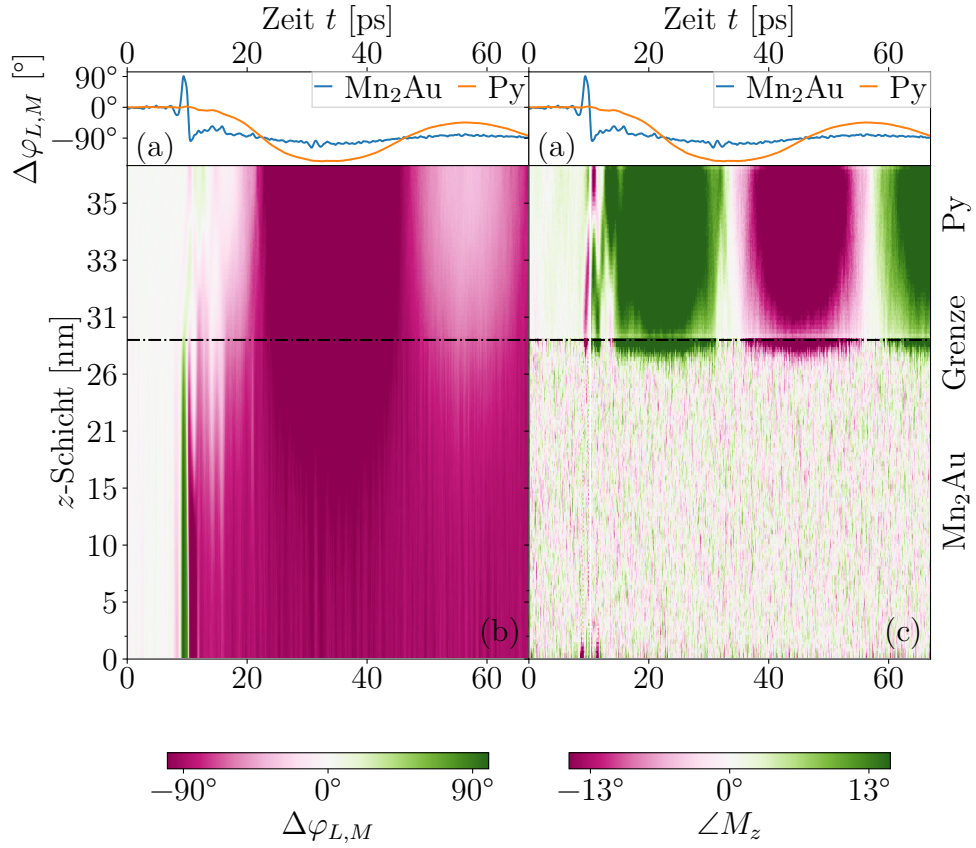


Abbildung 4.12: Schichtaufgelöste Anregung des $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ bei $1,0 E_0$, die Simulation schaltet beim ersten Puls des THzP. In (a): $\Delta\varphi_{L,M}$ über der Zeit aufgetragen. In den mittleren Graphen sind für verschiedene Zeiten der pro Schicht in z -Richtung gemittelte Polarwinkel $\Delta\varphi_{L,M}$ (b) und die Auslenkung $\angle M_z$ (c) abgebildet. Die z -Komponente des Mn_2Au ist um den Faktor 5 skaliert.

der einzelnen Schichten, Gleichung 4.1, entlang der z -Achse betrachtet, da in x - und y -Richtung keine Symmetriebrechung stattfindet. Die Größen werden wie in Abschnitt 4.1.1 verwendet.

In Abbildung 4.12 und Abbildung 4.13 ist in (a) der Polarwinkel $\Delta\varphi_{L,M}$ des Mn_2Au bzw. Py über der Zeit t aufgetragen. Darunter ist für verschiedene Zeiten der gemittelte Polarwinkel, Gleichung 4.1, und der Azimutalwinkel $\angle M_z$ der z -Komponente des Néelvektors bzw. der Magnetisierung der jeweiligen Schicht aufgetragen. Die beiden Kurven sind Teil des Ensembles der Anregungen bei einer Feldstärke von $1,0 E_0$, die in Abbildung 4.7 dargestellt sind. Die Kurve in Abbildung 4.12 schaltet beim ersten Puls des THzP um

4.2 MN₂AU|PY

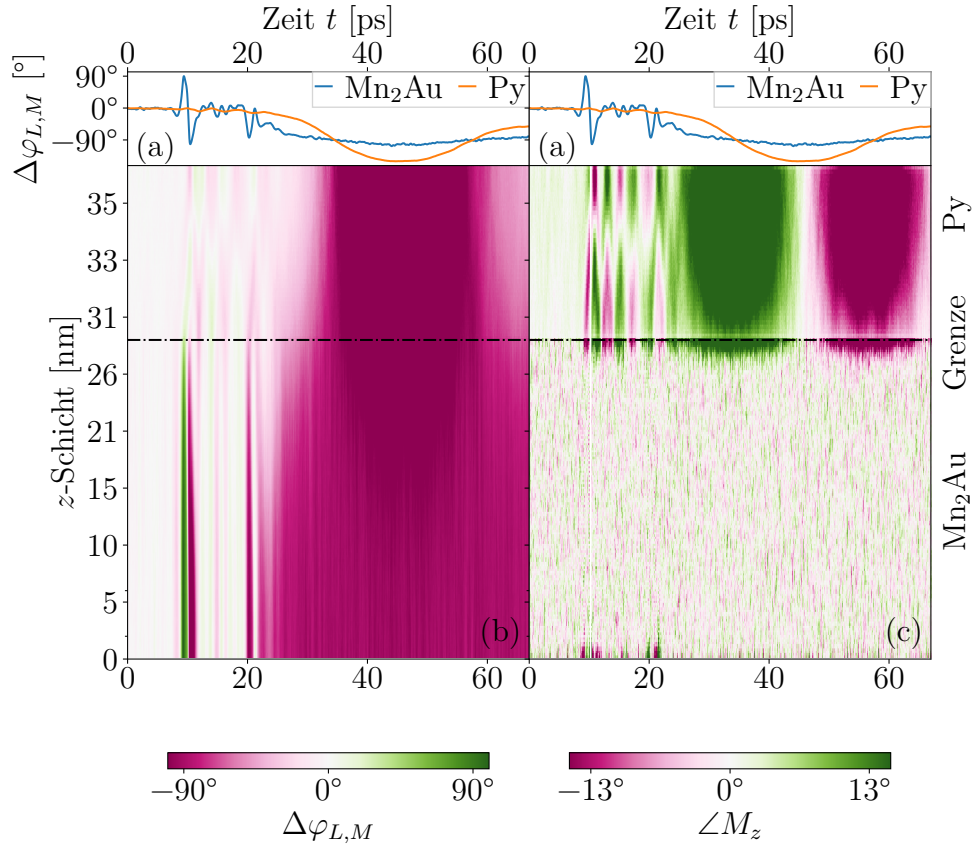


Abbildung 4.13: Schichtaufgelöster Schaltprozess des Mn₂Au|Py bei $1,0 E_0$, die Simulation schaltet beim zweiten Puls des THzP. In (a): $\Delta\varphi_{L,M}$ über der Zeit aufgetragen. In den mittleren Graphen sind für verschiedene Zeiten der pro Schicht in z -Richtung gemittelte Polarwinkel $\Delta\varphi_{L,M}$ (b) und die Auslenkung $\angle M_z$ (c) abgebildet. Die z -Komponente des Mn₂Au ist um den Faktor 5 skaliert.

-90° , die in Abbildung 4.13 abgebildete Kurve beim zweiten Puls.

Die ultraschnelle Dynamik des Mn₂Au macht sich auch in der Doppelschicht bemerkbar, wie sich an dem weniger als eine Pikosekunde dauernden Schaltprozess in Abbildung 4.12 (b) und Abbildung 4.13 (b) bei 10 ps zeigt.

An der Grenzschicht ist erkennbar, dass die erste markante Auslenkung des Mn₂Au bei ca. 8 ps (dunkelgrün) sowohl in Abbildung 4.12 (b) wie auch in Abbildung 4.13 (b) eine stehende Spinwelle im Py induziert. Die direkt darauffolgende Auslenkung (dunkellila), in Richtung -90° , schaltet in Abbildung 4.12 (b) das Mn₂Au um -90° . Entlang der z -Achse betrachtet ist zu sehen, dass sich eine etwa 15 nm lange Domäne aufbaut. Die Mn-Atome,

welche am weitesten von der Grenzschicht entfernt sind, schalten bereits, während die Atome nah an der Grenzschicht noch nicht schalten. Erst ca. 10 ps später schalten auch die grenzschichtnahen Mn-Atome und erzeugen die Präzessionsbewegung im Py. Die Präzession ist auch in der z -Komponente, Abbildung 4.12 (c), zu sehen. Die Magnetisierung des Py beeinflusst die Atome bis etwa 2 nm von der Grenzschicht entfernt.

In Abbildung 4.13 ist der gleiche Prozess bei dem zweiten Puls des THzP zu erkennen.

Die von dem ersten Puls erzeugte Spinwelle scheint die Länge der Domänenwand im Mn_2Au steuern. Die Welle hat ihre Maxi- und Minima jeweils an der Grenzschicht und der Oberfläche des Py (bei 36 nm), in der Mitte ist ein Knoten. Erst wenn das Py dem Mn_2Au folgt, wie in dem Schaltprozess in Abbildung 4.10 gezeigt, überlagert die Präzessionsbewegung die stehende Welle entlang von z . Deswegen verschwindet sie in Abbildung 4.12 bereits bei ca. 15 ps und die in Abbildung 4.13 bei ca. 25 ps.

Mit der Ausbildung einer Domänenwand ist ein zweiter Erklärungsansatz für die in Abbildung 4.7 (b/c) beobachteten Relaxionsprozesse gefunden: Im Mittel über die Mn_2Au Spins scheint der mittlere Néelwinkel zu relaxieren. Dieser Prozess ist in Abbildung 4.12 (a) in sehr schwacher Form zu beobachten.

In der schichtaufgelösten Darstellung des Polarwinkels $\Delta\varphi_{L,M}$ zeigt sich, wie vermutet, dass der Schaltprozess in Mn_2Au keineswegs mehr kohärent erfolgt. In dem Py wird durch das Mn_2Au Spinwellen erzeugt, andersrum entsteht eine 90° Domänenwand im Mn_2Au .

4.2.4 Auswirkungen eines externen Magnetfelds

Nachdem bereits untersucht worden ist, wie mit Hilfe der elektrisch induzierten NSOT der Ordnungsparameter des Mn_2Au bzw. die Doppelschicht manipuliert werden kann, bleibt noch eine weitere Möglichkeit: Das externe Magnetfeld $\vec{B}_{\text{const}}$, siehe Abbildung 3.5, hat einen Einfluss auf das ferromagnetische Py. Im Folgenden wird untersucht, ob mit dem Magnetfeld der Schaltprozess unterbunden werden kann.

Damit das Py in seinem Initialzustand mit dem $\vec{B}_{\text{const}}$ fixiert werden kann, ist $\vec{B}_{\text{const}}$ in $[1\bar{1}0]$ -Richtung parallel zu dem Py ausgerichtet, vgl. Abbildung 3.5. Dadurch bewirkt der Zeeman-Term des Hamiltonians 3.16 ein rückstellendes Drehmoment in den Anfangszustand.

Für Magnetfeldwerte von 0 bis 980 mT sind in dieser Arbeit jeweils 50 Schaltsimulationen durchgeführt und gemittelt worden. In Abbildung 4.14 (a) sind die Schaltwahrscheinlichkeiten p , Gleichung 3.5, über der Zeit aufgetragen.

4.2 MN₂AU|PY

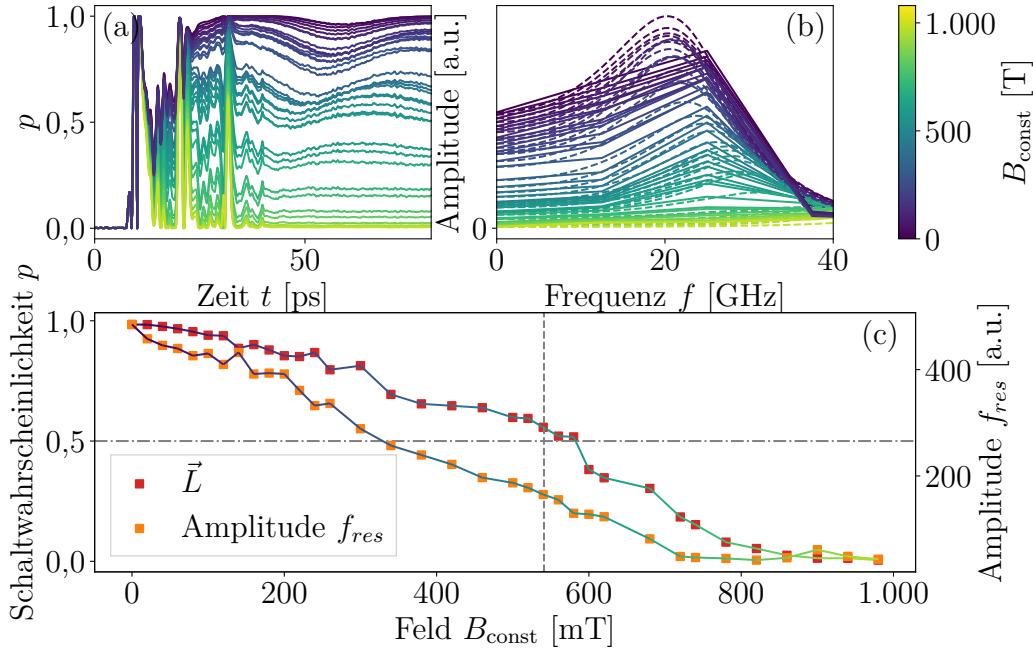


Abbildung 4.14: Änderung der Schaltwahrscheinlichkeit p in Abhängigkeit von dem externen Magnetfeld $\vec{B}_{\text{const}}$. In (a) die Schaltwahrscheinlichkeiten und in (b) die FFT-Spektren mit angepassten Lorentz-Funktionen. (c): Die Entwicklung von p über dem $\vec{B}_{\text{const}}$. Die vertikale Linie markiert 541 mT (vgl. Abschnitt 4.2.2).

Aus p wird durch Mittlung von $p(t > 36 \text{ ps})$ die Stufenhöhe bestimmt. Sie sinkt mit zunehmenden $\vec{B}_{\text{const}}$, ebenso wie die Amplitude der FFT, die in Abbildung 4.14 (b) abgebildet sind. An die Spektren wurde jeweils eine Lorentz-Funktion angepasst. In Abbildung 4.14 (c) ist die daraus resultierende FFT-Amplitude der Resonanzfrequenz des Py und die Stufenhöhe von p über dem externen Magnetfeld aufgetragen. Mit zunehmenden magnetischen Feld nimmt sowohl die Schaltwahrscheinlichkeit, wie auch die Amplitude der M_z -Resonanzfrequenz, ab.

Die Stufenhöhe und die Amplitude stehen vermutlich in direktem Zusammenhang, was zu der vorherigen Beschreibung eines Schaltprozesses in Abbildung 4.10 passt. Das Py präzediert dort nur im Schaltfall mit einer großen Amplitude. Daraus lässt sich schließen, dass ein erfolgreicher Schaltprozess an der Amplitude der Resonanzfrequenz abgelesen werden kann.

In Abbildung 4.14 ist zu erkennen, dass der beschriebene Zusammenhang auch in den Simulationen auftritt: Bei hohen Feldstärken werden die Schaltprozesse zunehmend unterdrückt. Die in Abschnitt 4.2.2 ermittelte Stärke der Grenzflächen-Anisotropie von 541 mT (dargestellt als vertikale Linie in

Abbildung 4.14) markiert jedoch nicht den Punkt, ab dem weniger als die Hälfte der Simulationen einen Schaltvorgang zeigen. Dieser Punkt liegt für den Néelvektor bereits bei etwa 300 mT.

Die Frequenz des Py hingegen beginnt erst im Bereich zwischen 580 mT und 600 mT merklich abzunehmen. Eine mögliche Erklärung dafür ist, dass das konstante Magnetfeld $\vec{B}_{\text{const}}$ ausschließlich das Py beeinflusst. Das Mn_2Au schaltet auch bei höheren Feldstärken (siehe Abbildung 4.14 (a)) während des Pulses und wird anschließend, wie in Abschnitt 4.2.2 beschrieben, durch das Py zurückgezogen.

Wie stark das Py dabei durch das Umschalten des Mn_2Au angeregt wird, hängt maßgeblich von der Grenzflächenkopplung J_{inter} ab. Die beobachtete Abnahme der Amplitude bei etwa 600 mT deutet darauf hin, dass ab diesem Punkt das externe Magnetfeld ein größeres Drehmoment auf das Py ausübt als die Grenzflächen-Anisotropie. Infolgedessen verschwindet die Präzession des Py bei weiter steigender Feldstärke schnell.

5 Resume und Ausblick

Diese Arbeit bedient sich der Methoden der atomistischen Spindynamik auf Basis der Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung, um die makroskopischen Prozesse der Experimente der Arbeitsgruppe Kampfath an der FU Berlin auf mikroskopischer Skala zu erklären. Von zentraler Bedeutung hierfür ist es, die NSOT getriebenen Schaltprozessen sowohl in Mn_2Au , wie auch in der FM/AFM-Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ zu simulieren. Die Erweiterung der bisherigen Modelle, die NSOT zeitaufgelöst und mikroskopisch korrekt und nicht mehr als (statisches) effektives Magnetfeld zu nähern, ermöglicht es das Verhalten von Materialien bei komplexen Pulsfolgen zu untersuchen. Hierfür wurde der GPU-CUDA-Code *cuteLLG 2.0* entwickelt, in dem beliebige elektrische Felder über Umsetzungstabellen abgebildet, sowie dotierte Materialien und Mehr-Schichtsystem modelliert werden können.

Mit den Austauschwechselwirkungen und Anisotropien aus dem Spinmodell von Selzer u. a. für Mn_2Au ist im Rahmen des Vergleichs der linearen Antwort in Experiment und Simulation eine Gilbert-Dämpfung von $\alpha_{\text{Mn}} = 0,01$ bestimmt worden. Diese entspricht einer Magnonendämpfung von $2,9(7) \text{ ps}^{-1}$, die mit dem experimentellen Wert von $2,3 \text{ ps}^{-1}$ im Rahmen der Unsicherheit vereinbar ist. Die Eigenfrequenz des Mn_2Au Modells von $0,80 \text{ THz}$ weicht von dem experimentellen Wert $0,62 \text{ THz}$ ab. Die Abweichung kann Unreinheiten in der Probe oder Unsicherheiten der Ab-initio-Methoden geschuldet sein.

Die Schaltsimulationen zeigen, dass das Mn_2Au deterministisch (0 K) ab einer Feldstärke von $0,3 E_0$ und stochastisch bei 300 K ab $0,2 E_0$ schaltet. Die Feldstärke E_0 bezeichnet den Wert von $3,6 \text{ MV/m}$, bei dem im Experiment die meisten Schaltprozesse beobachtet werden. Damit wird bestätigt, dass die Schaltprozesse stochastisch sind und thermische Energie einen Beitrag zur Überwindung der Anisotropiebarriere liefert. Es bleibt zu klären, wie stark die Temperatur das Schaltverhalten beeinflusst.

In der schichtaufgelösten Betrachtung zeigt sich, dass das Mn_2Au bei Anregung mit einem THzP kohärent schaltet. Die Schaltprozesse finden auf einer Zeitskala von wenigen Pikosekunden statt und werden maßgeblich durch das Verkanten der beiden Untergitter getrieben. Wie erwartet, wird das Mn_2Au nach einem Schaltprozess um $\pm 90^\circ$ nicht mehr von dem elektrischen Feld beeinflusst.

Um die Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ zu untersuchen, ist ein erweitertes Heisenberg-Modell entwickelt worden, dass das Mn_2Au -Modell mit dem Py-Modell von Hinzke u. a., die beide ab-initio-parametrisiert sind, kombiniert. Wieder wurde im Rahmen der linearen Antwort in Simulation und Experi-

ment die Gilbert-Dämpfung des Py angepasst. Die im Experiment ermittelte Magnonendämpfung von $0,0084(3) \text{ ps}^{-1}$ resultiert in der Simulation in einer Gilbert Dämpfung von $\alpha_{\text{Py}} = 0,13$.

Als letzter freier Parameter ist die Grenzschnittkopplung durch Vergleich der Eigenfrequenzen des Permalloys bestimmt worden. Im Experiment schwingt sie ca. mit 16 GHz. Die Kopplungsenergie hat in dem Doppelschicht-Modell einen Wert von $-21,0 \text{ meV}$, die eine Resonanzfrequenz von 14,9 GHz erzielt. Im Vergleich zu den Mn-Mn-Wechselwirkungen des Modells ist diese Kopplungsstärke in der gleichen Größenordnung wie die Nächste-Nachbarn-Wechselwirkung. Sie erscheint deswegen plausibel. Wie gezeigt werden konnte, hat die Stärke der Kopplung einen großen Einfluss auf das Schaltverhalten. Für eine geringere Kopplung, $-3,8 \text{ meV}$, konnten nur wenig Schaltprozesse beobachtet werden.

Bei der Simulation des Schaltverhaltens ist bei 300 K eine Grenzfeldstärke von $0,9 E_0$ festgestellt worden. Die Schaltwahrscheinlichkeit steigt bei diesem Wert markant an, was im Experiment nicht so beobachtet werden konnte. Eine Erklärung für diese Abweichung ist, dass im Experiment die Feldstärkenverteilung innerhalb der Probe (im Gegensatz zur Simulation) nicht homogen ist. Weiterhin kann die Temperatur der Probe bei den experimentellen Untersuchungen durch z. B. die vom Laser deponierte Energie verändert werden. Simulationen bei einer Temperatur von 500 K zeigen, dass die Temperatur das Schaltverhalten und die Breite der Schaltwahrscheinlichkeit maßgeblich beeinflusst.

Wie gezeigt werden konnte, folgen die Anregungen des Néelwinkels mehrheitlich zwei Wegen: Das Mn_2Au schaltet und wird entweder, durch das rückstellende Drehmoment des Py, wieder in den Initialzustand gezogen (kein Schalten) oder das Py folgt dem Mn_2Au mit einer großen Präzessionsbewegung. Anhand dieser Bewegung kann bestimmt werden, ob die Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au}|\text{Py}$ geschaltet hat.

Für die im Experiment beobachteten Relaxationsprozesse werden zwei Erklärungen gefunden: Zum einen führt das Mitteln über eine Vielzahl an Domänen dazu, dass der mittlere Néelwinkel nicht auf einen der beiden Maximalwerte absinkt. Ein Teil der Relaxation ist auf die in der schichtaufgelösten Darstellung beobachteten Domänenwand zurückzuführen.

Die schichtaufgelösten Simulationen zeigen, dass in der Doppelschicht die Spins nicht mehr kohärent schalten. Die kurze, kohärente Anregung des Mn_2Au führt zu stehenden Wellen im Py. Nachdem das Py angeregt worden ist kann das Mn_2Au schalten und zieht das Py über eine in das Mn_2Au reichende 90° -Domänenwand mit. In der z -Komponente ist ebenfalls

eine Domänenwand sichtbar, diese ist aber mit etwa 2 nm deutlich kürzer. Grund hierfür sind die starken z -Anisotropien des Mn_2Au . Das Ausbilden von stationären Wellen wurde bisher im Kontext von Schaltprozessen nicht in anderen Untersuchungen beobachtet und scheint einen relevanten Beitrag zum Schaltprozess zu liefern.

Durch das Anlegen eines externen Magnetfelds konnte gezeigt werden, dass Schaltprozesse bei ausreichend hoher Feldstärke unterdrückt werden. Um ein vollständiges Ausbleiben der Schaltvorgänge zu erreichen, ist ein Magnetfeld größer als 800 mT erforderlich. Zudem zeigt sich, dass die Amplitude der Resonanzfrequenz des Py als Indikator für das Auftreten eines Schaltprozesses dienen kann. Ein möglicher Vergleich mit einem Py-Makrospin, der um ein externes Feld der Stärke 541 mT präzediert, liegt nahe, bleibt jedoch spekulativ und erfordert weiterführende Untersuchungen.

Aus den umfangreichen Untersuchungen dieser Arbeit ergeben sich weitere Fragestellungen: Wie aufgezeigt werden konnte, ist der Schaltprozess stark durch die Temperatur beeinflusst. Die Simulationen bei 500 K lassen vermuten, dass ein Modell von der vom Laser erzeugten Temperaturveränderung das Schaltverhalten des Experiments noch besser reproduzieren kann.

Weiterhin wurde die Formanisotropie durch die Dipol-Dipol-Wechselwirkung im Py nicht beachtet, diese verändert ebenfalls die Resonanzfrequenz der M_z -Komponente und könnte damit den Schaltprozess beeinflussen. Offen ist auch, ob die im Modell als null gesetzten Konstanten der Suszeptibilitätstensoren einen Einfluss haben. Hierfür müssten Ab-initio-Daten erzeugt werden, aus den die Konstanten berechnet werden könnten.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich herzlich bei all denjenigen bedanken, die dazu beigetragen haben, dass diese Masterarbeit nicht nur Realität, sondern sogar *rechtzeitig* fertig wurde.

Mein besonderer Dank gilt *Prof. Dr. Ulrich Nowak*, der mir nicht nur im Rahmen von Vorlesungen physikalische Zusammenhänge nähergebracht hat, sondern mit zutreffenden Bemerkungen der Arbeit einen roten Faden gegeben hat – danke für die fachliche Expertise, die stets offenen Türen und die schlussendliche Rezension.

Ein großes Dankeschön geht auch an *Dr. Davide Bossini*, meinen Zweitgutachter. Danke, dass Sie sich die Zeit genommen haben, meine Arbeit zu lesen – und hoffentlich nicht zu oft die Stirn gerunzelt haben.

Dr. Dennis Tobias Dannegger, vielen Dank für die angenehme und wertvolle Betreuung in den Untiefen der Festkörperphysik. Ich habe viel aus deiner qualitätsbewussten Arbeitsweise in meine Praktik übernommen. Danke Tobi, für die vielen Diskussionen, Anmerkungen und Korrekturvorschläge! Und auch danke dafür, dass du nie müde wurdest, mir zu erklären, warum *Rust* angeblich die Zukunft ist...während ich weiterhin *segmentation faults* suche.

Ein herzliches Dankeschön geht an *Prof. Dr. Tobias Kampfrath* und *Dr. Yannic Behovits*, deren experimentelle Arbeit die Grundlage für meine Simulationen gebildet hat. Ohne eure Daten wäre meine Arbeit wie ein Spin ohne Magnetfeld geblieben – richtungslos. Danke, dass ihr die Welt der THz-Impulse geöffnet habt, während ich am Rechner versucht habe, sie nachzubauen.

Ein ganz besonderer Dank geht an die *AG Nowak*: für die kollegiale Atmosphäre, spontane Diskussionen zwischen Tür und Schreibtischstuhl – und natürlich für die legendären Mittagessen. Dass wir es trotz unseres kollektiven Respekts vor akademischer Unpünktlichkeit meistens gemeinsam an den Tisch geschafft haben, verdient fast schon eine eigene Danksagung. Wer braucht schon Uhren, wenn man Geduld und gute Gesellschaft hat?

Vielen Dank an meine Hauptsponsoren *Dr. Michael Renner* und *Diplom-Ergotherapeutin Annette Renner*, die diese Masterarbeit finanziell, ideell und emotional unterstützt haben. Ebenso danke ich meinen beiden wundervollen Brüdern *Mats Ole* und *Kjell Tjorve* für die vielen aufschlussreichen Diskussionen – ob fachlich (selten) oder völlig fachfremd (oft).

Danke an meine RemisbergWG – *Leonie* und *Dr. Niko Lindlar* mit *Florin*, *Dr. med. Marie Isenmann* und *Hannes Haussmann* – für die beste Mischung aus Chaos, Diskussion, Motivation und Gelassenheit, die man sich während

einer Masterarbeit nur wünschen kann.

Ein besonderer Gruß geht auch an meine Kolleginnen und Kollegen aus der VDBS-Bergführerausbildung, *Jahrgang „Bierführer“*. Danke für die Motivation, die Bergluft zwischen den Kapiteln und die klare Erinnerung daran, dass man nicht alles im Leben in Formeln packen kann – besonders nicht gute Freundschaft (oder ein kühles Getränk nach einem langen Tag).

Ohne euch alle wäre diese Arbeit entweder viel länger, viel kürzer – oder gar nicht entstanden. Danke!

*Obwohl es wenig praktischeres gibt als eine gute Theorie,
ist theoretisch nichts wichtiger als eine gute Praxis.*

Literatur

- [1] B. Bhushan. „Historical evolution of magnetic data storage devices and related conferences“. In: *Microsyst. Technol.* **24** (11) (Nov. 2018), S. 4423–4436. DOI: 10.1007/s00542-018-4133-6.
- [2] W. Commons. *File:Telegrafon 8154 cropped.jpg* — *Wikimedia Commons, the free media repository*. 2020. URL: https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:Telegrafon_8154_cropped.jpg&oldid=514580350 (besucht am 27.03.2025).
- [3] W. Commons. *File:Longitudinal and Perpendicular Recording DE.svg* — *Wikimedia Commons, the free media repository*. 2023. URL: https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:Longitudinal_and_Perpendicular_Recording_DE.svg&oldid=796566493 (besucht am 27.03.2025).
- [4] M. L. Plumer, J. Van Ek und D. Weller, Hrsg. *The physics of ultra-high-density magnetic recording*. Springer series in surface sciences. Berlin: Springer, Okt. 2012. ISBN: 978-3-642-62686-9. DOI: 10.1007/978-3-642-56657-8.
- [5] L. Landau. „A possible explanation of the field dependence of the susceptibility at low temperatures“. In: *Collected Papers of L.D. Landau*. Amsterdam: Elsevier, 1965, S. 73–76. ISBN: 978-0-08-010586-4. DOI: 10.1016/B978-0-08-010586-4.50017-1.

LITERATUR

- [6] L. Néel. „Propriétés magnétiques des ferrites ;ferrimagnétisme et antiferromagnétisme“. In: *Ann. Phys.* **12** (3) (1948), S. 137–198. DOI: 10.1051/anphys/194812030137.
- [7] T. Nagamiya, K. Yosida und R. Kubo. „Antiferromagnetism“. In: *Adv. Phys.* **4** (13) (Jan. 1955), S. 1–112. DOI: 10.1080/00018735500101154.
- [8] C. Kittel. „On the theory of ferromagnetic resonance absorption“. In: *Phys. Rev.* **73** (2) (Jan. 1948), S. 155–161. DOI: 10.1103/PhysRev.73.155.
- [9] S. M. Rezende, A. Azevedo und R. L. Rodríguez-Suárez. „Introduction to antiferromagnetic magnons“. In: *J. Appl. Phys.* **126** (15) (Okt. 2019). DOI: 10.1063/1.5110013.
- [10] T. Kampfrath, A. Sell, G. Klatt, A. Pashkin, S. Mährlein, T. Dekorsy, M. Wolf, M. Fiebig, A. Leitenstorfer und R. Huber. „Coherent terahertz control of antiferromagnetic spin waves“. In: *Nat. Photonics* **5** (1) (Jan. 2011), S. 31–34. DOI: 10.1038/nphoton.2010.282.
- [11] M. Fiebig, N. P. Duong, T. Satoh, B. B. Van Aken, K. Miyano, Y. Tomioka und Y. Tokura. „Ultrafast magnetization dynamics of antiferromagnetic compounds“. In: *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** (16), 164005 (2008). DOI: 10.1088/0022-3727/41/16/164005.
- [12] A. A. Sapozhnik, M. Filianina, S. Y. Bodnar, A. Lamirand, M.-A. Mawass, Y. Skourski, H.-J. Elmers, H. Zabel, M. Kläui und M. Jourdan. „Direct imaging of antiferromagnetic domains in Mn₂Au manipulated by high magnetic fields“. In: *Phys. Rev. B* **97** (13) (Apr. 2018), S. 155–161. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.134429.
- [13] J. Železný, H. Gao, K. Výborný, J. Zemen, J. Mašek, A. Manchon, J. Wunderlich, J. Sinova und T. Jungwirth. „Relativistic Néel-order fields induced by electrical current in antiferromagnets“. In: *Phys. Rev. Lett.* **113** (15) (Okt. 2014). DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.157201.
- [14] P. Wadley, B. Howells, J. Železný, C. Andrews, V. Hills, R. P. Campion, V. Novák, K. Olejník, F. Maccherozzi, S. S. Dhesi, S. Y. Martin, T. Wagner, J. Wunderlich, F. Freimuth, Y. Mokrousov, J. Kuneš, J. S. Chauhan, M. J. Grzybowski, A. W. Rushforth, K. W. Edmonds, B. L. Gallagher und T. Jungwirth. „Electrical switching of an antiferromagnet“. In: *Science* **351** (6273) (Feb. 2016), S. 587–590. DOI: 10.1126/science.aad6936.

- [15] S. Y. Bodnar, L. Šmejkal, I. Turek, T. Jungwirth, O. Gomonay, J. Sinova, A. A. Sapozhnik, H.-J. Elmers, M. Kläui und M. Jourdan. „Writing and reading antiferromagnetic Mn_2Au by Néel spin-orbit torques and large anisotropic magnetoresistance“. In: *Nat. Commun.* **9** (1) (Dez. 2018). DOI: 10.1038/s41467-018-07405-6.
- [16] K. Olejník, T. Seifert, Z. Kašpar, V. Novák, P. Wadley, R. P. Campion, M. Baumgartner, P. Gambardella, P. Němec, J. Wunderlich, J. Sinova, P. Kužel, M. Müller, T. Kampfrath und T. Jungwirth. „Terahertz electrical writing speed in an antiferromagnetic memory“. In: *Sci. Adv.* **4** (3) (März 2018). DOI: 10.1126/sciadv.aao6734.
- [17] L. Salemi, M. Berritta, A. K. Nandy und P. M. Oppeneer. „Orbitally dominated Rashba-Edelstein effect in noncentrosymmetric antiferromagnets“. In: *Nat. Commun.* **10** (1) (Nov. 2019). DOI: 10.1038/s41467-019-13199-5.
- [18] P. Wadley, V. Hills, M. R. Shahedkhah, K. W. Edmonds, R. P. Campion, V. Novák, B. Ouladdiaf, D. Khalyavin, S. Langridge, V. Saidl, P. Nemec, A. W. Rushforth, B. L. Gallagher, S. S. Dhesi, F. Maccherozzi, J. Železný und T. Jungwirth. „Antiferromagnetic structure in tetragonal CuMnAs thin films“. In: *Sci. Rep.* **5** (1) (Nov. 2015). ISSN: 2045-2322. DOI: 10.1038/srep17079.
- [19] S. Reimers, Y. Lytvynenko, Y. R. Niu, E. Golias, B. Sarpi, L. S. I. Veiga, T. Denneulin, A. Kovács, R. E. Dunin-Borkowski, J. Bläßer, M. Kläui und M. Jourdan. „Current-driven writing process in antiferromagnetic Mn_2Au for memory applications“. In: *Nat. Commun.* **14** (1) (Apr. 2023). DOI: 10.1038/s41467-023-37712-1.
- [20] S. Khmelevskiy und P. Mohn. „Layered antiferromagnetism with high Neel temperature in the intermetallic compound Mn_2Au “. In: *Appl. Phys. Lett.* **93** (16), 162503 (Okt. 2008). DOI: 10.1063/1.3003878.
- [21] S. Selzer, L. Salemi, A. Deák, E. Simon, L. Szunyogh, P. M. Oppeneer und U. Nowak. „Current-induced switching of antiferromagnetic order in Mn_2Au from first principles“. In: *Phys. Rev. B* **105** (17), 174416 (Mai 2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.174416.
- [22] Y. Behovits, A. L. Chekhov, S. Y. Bodnar, O. Gueckstock, S. Reimers, Y. Lytvynenko, Y. Skourski, M. Wolf, T. S. Seifert, O. Gomonay, M. Kläui, M. Jourdan und T. Kampfrath. „Terahertz Néel spin-orbit torques drive nonlinear magnon dynamics in antiferromagnetic Mn_2Au “. In: *Nat. Commun.* **14** (1) (Sep. 2023). DOI: 10.1038/s41467-023-41016-8.

LITERATUR

- [23] S. P. Bommanaboyena, D. Backes, L. S. I. Veiga, S. S. Dhesi, Y. R. Niu, B. Sarpi, T. Denneulin, A. Kovács, T. Mashoff, O. Gomonay, J. Sinova, K. Everschor-Sitte, D. Schönke, R. M. Reeve, M. Kläui, H.-J. Elmers und M. Jourdan. „Readout of an antiferromagnetic spintronics system by strong exchange coupling of Mn₂Au and Permalloy“. In: *Nat. Commun.* **12** (1) (Nov. 2021). DOI: 10.1038/s41467-021-26963-5.
- [24] J. Hirst, S. Ruta, J. Jackson und T. Ostler. „Simulations of magnetization reversal in FM/AFM bilayers with THz frequency pulses“. In: *Sci. Rep.* **13** (1), 12270 (Juli 2023). DOI: 10.1038/s41598-023-39503-y.
- [25] D. Hinzke, U. Atxitia, K. Carva, P. Nieves, O. Chubykalo-Fesenko, P. M. Oppeneer und U. Nowak. „Multiscale modeling of ultrafast element-specific magnetization dynamics of ferromagnetic alloys“. In: *Phys. Rev. B* **92** (5), 054412 (Aug. 2015). DOI: 10.1103/PhysRevB.92.054402.
- [26] O. Eriksson, A. Bergman, L. Bergqvist und J. Hellsvik. *Atomistic Spin Dynamics: Foundations and Applications*. Oxford University Press, Feb. 2017. ISBN: 978-0-198-78866-9. DOI: 10.1093/oso/9780198788669.001.0001.
- [27] W. Heisenberg. „Zur Theorie des Ferromagnetismus“. In: *Z. Physik* **49** (9-10) (Sep. 1928), S. 619–636. ISSN: 0044-3328. DOI: 10.1007/BF01328601.
- [28] H. E. Stanley. „Dependence of Critical Properties on Dimensionality of Spins“. In: *Phys. Rev. Lett.* **20** (12) (März 1968), S. 589–592. DOI: 10.1103/PhysRevLett.20.589.
- [29] U. Nowak. „Classical Spin Models“. In: *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials. Micromagnetism*. Chichester: John Wiley & Sons, Dez. 2007, S. 858–876. ISBN: 978-0-470-02218-4. DOI: 10.1002/9780470022184.hmm205.
- [30] D. K. Wagner. „Lattice Thermal Conductivity and High-Field Electrical and Thermal Magnetoconductivities of Tungsten“. In: *Phys. Rev. B* **5** (2 Jan. 1972), S. 336–347. DOI: 10.1103/PhysRevB.5.336.
- [31] P. Ehrenfest. „Bemerkung über die angenäherte Gültigkeit der klassischen Mechanik innerhalb der Quantenmechanik“. In: *Z. Physik.* **45** (7-8) (Juli 1927), S. 455–457. DOI: 10.1007/BF01329203.

-
- [32] L. Landau und E. Lifshitz. *On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies*. Hrsg. von L. Pitaevski. Nachdruck aus Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion 8, Part 2, 153, 1935. Amsterdam, 1992. DOI: 10.1016/B978-0-08-036364-6.50008-9.
 - [33] W. M. Saslow. „Landau-Lifshitz or Gilbert damping? That is the question“. In: *J. Appl. Phys.* **105** (7), 07D315 (Apr. 2009). ISSN: 0021-8979. DOI: 10.1063/1.3077204. eprint: https://pubs.aip.org/aip/jap/article-pdf/doi/10.1063/1.3077204/15588853/07d315\1_online.pdf.
 - [34] T. Gilbert. „A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials“. In: *IEEE Trans. Magn.* **40** (6) (2004), S. 3443–3449. DOI: 10.1109/TMAG.2004.836740.
 - [35] R. C. Dalang und A. Humeau. „Lévy processes and Lévy white noise as tempered distributions“. In: *Electron. J. Probab.* **22** (2017), S. 1–25. DOI: 10.1214/17-EJP48.
 - [36] M. L. Stein. 1. Aufl. Springer series in statistics. New York: Springer, Juni 1999. ISBN: 978-0-387-98629-6. DOI: 10.1007/978-1-4612-1494-6.
 - [37] J. Neškudla und J. Vedral. „Digitally Controlled White Noise Generator“. In: Metrology for a Sustainable Development (Rio de Janeiro, Brazil). Prague, 17.–22. Sep. 2006. URL: <https://www.imeko.org/publications/wc-2006/PWC-2006-TC4-IWADC-008u.pdf> (besucht am 15.04.2025).
 - [38] W. F. Brown. „Thermal Fluctuations of a Single-Domain Particle“. In: *Phys. Rev.* **130** (5) (Juni 1963), S. 1677–1686. DOI: 10.1103/PhysRev.130.1677.
 - [39] L. Euler. *Institutionum calculi integralis*. Bd. 1. imp. Acad. imp. Saënt., 1768. eprint: <https://books.google.de/books?id=Vg8OAAAAQAAJ>. (Besucht am 13.01.2025).
 - [40] R. Brown. „A brief account of microscopical observations made in the months of June, July and August, 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies“. In: *Philos. Mag.* Bd. 4. 1828, S. 161–173. DOI: 10.1080/14786442808674769. eprint: <https://books.google.de/books?id=Z3tDAQAAMAAJ&pg=PA161>.

LITERATUR

- [41] A. Einstein. „Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen“. In: *Ann. Phys. (Berl.)* Bd. 17. 1905, S. 549–560. URL: http://www.physik.uni-augsburg.de/annalen/history/einstein-papers/1905_17_549-560.pdf (besucht am 30.01.2025).
- [42] R. Remer. „Theorie und Simulation von Zeitreihen mit Anwendungen auf die Aktienkursdynamik“. Diss. Rostock: Universität Rostock, 2005. URL: https://rosdok.uni-rostock.de/file/rosdok_disshab_0000000009/rosdok_derivate_0000003389/Dissertation_Remer_2005.pdf (besucht am 16.03.2025).
- [43] K. E. Trenberth. *Climate System Modeling*. Cambridge: Cambridge University Press, 1992. ISBN: 978-0-521-43231-3. eprint: https://stephenschneider.stanford.edu/Publications/PDF_Papers/TrenberthSm.pdf. (Besucht am 16.03.2025).
- [44] A. Greiner, W. Strittmatter und J. Honerkamp. „Numerical integration of stochastic differential equations“. In: *J. Stat. Phys.* **51** (1-2) (Apr. 1988), S. 95–108. DOI: 10.1007/BF01015322.
- [45] D. E. Wolf. „Stochastic differential equations“. In: *Advances in Computer Simulation*. Hrsg. von J. Kertész und I. Kondor. Berlin, Heidelberg: Springer, 1998, S. 104–121. ISBN: 978-3-540-69675-9.
- [46] J. Smythe, F. Moss, P. McClintock und D. Clarkson. „Ito versus Stratonovich revisited“. In: *Phys. Lett.* **97** (3) (1983), S. 95–98. ISSN: 0375-9601. DOI: 10.1016/0375-9601(83)90520-0.
- [47] C. Rousseau, Y. Saint-Aubin und M. Stern. „Zufallszahlengeneratoren“. In: *Mathematik und Technologie*. Heidelberg: Springer, 2012, S. 253–278. ISBN: 978-3-642-30092-9. DOI: 10.1007/978-3-642-30092-9_8.
- [48] V. M. Edelstein. „Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems“. In: *Solid State Commun.* **73** (3) (1990), S. 233–235. DOI: 10.1016/0038-1098(90)90963-C.
- [49] J. C. R. Sánchez, L. Vila, G. Desfonds, S. Gambarelli, J. P. Attané, J. M. De Teresa, C. Magén und A. Fert. „Spin-to-charge conversion using Rashba coupling at the interface between non-magnetic materials“. In: *Nat. Commun.* **4** (2944) (Dez. 2013). DOI: 10.1038/ncomms3944.

- [50] S. R. Tauchert, M. Volkov, D. Ehberger, D. Kazenwadel, M. Evers, H. Lange, A. Donges, A. Book, W. Kreuzpaintner, U. Nowak und P. Baum. „Polarized phonons carry angular momentum in ultrafast demagnetization“. In: *Nature* **602** (7895) (Feb. 2022), S. 73–77. DOI: 10.1038/s41586-021-04306-4.
- [51] J. Železný, H. Gao, A. Manchon, F. Freimuth, Y. Mokrousov, J. Zemen, J. Mašek, J. Sinova und T. Jungwirth. „Spin-orbit torques in locally and globally noncentrosymmetric crystals: Antiferromagnets and ferromagnets“. In: *Phys. Rev. B* **95** (1), 014403 (Jan. 2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.95.014403.
- [52] M. Meinert, D. Graulich und T. Matalla-Wagner. „Electrical switching of antiferromagnetic Mn₂Au and the role of thermal activation“. In: *Phys. Rev. Appl.* **9** (6) (Juni 2018). DOI: 10.1103/PhysRevApplied.9.064040.
- [53] J. Godinho, H. Reichlová, D. Kriegner, V. Novák, K. Olejník, Z. Kašpar, Z. Šobáň, P. Wadley, R. P. Campion, R. M. Otxoa, P. E. Roy, J. Železný, T. Jungwirth und J. Wunderlich. „Electrically induced and detected Néel vector reversal in a collinear antiferromagnet“. In: *Nat. Commun.* **9** (1) (Nov. 2018). DOI: 10.1038/s41467-018-07092-2.
- [54] X. Zhang, Q. Liu, J.-W. Luo, A. J. Freeman und A. Zunger. „Hidden spin polarization in inversion-symmetric bulk crystals“. In: *Nat. Phys.* **10** (5) (Mai 2014), S. 387–393. DOI: 10.1038/nphys2933.
- [55] I. A. Nechaev, M. F. Jensen, E. D. L. Rienks, V. M. Silkin, P. M. Echenique, E. V. Chulkov und P. Hofmann. „Hole dynamics in a two-dimensional spin-orbit coupled electron system: Theoretical and experimental study of the Au(111) surface state“. In: *Phys. Rev. B* **80** (11), 113402 (Sep. 2009). DOI: 10.1103/PhysRevB.80.113402.
- [56] Spektrum. *Lexikon der Physik: Ab-initio-Methoden*. URL: <https://www.spektrum.de/lexikon/physik/ab-initio-methoden/53> (besucht am 14.04.2025).
- [57] S. Selzer. „Simulations on the Dynamics of Complex Magnetic Nanostructures“. Diss. Konstanz: Universität Konstanz, 2021.
- [58] J. L. Ross, P.-I. Gavriloaea, F. Freimuth, T. Adamantopoulos, Y. Mokrousov, R. F. L. Evans, R. Chantrell, R. M. Otxoa und O. Chubykalo-Fesenko. „Ultrafast antiferromagnetic switching of Mn₂Au with laser-induced optical torques“. In: *Npj Comput. Mater.* **10** (1) (Okt. 2024).

LITERATUR

- DOI: 10.1038/s41524-024-01416-1. eprint: <https://eprints.whiterose.ac.uk/218664/>.
- [59] F. Freimuth, S. Blügel und Y. Mokrousov. „Laser-induced torques in metallic antiferromagnets“. In: *Phys. Rev. B* **103** (17), 174429 (Mai 2021). DOI: 10.1103/PhysRevB.103.174429.
- [60] Y. Behovits und T. Kampfrath. Private Kommunikation.
- [61] P. E. Roy, R. M. Otxoa und J. Wunderlich. „Robust picosecond writing of a layered antiferromagnet by staggered spin-orbit fields“. In: *Phys. Rev. B* **94** (1), 014439 (Juli 2016). DOI: 10.1103/PhysRevB.94.014439.
- [62] J. H. Poynting. „On the transfer of energy in the electromagnetic field“. In: *Philos. Trans. R. Soc.* **175** (Dez. 1884), S. 343–361. URL: <https://www.jstor.org/stable/109449> (besucht am 03.03.2025).
- [63] J. A. Stratton. *Electromagnetic Theory*. IEEE Press Series on Electromagnetic Wave Theory. Wiley, 2007. ISBN: 978-0-470-13153-4. eprint: <https://books.google.ch/books?id=zFeWdS2luE4C>.
- [64] H. Al-Hamdo, T. Wagner, Y. Lytvynenko, G. Kendzo, S. Reimers, M. Ruhwedel, M. Yaqoob, V. I. Vasyuchka, P. Pirro, J. Sinova, M. Kläui, M. Jourdan, O. Gomonay und M. Weiler. „Coupling of Ferromagnetic and Antiferromagnetic Spin Dynamics in Mn₂Au/NiFe Thin Film Bilayers“. In: *Phys. Rev. Lett.* **131** (4), 046701 (Juli 2023). DOI: 10.1103/PhysRevLett.131.046701.
- [65] H. Devda. *Angular dependence of the spin ME tensor χ^S of 8Pt/8Co system at first Co layer at interface*. Private Kommunikation. 11. März 2024.
- [66] G. Manchon, S. Ghosh, C. Barreteau und A. Manchon. „Semirealistic tight-binding model for spin-orbit torques“. In: *Phys. Rev. B* **101** (17), 174423 (Mai 2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.101.174423.
- [67] L. Salemi, M. Berritta und P. M. Oppeneer. „Quantitative comparison of electrically induced spin and orbital polarizations in heavy-metal/3d-metal bilayers“. In: *Phys. Rev. Materials* **5** (7), 074407 (Juli 2021). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.074407.
- [68] H. Devda. *Semi-classical treatment of spin-orbit coupling term*. Private Kommunikation. 28. Jan. 2025.

-
- [69] A. A. Sapozhnik, C. Luo, H. Ryll, F. Radu, M. Jourdan, H. Zabel und H.-J. Elmers. „Experimental determination of exchange constants in antiferromagnetic Mn_2Au “. In: *Phys. Rev. B* **97** (18), 184416 (Mai 2018). DOI: 10.1103/PhysRevB.97.184416.
- [70] S. Jenkins, T. Wagner, O. Gomonay und K. Everschor-Sitte. „Revealing ultrafast domain wall motion in Mn_2Au through permalloy capping“. In: *Phys. Rev. B* **109** (22), 224431 (Juni 2024). DOI: 10.1103/PhysRevB.109.224431.
- [71] V. M. T. S. Barthem, C. V. Colin, H. Mayaffre, M.-H. Julien und D. Givord. „Revealing the properties of Mn_2Au for antiferromagnetic spintronics“. In: *Nat. Commun.* **4** (1) (2013). DOI: 10.1038/ncomms3515.
- [72] P. Wells und J. H. Smith. „The structure of Mn_2Au and Mn_3Au “. In: *Acta Crystallogr. A* **26** (3) (Mai 1970), S. 379–381. DOI: 10.1107/S056773947000092X.
- [73] S. Earnshaw. *On the Nature of the Molecular Forces which Regulate the Constitution of the Luminiferous Ether*. Camb. Phil. Soc. trans. 1839. eprint: <https://books.google.ch/books?id=UnwfSQAACAAJ>. (Besucht am 20.02.2025).
- [74] L. F. Yin, D. H. Wei, N. Lei, L. H. Zhou, C. S. Tian, G. S. Dong, X. F. Jin, L. P. Guo, Q. J. Jia und R. Q. Wu. „Magnetocrystalline Anisotropy in Permalloy Revisited“. In: *Phys. Rev. Lett.* **97** (6), 067203 (Aug. 2006). DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.067203.
- [75] B. Glaubitz, S. Buschhorn, F. Brüssing, R. Abrudan und H. Zabel. „Development of magnetic moments in $\text{Fe}_{1-x}\text{Ni}_x$ -alloys“. In: *J. Phys. Condens. Matter* **23** (25), 254210 (Juni 2011). DOI: 10.1088/0953-8984/23/25/254210.
- [76] R. M. Bozorth. *Ferromagnetism*. Piscataway, NJ: IEEE Publications, Aug. 1993. ISBN: 978-0-780-31032-2. URL: <https://ieeexplore.ieee.org/servlet/opac?bknumber=5263070>.
- [77] P. Wadley, K. W. Edmonds, M. R. Shahedkhah, R. P. Campion, B. L. Gallagher, J. Železný, J. Kuneš, V. Novák, T. Jungwirth, V. Saidl, P. Němec, F. Maccherozzi und S. S. Dhesi. „Control of antiferromagnetic spin axis orientation in bilayer e/CuMnAs films“. In: *Sci. Rep.* **7** (1) (Sep. 2017). DOI: 10.1038/s41598-017-11653-8.

LITERATUR

- [78] N. P. Grazhdankina. „Magnetic first order phase transitions“. In: *Phys.-Uspekhi* **11** (5) (Mai 1969), S. 727–740. DOI: 10.1070/PU1969v011n05ABEH003744.
- [79] M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi und E. Vicari. „Critical exponents and equation of state of the three-dimensional Heisenberg universality class“. In: *Phys. Rev. B* **65** (14), 144520 (Apr. 2002). DOI: 10.1103/PhysRevB.65.144520.
- [80] O. Mounkachi, R. Lamouri, E. Salmani, M. Hamedoun, A. Benyoussef und H. Ez-Zahraouy. „Origin of the magnetic properties of MnFe_2O_4 spinel ferrite: Ab initio and Monte Carlo simulation“. In: *J. Magn. Magn. Mater.* **533**, 168016 (Sep. 2021). DOI: 10.1016/j.jmmm.2021.168016.
- [81] J. Hirst, U. Atxitia, S. Ruta, J. Jackson, L. Petit und T. Ostler. „Temperature-dependent micromagnetic model of the antiferromagnet Mn_2Au : A multiscale approach“. In: *Phys. Rev. B* **106** (9), 094402 (Sep. 2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.094402.
- [82] Y. Behovits, A. L. Chekhov, B. R. Serrano, A. Ruge, S. Reimers, Y. Lytvynenko, M. Kläui, M. Jourdan und T. Kampfrath. *All-optical magnetometric characterization of the antiferromagnetic exchange-spring system $\text{Mn}_2\text{Au}/\text{Py}$ by terahertz spin-torques*. 2024. arXiv: 2409.18107 [cond-mat.mes-hall]. URL: <https://arxiv.org/abs/2409.18107> (besucht am 02.06.2025).
- [83] T. Danegger. „Computational Studies of Antiferromagnets for Spintronics“. Diss. Konstanz, Germany: Universität Konstanz, 2025.
- [84] A. Savitzky und M. J. E. Golay. „Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures“. In: *Anal. Chem.* **36** (8) (1964), S. 1627–1639. DOI: 10.1021/ac60214a047.
- [85] B. E. Warren. *X-Ray Diffraction*. Dover Books on Physics. Mineola, New York: Dover Publications, Juni 1990. ISBN: 978-0-486-66317-3.
- [86] *NVIDIA: CUDA C++ Programming Guide - Kernels*. URL: <https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-programming-guide/index.html#kernels> (besucht am 17.04.2025).
- [87] *NVIDIA: CUDA C++ Programming Guide - Built-in Variables*. URL: <https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-programming-guide/index.html#built-in-variables> (besucht am 17.04.2025).

- [88] S. Cook. *CUDA Programming - A Developer's Guide to Parallel Computing with GPUs*. San Francisco, California: Morgan Kaufmann, 2013. ISBN: 978-9-351-07178-5.
- [89] *NVIDIA: CUDA C++ Programming Guide - Texture Memory*. URL: <https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-programming-guide/#texture-memory> (besucht am 14.11.2024).

A Anhang

Der Anhang dieser Arbeit enthält ergänzende Informationen, die zum Verständnis der durchgeführten Untersuchungen und Analysen beitragen, jedoch im Hauptteil aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht vollständig dargestellt wurden. Dazu zählen unter anderem zusätzliche Grafiken, Simulationsdaten, sowie relevante Auszüge aus Programmcodes. Alle im Anhang aufgeführten Inhalte beziehen sich auf die im Haupttext beschriebenen Methoden und Ergebnisse und dienen der Transparenz und Nachvollziehbarkeit.

A.1 Permalloy-Modell-Transformation

Hinzke u. a. ^[25] entwickelten das Py-Modell so, dass das Hostgitter* in einer fcc-Struktur besetzt wird. Dabei wird jeder zweite Gitterplatz frei gelassen. Das vereinfacht die Berechnung der relativen Nachbarschaftskoordinaten[†], verbraucht aber viel Speicherplatz, der, wie wir bereits gelernt haben, auf einer GPU knapp ist. Um das Py-Modell im *cuteLLG 2.0* Programm ohne Leerstellen (= nicht besetzte Gitterpunkte) verwenden zu können, muss es transformiert werden. Das Mn₂Au-Modell liegt in einer Brillouin-Zelle mit Dimension $1 \times 1 \times 4$ vor, weswegen das Py-Modell darauf angepasst wird. In Abbildung A.1 ist eine Brillouin-Zelle mit ihren Untergitterindizes sl (1–4) durchnummeriert. Diese Gitterplätze werden in eine Zelle mit den passenden Dimensionen transformiert (rote Pfeile). Die Nachbarschaftsindizes (i, j, k) werden mittels einer Koordinatentransformation auf die neue Konfiguration (i', j', k') abgebildet. In i - und j -Richtung führt dies zu einer Halbierung der Reichweite im neuen, gestrichenen System

$$i' = \left\lfloor \frac{i}{2} \right\rfloor \quad \text{und} \quad j' = \left\lfloor \frac{j}{2} \right\rfloor.$$

In k -Richtung erhöht sich die Reichweite jedoch massiv. Werden die relativen Nachbarschaftskoordinaten des sl -ten Untergitters transformiert und sln ist der Untergitter-Index des Nachbarn, so ist k' gegeben durch

$$k' = 4 \cdot \left\lfloor \frac{k}{2} \right\rfloor + (sln - sl).$$

*Begrifflichkeiten sind wie in der Fußnote auf S. 28 definiert.

[†]In einem solchen Gitter sind die Nachbarschaftskoordinaten (i, j, k) entweder alle gerade oder alle ungerade^[85].

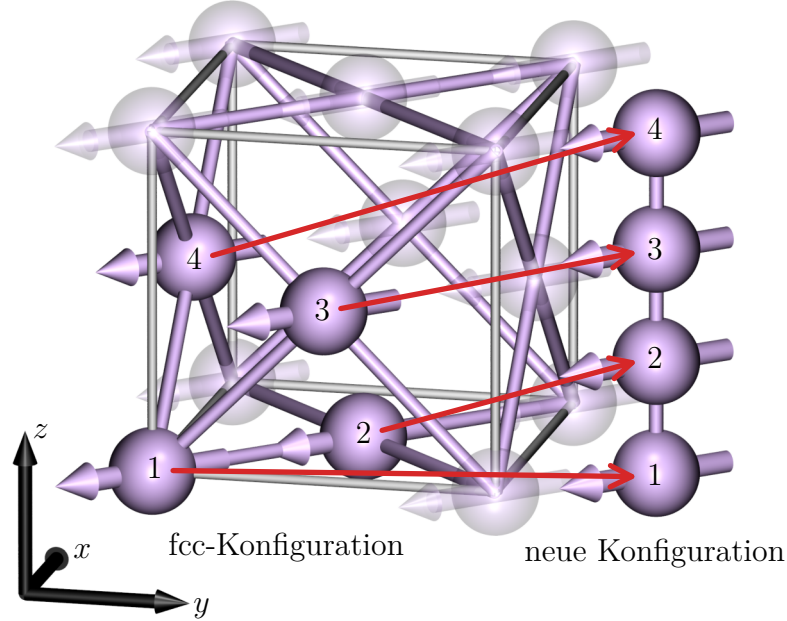


Abbildung A.1: Die fcc-Einheitszelle von Py, hervorgehoben ist die Brillouin-Zelle aus vier Atomen (1–4). Diese werden neu entlang der z -Achse angeordnet (rote Pfeile) und im *cuteLLG 2.0* Code verwendet.

Die Reichweite in die z -Dimension wird im schlechtesten Fall vervierfacht, was zu einem großen *halo* führt. Aus diesem Grund muss die Wechselwirkung des Py-Modells verkürzt werden.

A.2 Umrechnung der Suszeptibilitätstensoren in kartesische Koordinaten

Die Suszeptibilitäten $\chi^{S,L}$ des REE haben wir in Abschnitt 3.2 anhand der Untergittermagnetisierungen in Kugelkoordinaten betrachtet. Die Umrechnung des in kartesischen Koordinaten gespeicherten Spins in Kugelkoordinaten und anschließende Berechnung der trigonometrischen Funktionen fordert in jedem Zeitschritt Rechenzeit, weswegen es effizienter ist, die $\chi^{S,L}$ in Abhängigkeit vom kartesischen Spin zu beschreiben.

Die Magnetisierung des Untergitters ist beschrieben durch $\varphi \in [0, 2\pi)$ und $\vartheta \in [0, \pi]$. Im Heisenbergmodell ist der Spin $\vec{S}$ normiert,

$$|\vec{S}| = 1 = \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} = \frac{1}{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (\text{A.1})$$

A.2 UMRECHNUNG DER SUSZEPTIBILITÄTSTENSOREN IN KARTESISCHE KOORDINATEN

wobei x, y, z den kartesischen Komponenten von $\vec{S}$ entsprechen. Ausgehend von den grundlegenden Umrechnungen

$$\begin{aligned}\sin \vartheta \cos \varphi &= x \\ \sin \vartheta \sin \varphi &= y \\ \cos \vartheta &= z\end{aligned}$$

lassen sich mit den Additionstheoremen die folgenden Beziehungen finden:

$$\begin{aligned}1 - \cos 2\vartheta &= 2 - 2z^2 \\ \cos 2\vartheta &= 2z^2 - 1 \\ \sin^2 \vartheta &= \frac{1}{2} (1 - \cos 2\vartheta) = 1 - z^2 \\ \sin 2\varphi &= 2 \sin \varphi \cos \varphi = 2 \frac{xy}{1 - z^2} \\ \cos 2\varphi &= 2 \frac{x^2}{1 - z^2} - 1 \\ \cos \varphi &= \frac{x}{1 - z^2} \\ \sin 2\vartheta \sin \varphi &= 2 \sin \vartheta \sin \varphi \cos \vartheta = 2yz \\ \sin 2\vartheta \cos \varphi &= 2 \sin \vartheta \cos \varphi \cos \vartheta = 2xz\end{aligned}$$

Mit diesen wird die in Gleichung 3.8 bereits gezeigte Matrix in Kugelkoordinaten* in kartesische Koordinaten transformiert. In der Implementierung in *cuteLLG 2.0* wird die Matrix mit dem elektrischen Feld multipliziert und der resultierende Vektor berechnet.

$$\chi^{S,L}(\varphi_i, \vartheta_i) = \begin{bmatrix} C_1^{S,L} z_i + 4C_2^{S,L} x_i y_i & C_3^{S,L} - 2C_2^{S,L} (2x_i^2 - (1 - z_i^2)) - C_4^{S,L} (2z_i^2 - 1) & 0 \\ -C_3^{S,L} - 2C_2^{S,L} (2x_i^2 - (1 - z_i^2)) + C_4^{S,L} (2z_i^2 - 1) & C_1^{S,L} z_i - 4C_2^{S,L} x_i y_i & 0 \\ C_7^{S,L} x_i + 2C_8^{S,L} y_i z_i & C_7^{S,L} y_i - 2C_8^{S,L} x_i z_i & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

*Falls die Matrix nicht mehr vor dem inneren Auge präsent ist:

$$\chi^{S,L}(\varphi_i, \vartheta_i) = \begin{bmatrix} C_1^{S,L} \cos \vartheta_i + C_2^{S,L} (1 - \cos 2\vartheta_i) \sin 2\varphi_i & C_3^{S,L} - C_2^{S,L} (1 - \cos 2\vartheta_i) \cos 2\varphi_i - C_4^{S,L} \cos 2\vartheta_i & 0 \\ -C_3^{S,L} - C_2^{S,L} (1 - \cos 2\vartheta_i) \cos 2\varphi_i + C_4^{S,L} \cos 2\vartheta_i & C_1^{S,L} \cos \vartheta_i - C_2^{S,L} (1 - \cos 2\vartheta_i) \sin 2\varphi_i & 0 \\ C_7^{S,L} \sin \vartheta_i \cos \varphi_i + C_8^{S,L} \sin 2\vartheta_i \sin \varphi_i & C_7^{S,L} \sin \vartheta_i \sin \varphi_i - C_8^{S,L} \sin 2\vartheta_i \cos \varphi_i & 0 \end{bmatrix}$$

A.2.1 Implementierung als CUDA-Kernel

In CUDA werden Funktionen, die parallelisiert auf der GPU ausgeführt werden, als Kernel bezeichnet^[86]. Ein Kernel wird im Prä- und Suffix des Funktionsnamens mit `__` und dem Schlüsselwort `__global__` gekennzeichnet. Ihm müssen die Blockgröße* und die Threadanzahl[†] per Block als Parameter mitgegeben werden. Die Blockgröße und Threadanzahl sind jeweils dreidimensionale Größen, daraus wird jedem Block und Thread eine eindeutige Koordinatentrippele `blockIdx` und `threadIdx` zugewiesen^[86,87]. Zur Berechnung der induzierten Momente wird ein solcher Kernel verwendet, der für alle Spins parallel die Momente berechnet. Die induzierten Momente werden im *global memory* abgelegt, da auf den anderen Speicherbereichen kein Platz zur Verfügung steht.

Quellcode A.1: CUDA-Kernel zur Berechnung der induzierten Momente.

```

1  __global__ void __computeInducedMoments__(HeunHandle_t heun,
    const int3 tileDim, GridInfo_t grid, const float
    globalTimeAsFloat, ElectricField_t eField){
2      const int width = grid.stride.x;
3      const int height = grid.stride.y;
4      // get the electric field in V/m
5      const float3 E = getExternalElectricField(0, 0, 0,
        globalTimeAsFloat, grid, eField);
6
7      for (int z = 0; z < tileDim.z; z += blockDim.z)
8      {
9          // define shared memory coordinates
10         int xs = threadIdx.x + grid.halo.x;
11         int ys = threadIdx.y + grid.halo.y;
12         int zs = threadIdx.z + grid.halo.z + z;
13
14         // define global memory coordinates
15         int xg = (xs + tileDim.x * blockIdx.x);
16         int yg = (ys + tileDim.y * blockIdx.y);
17         int zg = (zs + tileDim.z * blockIdx.z);
18         int ig = idx(xg, yg, zg, width, height);
19

```

*Ein Threadblock bezeichnet einen Verbund von bis zu 1024 einzelnen Prozessoren, auch Threads genannt, die sich einen *shared memory* teilen.

†Aus Speichergründen kann es sinnvoll sein, weniger als 1024 Threads pro Block zu verwenden. Beispielsweise können so die zur Verfügung stehenden Speicherregister pro Thread erhöht werden. Ebenfalls kann die Threadanzahl an das zu lösende Problem angepasst werden, soll eine 16×16 Matrix elementweise addiert werden, so könnte man einen Block mit 256 Threads nutzen.

A.2 UMRECHNUNG DER SUSZEPTIBILITÄTSTENSOREN IN KARTESISCHE KOORDINATEN

```
20     float3 spin = heun.sInput[ig];
21
22     int sl = getSublattice(xg, yg, zg, grid.typeField,
23                           width, height, grid.halo);
24
25     if(sl != 0){
26         //switch sl indexing to first occupied
27         //sublattice because of index mixing
28         sl--;
29         const float mu = constMem_mu[sl];
30
31         //load susceptibility constants from constant
32         //memory
33         const ME_constants mes = constMem_mes[sl];
34         // calculate the induced spin moment without the
35         //divison of mu_s, that comes later
36         const float delta_s_x = ( mes.C1*spin.z + 4.0f*
37                                 mes.C2*spin.x*spin.y ) * E.x
38         + (mes.C3 - 2.0f*mes.C2*(2.0f*spin.x*spin.x-(1.0
39           f-spin.z*spin.z)) - mes.C4*(2.0f*spin.z*spin.
40             z-1.0f)) * E.y;
41         const float delta_s_y = (-mes.C3-2.0f*mes.C2*(2.
42           0f*spin.x*spin.x-(1.0f-spin.z*spin.z)) + mes.
43             C4*(2.0f*spin.z*spin.z-1.0f)) * E.x
44         + (mes.C1*spin.z-4.0f*mes.C2*spin.x*spin.y) *E.y
45         ;
46         const float delta_s_z = ( mes.C7*spin.x + mes.C8
47                                 *2.0f*spin.y*spin.z) * E.x
48         + (mes.C7*spin.y-mes.C8*2.0f*spin.x*spin.z) *E.y
49         ;
50
51         // since the float3 is in terms of muBohr we
52         //multiply it by muBohr
53         // store induced spin moment to global memory
54         grid.s2Spin[ig] = ( SI_muBohr / mu ) * make_floa
55             t3(delta_s_x, delta_s_y, delta_s_z);
56
57         // calculate the induced orbital moment without
58         //the divison of mu_l, that cancels out in the
59         //Hamiltonian
60         const float delta_o_x = ( mes.01*spin.z + 4.0f*
61                                 mes.02*spin.x*spin.y ) * E.x
62         + (mes.03 - 2.0f*mes.02*(2.0f*spin.x*spin.x-(1.0
63           f-spin.z*spin.z)) - mes.04*(2.0f*spin.z*spin.
64             z-1.0f)) * E.y;
```

```

47         const float delta_o_y = (-mes.03-2.0f*mes.02*(2.
           0f*spin.x*spin.x-(1.0f-spin.z*spin.z)) + mes.
           04*(2.0f*spin.z*spin.z-1.0f)) * E.x
48     + (mes.01*spin.z-4.0f*mes.02*spin.x*spin.y) *E.y
           ;
49     const float delta_o_z = ( mes.07*spin.x + mes.08
           *2.0f*spin.y*spin.z) * E.x
50     + (mes.07*spin.y-mes.08*2.0f*spin.x*spin.z) *E.y
           ;
51
52     // store induced orbital moment to global memory
53     grid.s2Orbit[ig] = make_float3(delta_o_x,
           delta_o_y, delta_o_z);
54     }
55 }
56 }

```

Der intraatomare Austausch, Gleichung 3.11, und die Spin-Bahn-Kopplung, Gleichung 3.10, sind implementiert* als:

Quellcode A.2: Implementierung des Intraatomaren-Austauschs und der Spin-Bahn-Kopplung.

```

1  __device__ inline float3 __getInducedCouplings(
2  [[maybe_unused]] float3 const *s2Spin,
3  [[maybe_unused]] float3 const *s2Orbit,
4  [[maybe_unused]] const int ig,
5  [[maybe_unused]] const int sl){
6      // normally there would be the division by: (2.0f *
           SI_muBohr);
7      // this is already done at the readin of zeta in Llg_t.
           cpp
8      return constMem_Jsd * s2Spin[ig] - constMem_Zeta *
           constMem_mu[sl] * s2Orbit[ig];
9  }

```

Das Schlüsselwort `__device__` ist ein Ausführungsort-Identifizierer und beschreibt, dass diese Funktion auf der Grafikkarte aufgerufen wird. Sie ist dann nur von CUDA-Kernels aufrufbar. Das Gegenstück ist `__host__`, dieses bestimmt den Ausführungsort als den CPU-Teil des Programms. Eine Funktion kann auch beide Attribute haben. Die Implementierung des interatomaren Austauschs wird im folgenden Abschnitt A.3.2 gezeigt.

*Beachte den Vorzeichenwechsel wegen dem effektiven Feld $\vec{h}_I = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_i}$.

A.3 CUDA: RANDOM-MATRIX-MODE

A.2.2 *spinsim* Suszeptibilitätsmatrizen

Die zur Bestimmung der Resonanzfrequenz, siehe Abschnitt 3.4.2, im CPU-Code *spinsim* verwendeten Suszeptibilitätsmatrizen. Sie sind nicht korrekt berechnet und hier nur zur Nachvollziehbarkeit gelistet.

Tabelle A.1: Die (falschen) Konstanten der REE-Tensoren für Spin- und Bahnkomponenten im *spinsim*. Die beiden Vorzeichen beziehen sich auf beiden Untergitter Mn A Mn B . Die Elektronenzustandslebensdauer beträgt $\tau = 100$ fs.

Konstante $\{\cdot\}_i$	$C_i^S [\mu_B \text{ m V}^{-1}]$	$C_i^L [\mu_B \text{ m V}^{-1}]$
1	$\begin{smallmatrix} + \\ + \end{smallmatrix} 4,7018 \cdot 10^{-12}$	$\begin{smallmatrix} - \\ - \end{smallmatrix} 6,496 \cdot 10^{-12}$
2	$\begin{smallmatrix} - \\ + \end{smallmatrix} 3,8805 \cdot 10^{-12}$	$\begin{smallmatrix} - \\ + \end{smallmatrix} 1,765 \cdot 10^{-12}$
3	$\begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 4,954 \cdot 10^{-12}$	$\begin{smallmatrix} + \\ - \end{smallmatrix} 2,364\,296 \cdot 10^{-10}$
4	$\begin{smallmatrix} - \\ + \end{smallmatrix} 1,97 \cdot 10^{-13}$	$\begin{smallmatrix} - \\ + \end{smallmatrix} 2,4545 \cdot 10^{-12}$
7	$\begin{smallmatrix} + \\ + \end{smallmatrix} 4,7018 \cdot 10^{-12}$	$\begin{smallmatrix} - \\ - \end{smallmatrix} 6,496 \cdot 10^{-12}$
8	$\begin{smallmatrix} + \\ + \end{smallmatrix} 2,3509 \cdot 10^{-12}$	$\begin{smallmatrix} - \\ - \end{smallmatrix} 3,248 \cdot 10^{-12}$

A.3 CUDA: Random-Matrix-Mode

Im normalen Matrix-Modus des *cuteLLG*-Codes werden tensorielle Austauschwechselwirkungen J_{ij} in Form von 3×3 Matrizen bei der Berechnung des Austauschterms

$$\mathcal{H}_{exc} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \vec{S}_i^T J_{ij} \vec{S}_j \quad (\text{A.3})$$

verwendet. In einer Nachbarschaftsliste sind für jedes Untergitter die drei relativen Koordinaten (k, l, m) und die zugehörigen J_{ij} der Nachbarn, mit denen wechselgewirkt wird, abgespeichert. Bei Berechnung des Austauschterms wird für jeden Spin die zu seinem Untergitter gehörenden Nachbarn über die (k, l, m) bestimmt und die Wechselwirkung ausgewertet. Das funktioniert nur, wenn das Material homogen und periodisch ist, wie in Abbildung A.2 (a) zu sehen. Mit (Unter-)Gittern beziehen wir uns in diesem Abschnitt immer auf das Hostgitter, das das Programm verarbeitet. Das materialabhängige

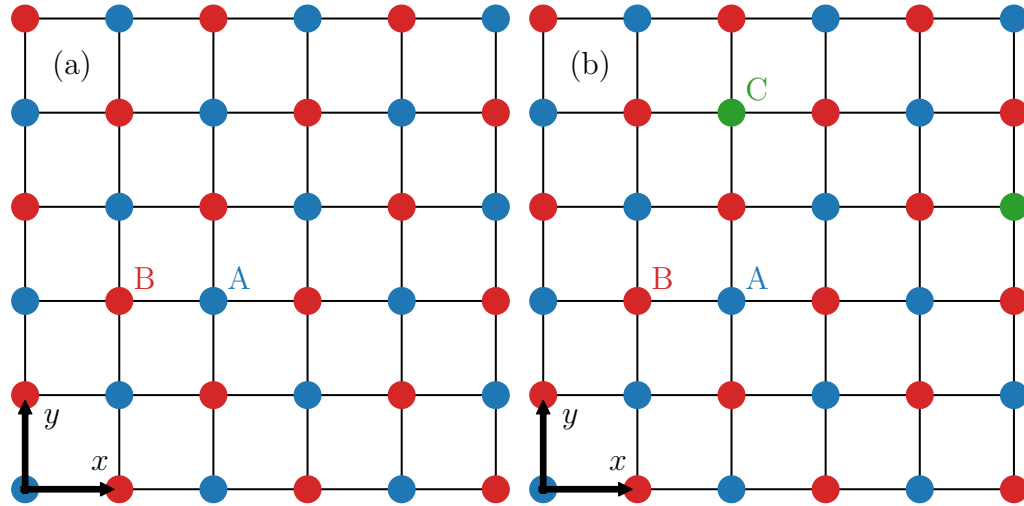


Abbildung A.2: Schematische Toy-Modell: (a) ein Modell eines periodischen, schachbrettartigen Atommodells bestehend aus zwei Atomsorten rot und blau. Aus den relativen Nachbarkoordinaten lässt sich das Untergitter des Nachbarn bestimmen. Werden blaue Atome zufällig durch eine dritte Atomsorte (grün) ersetzt (b), ist das nicht mehr der Fall.

Gitter nennen wir Spingitter. Diese sind nicht zwingend deckungsgleich* und das Hostgitter hat immer die Form eines sc-Gitters. Eine mögliche Nachbarschaftsliste für Untergitter A in Abbildung A.2 (a) sähe dann wie Tabelle A.2 aus. Sie enthält implizit die Untergitterindizes der Nachbarn.

Tabelle A.2: Beispielhafte Nachbarschaftsliste von A in Abbildung A.2 (a).

k	l	m	$J_{ij}^{A,A}$	impliziertes sln
0	± 1	0	$1 \cdot \mathbb{1}$	B
± 1	± 1	0	$2 \cdot \mathbb{1}$	A
± 1	0	0	$1 \cdot \mathbb{1}$	B
∓ 1	± 1	0	$2 \cdot \mathbb{1}$	A

In dotierten Materialien oder Doppelschichten kann die Wechselwirkungsmatrix im Austauschterm von Gleichung 3.13 nicht mehr einfach über die

*Faktisch fast nie deckungsgleich, außer es handelt sich um ein monotomisches sc-Gitter oder es wird mir Leerstellen gerechnet.

A.3 CUDA: RANDOM-MATRIX-MODE

Struktur bestimmt werden. Werden einzelne blaue Atome in Abbildung A.2 (b) durch eine dritte Atomsorte (grün) ersetzt, so kann von Untergitter B der Nachbarn $(k, l, m) = (0, \pm 1, 0)$ entweder A oder C sein. Wir müssen also explizit den Untergitterindex des Nachbarn bestimmen, um die richtige Wechselwirkung anzuwenden*.

Wir benötigen einen Modus, der für einen relativen Nachbarn die Wechselwirkung mit allen Untergittern abspeichert und dann nach der benötigten Wechselwirkung filtert. Diesen nennen wir Zufalls-Matrizen-Modus (*englisch*: random-matrix-mode, RMAT). Bei einem einfachen Toy-Modell mit drei Untergittern A , B und C , wie in Abbildung A.2 (b), sähe die Liste für A beispielsweise so aus wie in Tabelle A.3.

Tabelle A.3: Beispielhafte Nachbarschaftsliste von A in Abbildung A.2 (b).

k	l	m	$J_{ij}^{A,A}$	$J_{ij}^{A,B}$	$J_{ij}^{A,C}$
0	± 1	0	$0 \cdot \mathbb{1}$	$1 \cdot \mathbb{1}$	$3 \cdot \mathbb{1}$
± 1	0	0	$0 \cdot \mathbb{1}$	$1 \cdot \mathbb{1}$	$3 \cdot \mathbb{1}$
± 1	± 1	0	$2 \cdot \mathbb{1}$	$0 \cdot \mathbb{1}$	$1 \cdot \mathbb{1}$
∓ 1	± 1	0	$2 \cdot \mathbb{1}$	$0 \cdot \mathbb{1}$	$1 \cdot \mathbb{1}$

A.3.1 Algorithmus

Zur Implementierung des RMAT wollen wir zuerst den groben Ablauf in Pseudocode festhalten. Der Algorithmus zur Bestimmung der Wechselwirkung eines Spin $\vec{S}_i$ mit den Koordinaten (x, y, z) funktioniert, wie in dem Ablaufdiagramm in Abbildung A.3 gezeigt.

Um keinen Speicherplatz zu verschwenden, werden die Austauschlisten vorher komprimiert. Das Verfahren ist in Abbildung A.2 schematisch abgebildet. Ausgehend von der eingelesenen Matrix Tabelle A.3 werden die J_{ij} abgespeichert, wobei doppelt vorkommende Matrizen nur einmal eingetragen werden. Jedes J_{ij} bekommt eine eindeutige $ID^\dagger$. Triviales Beispiel für eine mehrfach vorkommende Matrix ist die Nullmatrix, falls es keine Wechselwirkung an einem Gitterplatz zwischen zwei Untergitter gibt. Die relativen

*Im Übertrag auf unser Modell: Während in einem homogenen Mn_2Au der Nachbar $(0, 0, +2)$ ausgehend vom untersten Mn_B Atom in Abbildung 3.5 immer ein Mn_B Atom ist, so das in dem zufällig besetzten Py nicht eindeutig bestimmbar. Auch die Wechselwirkung der Mn_B - und Py-Atome an der Grenzschicht kann nur aufwendig mit einer allgemeinen Nachbarschaftsliste gelöst werden.

[†]In der Implementierung der Zugriffsindex des Felds, in dem die Daten liegen.

Berechne Austausch für Spin S_i :				
$\mathcal{H}_{exc} := 0$				
$sl := \text{Untergitter}(S_i)$				
$\forall (k, l, m) \in \text{Nachbarschaftsliste}(S_i)$				
<table> <tr> <td>$S_j := \text{Spin_an_Gitterplatz}(x + k, y + l, z + m)$</td></tr> <tr> <td>$sln := \text{Untergitter}(S_j)$</td></tr> <tr> <td>$J_{ij}^{sl, sln} := \text{Wechselwirkungsmatrix}((k, l, m), sl, sln)$</td></tr> <tr> <td>$\mathcal{H}_{exc}^{S_i} += -\frac{1}{2} S_i J_{ij}^{sl, sln} S_j$</td></tr> </table>	$S_j := \text{Spin_an_Gitterplatz}(x + k, y + l, z + m)$	$sln := \text{Untergitter}(S_j)$	$J_{ij}^{sl, sln} := \text{Wechselwirkungsmatrix}((k, l, m), sl, sln)$	$\mathcal{H}_{exc}^{S_i} += -\frac{1}{2} S_i J_{ij}^{sl, sln} S_j$
$S_j := \text{Spin_an_Gitterplatz}(x + k, y + l, z + m)$				
$sln := \text{Untergitter}(S_j)$				
$J_{ij}^{sl, sln} := \text{Wechselwirkungsmatrix}((k, l, m), sl, sln)$				
$\mathcal{H}_{exc}^{S_i} += -\frac{1}{2} S_i J_{ij}^{sl, sln} S_j$				

Abbildung A.3: Ablaufdiagramm des RMat-Algorithmus zur Berechnung von $\mathcal{H}_{exc}$ von einem Spin S_i .

Nachbarschaftskordinaten (k, l, m) werden in eine eigene Liste mit eigenem Index $idx^\dagger$ gespeichert. Zusätzlich wird eine Liste erstellt, deren Index[†] dem der Nachbarschaftskordinaten (k, l, m) entspricht. Hier werden die (k, l, m) und die Untergitter der Nachbarn sln miteinander verknüpft, indem für jedes Untergitter die zugehörige Matrix abgespeichert wird. Wechselwirken sie nicht miteinander, wird die Nullmatrix eingetragen. Die Kompression erfolgt dadurch, dass nur eindeutige J_{ij} abgespeichert werden. Der freie Speicherplatz von $9 * 32 \text{ bit} = 288 \text{ bit}$ pro eingesparter Matrix steht einem Mehrverbrauch von 16 bit gegenüber.

A.3.2 Implementierung

Implementiert ist die Berechnung des Austauschfelds in der `__device__`-Funktion `__getExchangeField`, welche neben den globalen Gitterkoordinaten xg, yg, zg auch die Koordinaten im *shared memory* xs, ys, zs sowie den Untergitterindex sl als Parameter nimmt.

A.3 CUDA: RANDOM-MATRIX-MODE

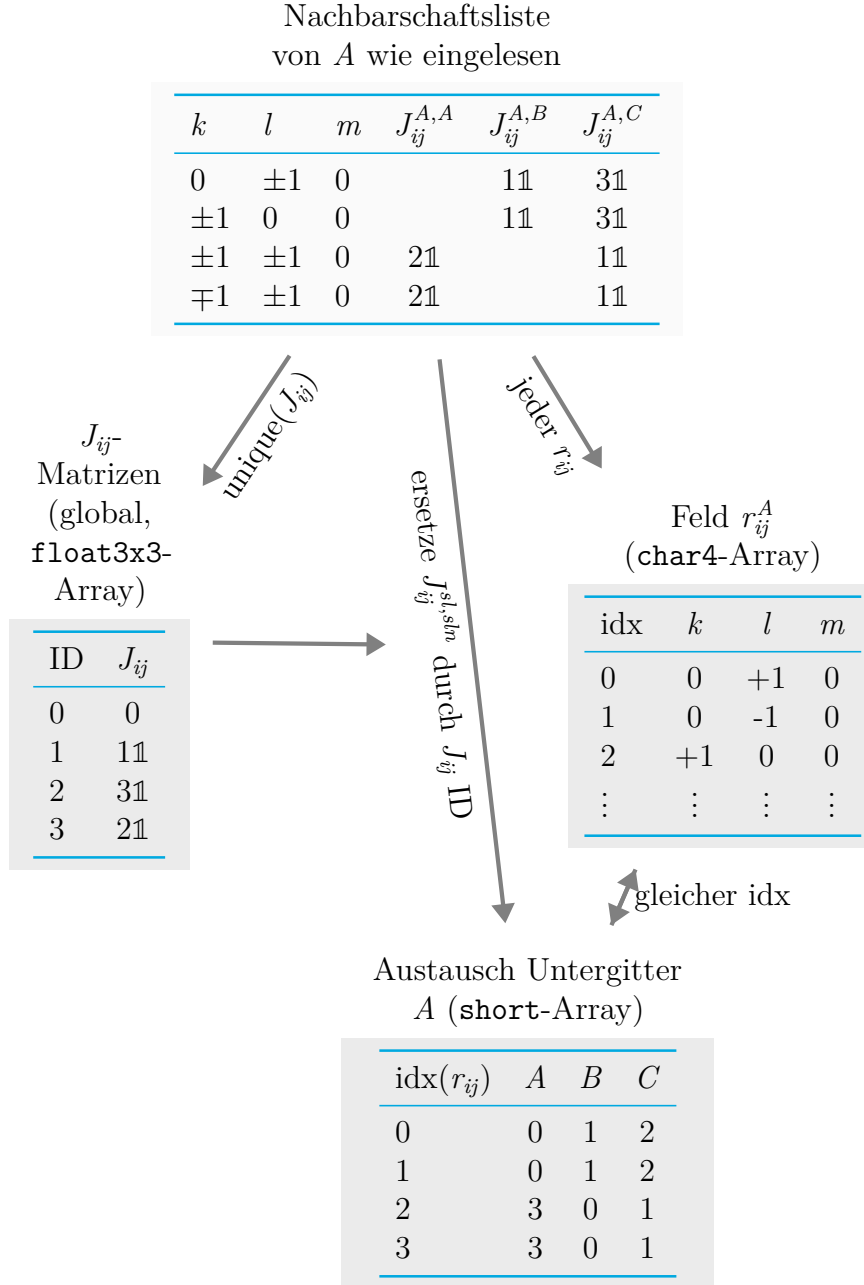


Abbildung A.4: Schematischer Ablauf des Konvertierungsprozesses des RMAT. Die J_{ij} Matrizen werden global über alle Untergitter abgespeichert, wobei der Zugriffsindex im Array die ID ist. Die relativen Nachbarschaftskordinaten r_{ij}^{sl} sind ebenfalls mit ihren Zugriffsindex durchnummeriert. Die Austausche werden in gleicher Reihenfolge abgespeichert.

Quellcode A.3: Implementierung des RMat in *cuteLLG 2.0*

```

1  __device__ inline float3 __getExchangeField(
2  float3 const* tile, int xs, int ys, int zs,
3  const int tileWidth, const int tileHeight,
4  [[maybe_unused]] int xg,
5  [[maybe_unused]] int yg,
6  [[maybe_unused]] int zg,
7  const int sl,
8  [[maybe_unused]] GridInfo_t const& grid)
9  {
10     char4 rij;
11     float3 H_ex = zero_float3;
12
13     // sublattice index of the neighboring spin
14     int sln;
15
16     //startindex in the global rij array
17     short int rijIdx = constMem_offsetSublattice[sl];
18     // startindex in the global exchange sublattice array
19     short int exchSlIdx = constMem_offsetExchSl[sl];
20
21     const int width  = grid.stride.x;
22     const int height = grid.stride.y;
23
24     // go through every relative neighbour coordinate r_ij
25     while(rijIdx < constMem_offsetSublattice[sl+1])
26     {
27         //load neighbour coordinates
28         rij = constMem_rij[rijIdx];
29         //load neighbours sublattice index
30         sln = grid.typeField[idx(xg + (int)rij.x, yg + (int)
31                                rij.y, zg + (int)rij.z, width, height)] - 1;
32
33         //load the exchange matrix
34         const int jijIdx = constMem_exchSl[exchSlIdx + sln];
35         const float3x3 jij = constMem_Jij[jijIdx];
36         H_ex += jij * (tile[idx(xs+rij.x, ys+rij.y, zs+rij.z,
37                                tileWidth, tileHeight)]
38                       + grid.s2Spin[idx(xg+rij.x, yg+rij.y, zg+rij.z,
39                                           width, height)]);

```

In die Berechnung von H_{ex} fließt der Interatomare-Austausch Gleichung 3.12 ein. In rij.w ist die Anzahl an Untergittern gespeichert.

A.4 UMSETZUNGSTABELLE: CUDA-*TEXTURE* MEMORY

```
36         //increment by the sublattice count
37         exchSlIdx += rij.w;
38         rijIdx++;
39     }
40     return H_ex;
41 }
```

In einem Benchmark-Test benötigte der in *cuteLLG* implementierte isotrope Austauschmodus* für die Berechnung eines Toymodels 4:19:44,220 und der RMAT 4:43:43,520, ist also nur unwesentlich (9%) langsamer. Das ist so besonders, da der isotrope Austausch bereits auf maximale Effizienz getrimmt ist.

A.4 Umsetzungstabelle: CUDA-*texture memory*

Ein einfacher Ansatz zur Darstellung eines Feldpulses ist das Anpassen einer Funktion an experimentell gewonnene Daten. Bei einem komplexen Feldverlauf, wie der des Pulses in Abbildung 3.3, ist eine Kombination vieler trigonometrischer Funktionen notwendig, um auch die Reflexionen darstellen zu können. Eine andere Möglichkeit ist, den Feldverlauf in eine Umsetzungstabelle zu übertragen und die Zwischenwerte bei Bedarf zu interpolieren. In Grafikarten mit CUDA wird ein solcher Prozess häufig bei Texturen wie z. B. dreidimensionalen Oberflächen angewendet. Für eine effiziente Abwicklung dieser Nachschlag- und Interpolationsprozesse gibt es direkte Hardware-Unterstützung in Form von Textureinheiten (*englisch*: texture mapping units, TMUs)^[88]. Diese dedizierten Prozessoren sind ausschließlich für das Verarbeiten solcher Texturen entwickelt und bieten mit dem *texture memory* einen eigenen Speicherbereich zur Ablage von Texturdaten. Eigentlich für die Computergrafik entwickelt, werden hier normalerweise Oberflächen von Objekten abgelegt. Diese werden dann auf dreidimensionale Objekte projiziert und sorgen so für realistische Darstellungen von modellierten Objekten. Nachdem das *constant memory*, ein von allen Prozessoren der Grafikkarte geteilter, sehr schneller, aber nur lesbarer und kleiner (64 kB) Speicherchip, bereits ausgelastet ist, bietet das *texture memory* eine Möglichkeit, diese Speicherbegrenzung zu umgehen und trotzdem schnelle Lesezugriffe zur Verfügung zu stellen. Nebenbei kann es auf die TMUs zugreifen.

*Wie der Name schon sagt, werden in diesem Modus alle Wechselwirkungen isotrop berechnet. Es muss nur ein 32 bit float aus dem Speicher geladen und keine Vektor-Matrix-Multiplikation durchgeführt werden. Im Vergleich zum RMAT ist die Anzahl modellierbare Wechselwirkungsarten (z. B. Zwei-Ionen-Anisotropie, Dzyaloshinskii-Moriya Wechselwirkung) gering.

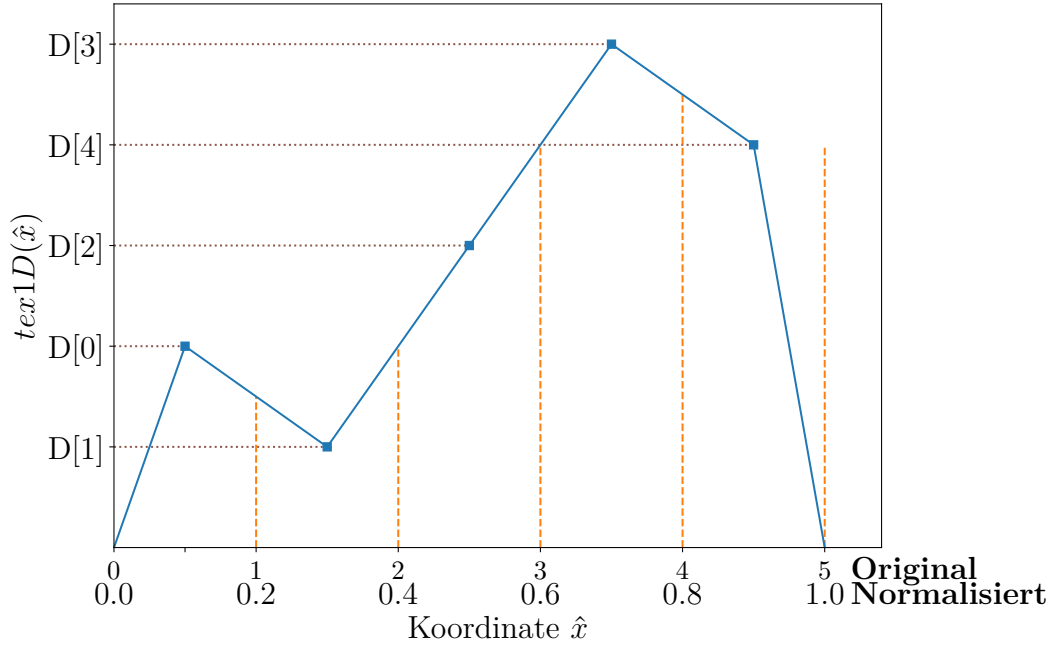


Abbildung A.5: Schematische Darstellung einer Umsetzungstabelle in CUDA mit den Werten aus dem Datenfeld D mit dazugehörigen originalen und normalisierten Koordinaten, wie sie in CUDA angesprochen werden. Grafik in Anlehnung an *NVIDIA: CUDA C++ Programming Guide - Texture Memory*^[89].

In einem Datenfeld D seien in unserem Beispiel $N = 5$ Datenpunkte gespeichert, nummeriert mit den Indizes $0, \dots, 4$. Es könnten Feldwerte eines Pulses mit einer Länge von T sein. Bei linearer Interpolation zwischen den gegebenen Werten ergibt sich in CUDA die in Abbildung A.5 dargestellte Form der Abspeicherung, in der die Indizes um 0,5 verschoben wurden. So gibt es für D die zwei Grenzindizes 0 und 5,0, an welchen (wie bei allen Indizes außerhalb) der Wert 0 zurückgegeben wird. Um auf einen Feldwert zuzugreifen wird die Zeit t in die entsprechende CUDA *texture memory* Koordinate

$$\hat{x} = \frac{t}{T} + \frac{0,5}{N}$$

umgerechnet.

A.4.1 Implementierung

Im `namespace zeeman_n` werden die benötigten Attribute angelegt. Das sogenannte `cudaTextureObject_t` beschreibt die Textur und beinhaltet die Einstellungen zum Lese- und Interpolationsverhalten. Im `cudaArray_t` sind die

A.4 UMSETZUNGSTABELLE: CUDA-TEXTURE MEMORY

Feldwerte abgespeichert. Die Zeitwerte werden später aus der Abtastfrequenz `timeSpacingLookup` und der Länge der Lookup-Tabelle in Indizes umgerechnet.

Quellcode A.4: Implementierung der Umsetzungstabelle in CUDA

```
1 namespace zeeman_n {
2     cudaTextureObject_t lookupTex = 0;
3     cudaArray_t fieldvals = NULL;
4     float timeSpacingLookup;
5     std::vector<float> timeLookup;
6     std::vector<float> fieldLookup;
7 }
```

Das `cudaChannelFormatDesc`-Objekt beschreibt, was für ein Datentyp in dem `cudaArray_t fieldvals` gespeichert wird, welches dann mit `cudaMallocArray` alloziert wird. Schlussendlich werden noch die Feldstärkewerte in das `cudaArray` geschrieben.

```
8 __host__ int zeeman_n::readFieldLookup(const int argc, const
9     char *argv[]){
10     // the normal preparation stuff
11     // ..... (some stuff here, read and check args, ...)
12     // read in file with two columns, first time in seconds
13     // and second field in normalised values
14     // time stored in zeeman_n::timeLookup, field values in
15     // zeeman_n::fieldLookup
16
17     struct cudaChannelFormatDesc channelDesc =
18         cudaCreateChannelDesc<float>();
19     cudaSafeCall( cudaMallocArray(&zeeman_n::fieldvals, &
20         channelDesc, zeeman_n::fieldLookup.size(), 1) );
21     cudaSafeCall( cudaMemcpy2DToArray(zeeman_n::fieldvals, 0
22         , 0, zeeman_n::fieldLookup.data(), zeeman_n::
23         fieldLookup.size()*sizeof(float),
24         zeeman_n::fieldLookup.size()*sizeof(float), 1,
25         cudaMemcpyHostToDevice) );
26
27     struct cudaResourceDesc resDesc;
28     memset(&resDescLinear, 0, sizeof(resDesc));
29     resDesc.resType = cudaResourceTypeArray;
30     resDesc.res.array.array = zeeman_n::array_cu;
```

Zur Steuerung der TMU wird ein `cudaTextureDescriptor` verwendet. Hier wird als Filtermethode `filterMode` lineare Interpolation zwischen den einzelnen Datenpunkten eingestellt. Wird also ein Feldwert für einen Zeitpunkt benötigt, der nicht exakt mit einem abgespeicherten übereinstimmt, wird zwischen den beiden nächsten Datenpunkten interpoliert. Der Schalter `normalizedCoords`

wird verwendet, da so die Eingabekoordinaten x_t unabhängig von der Länge der Umsetzungstabelle sind. Dementsprechend gilt $x_t \in [0, 1 - 1/N]$. Der `readMode` bezeichnet, ob das Ergebnis normalisiert oder wie eingegeben zurückgegeben wird. Mit `cudaReadModeElementType` wird der eingelesene Wert zurückgegeben. Zuletzt sorgt der `adressMode[0] = cudaAdressModeBorder*` dafür, dass falls $x_t \notin [0, 1 - 1/N]$ [†] der Wert 0,0 zurückgegeben wird. Zuletzt wird die Textur dann erzeugt und auf dem *constant memory* abgelegt. Damit ist sie für die TMUs auffindbar.

```

23     struct cudaTextureDesc texDesc;
24     memset(&texDescLinear, 0, sizeof(texDesc));
25     texDesc.filterMode = cudaFilterModeLinear;
26     texDesc.normalizedCoords = 1;
27     texDesc.readMode = cudaReadModeElementType;
28     texDesc.addressMode[0] = cudaAddressModeBorder;
29     cudaSafeCall( cudaCreateTextureObject(&zeeman_n::
        lookupTex, &resDesc, &texDesc, nullptr) );
30     cudaSafeCall( cudaMemcpyToSymbol(constMem_lookup_tex, &
        zeeman_n::lookupTex, sizeof(cudaTextureObject_t)) );

```

Unter der Annahme, dass die gegebenen Datenpunkte zeitlich in gleichem Abstand verteilt sind, wird, um geringfügige Abweichungen auszugleichen, das notwendige Skalierungsverhältnis `scalingRatio` berechnet und, wegen des Geltungsbereiches der normalisierten Koordinaten, ein Skalierungsversatz berechnet. Beide werden auf dem *constant memory* allen Threads zugänglich gemacht.

```

31     float scalingRatio = (float) 1.0f / ((double) zeeman_n::
        timeLookup.back());
32     cudaSafeCall( cudaMemcpyToSymbol(
        constMem_lookup_scaling_ratio, &scalingRatio, sizeof(
        float)) );
33     float scalingOffset = (float) 0.5f/zeeman_n::timeLookup.
        size();
34     cudaSafeCall( cudaMemcpyToSymbol(constMem_scaling_offset
        , &scalingOffset, sizeof(float)) );
35     return status;
36 }

```

Der schlussendliche Funktionsaufruf zur Berechnung des Felds erfolgt dann nur noch mit einer Indexskalierung der angefragten Zeit und gibt die

*Der Index bezeichnet die Textur-Koordinatenachsen. Es ist also möglich, allen Dimensionen ein individuelles Verhalten bei Koordinaten außerhalb der Grenzen mitzugeben. In dem Fall des Feld-Lookups gibt es nur die Zeit-Dimension.

[†]Es ist ein valider Aufruf eine Textur außerhalb ihrer definierten Koordinaten aufzurufen^[88,89].

A.4 UMSETZUNGSTABELLE: CUDA-*TEXTURE MEMORY*

eindimensionale Interpolation zurück. Anzumerken ist, dass hier nur die Implementierung für die GPU gezeigt ist. Im vollständigen Code sind noch die Bestandteile für den CPU-Teil, welcher die Feldstärke separat mit einer eigenen linearen Interpolation berechnet, da der CPU-Teil nicht auf die TMUs zugreifen kann. Diese ist im Rahmen der Arbeit implementiert worden und deckungsgleich mit den CUDA-Ergebnissen.

Quellcode A.5: Aufruf der Umsetzungstabelle.

```
1  __host__ __device__ float zeeman_n::fieldFunction([[
    maybe_unused]] float time){
2      return tex1D<float>(constMem_lookup_tex,
        constMem_lookup_scaling_ratio*time +
        constMem_scaling_offset);
3  }
```

A.5 Lineare Antwort: Resonanzfrequenzen des Permalloy

Hier sind die Anpassungen (a) und FFTs (b) der Kurven, deren Resonanzfrequenzen in Abbildung 3.12 abgebildet, aber nicht gezeigt sind, zu finden. Sie sind in Abbildung A.6 abgebildet.

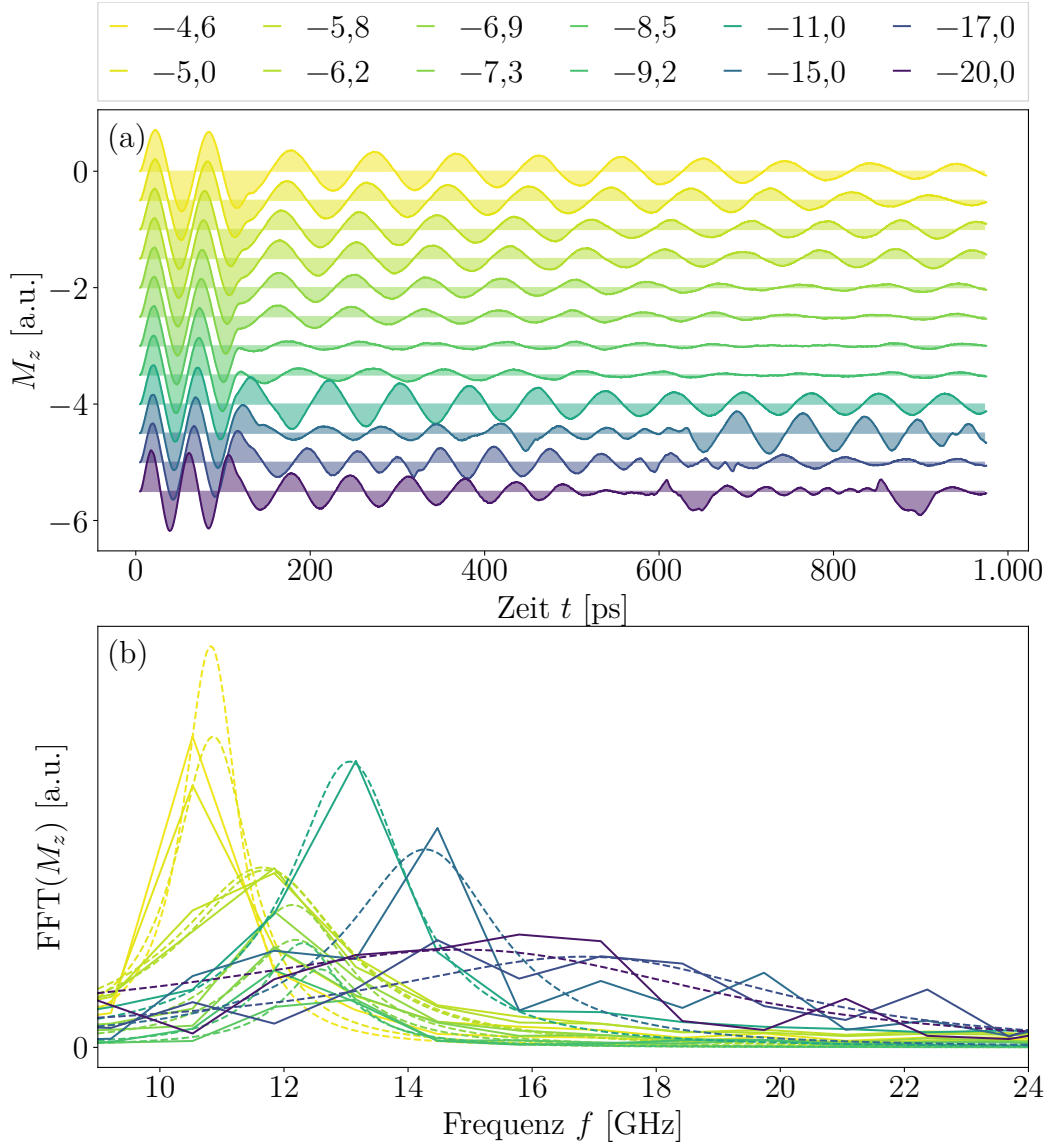


Abbildung A.6: Die Kurven und dazugehörigen Fouriertransformationen mit Anpassung einer Lorentz-Funktion zur Bestimmung der Resonanzfrequenz f_{res} der M_z -Komponenten des Py bei verschiedenen Kopplungsstärken J_{inter} (Legende oben) in meV. Die Frequenzen sind in Abbildung 3.12 (d) aufgetragen.

A.6 Ensembles des Mn_2Au

Die Ensembles der gemittelten Polarwinkel (b–g), die in Abbildung 4.1 dargestellt sind. Der anregende THzP ist in (a) zu sehen.

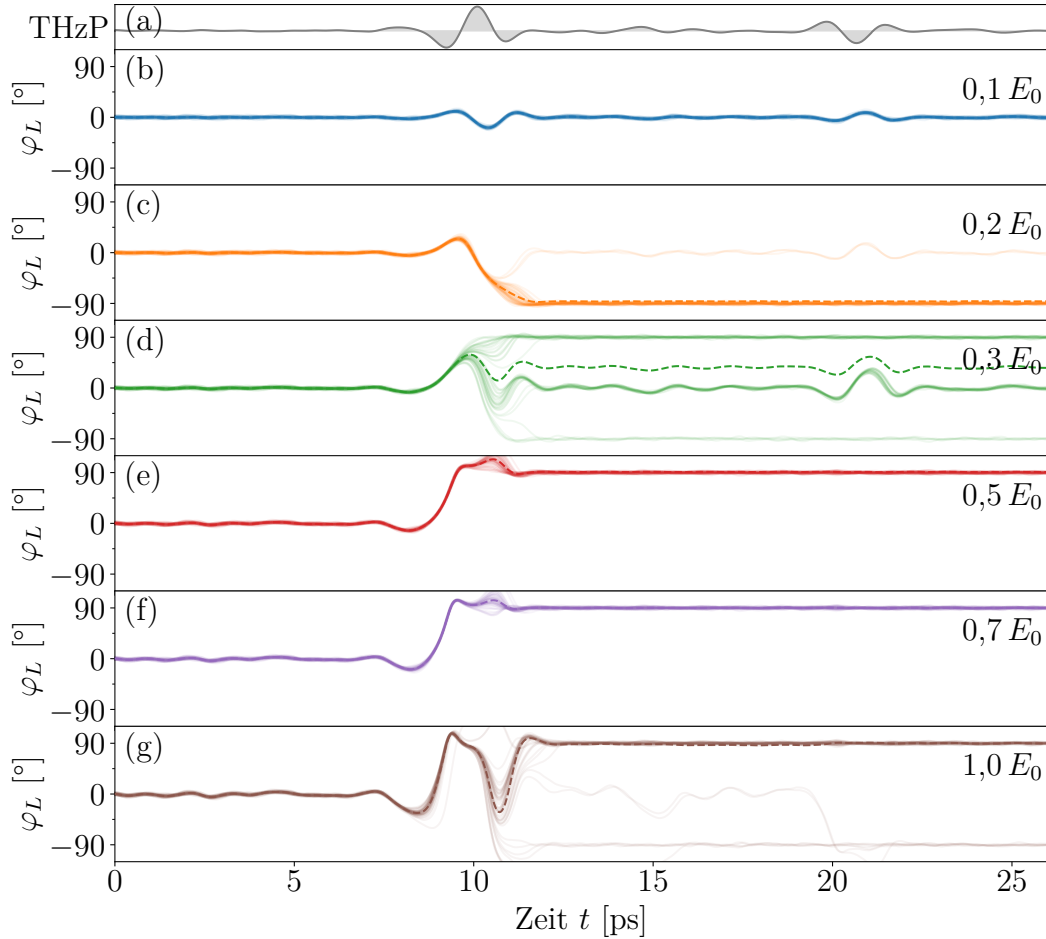
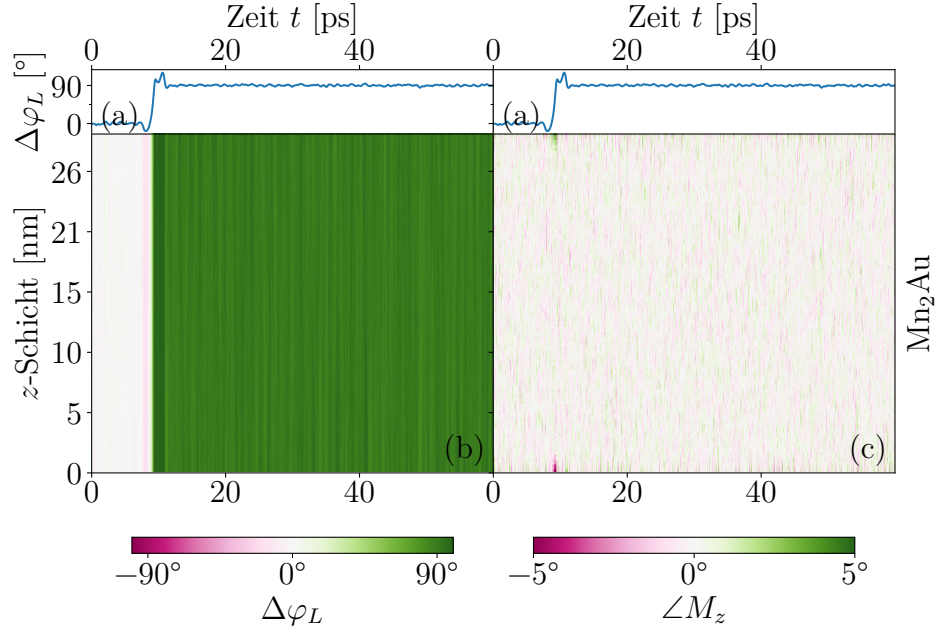


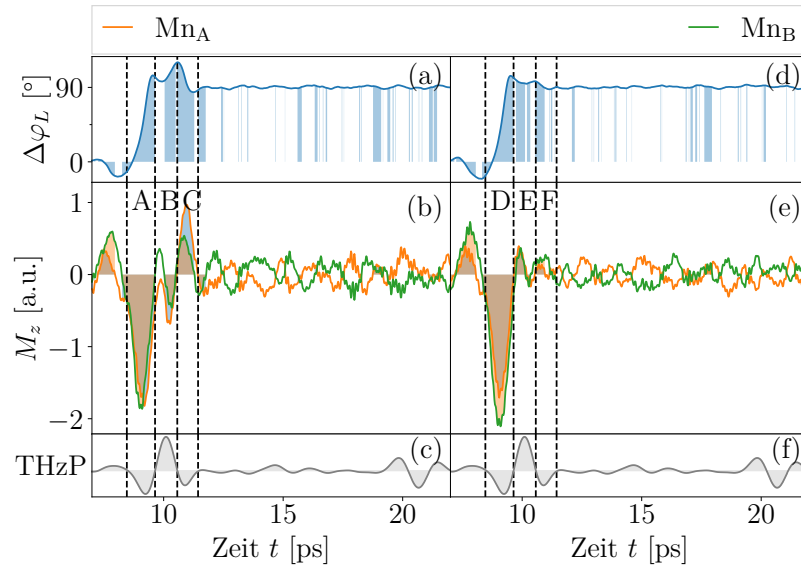
Abbildung A.7: Die Ensembles der Schaltprozesse bei verschiedenen Feldstärken in reinem Mn_2Au über der Zeit.

A.7 Schichtaufgelöste Schaltprozesse in Mn_2Au

In Abbildung A.8a und Abbildung A.9a sind die schichtaufgelösten Schaltprozesse für $0,7 E_0$ und $1,0 E_0$ abgebildet. Beide zeigen das gleiche kohärente Verhalten im Polarwinkel $\Delta\varphi_L$ wie bereits in Abbildung 4.5.



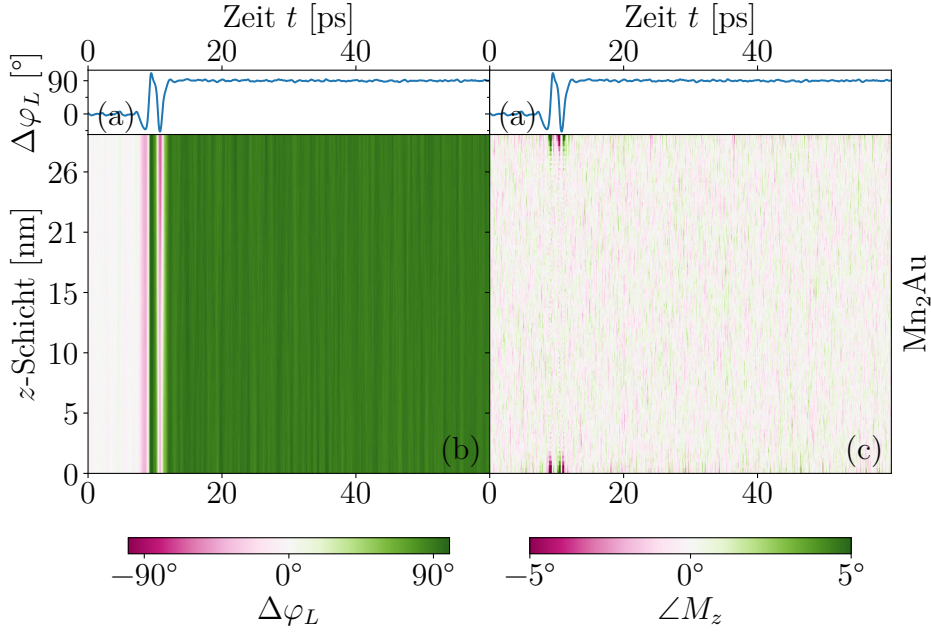
a In (a) der $\Delta\varphi_L$ über der Zeit aufgetragen. In den Graphen (b/c) sind für verschiedene Zeiten der pro Schicht in z -Richtung gemittelte Polarwinkel $\Delta\varphi_L$ (b) und die Auslenkung $\angle M_z$ (c) abgebildet.



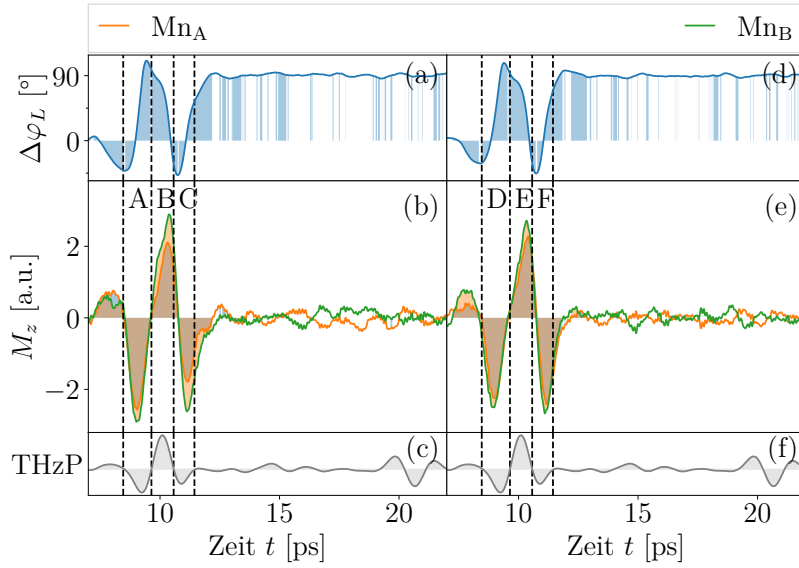
b In (a/d) ist der Néelwinkel $\Delta\varphi_L$ abgebildet. Die M_z der beiden Untergitter sind in (b/e) zu sehen, Bereiche, in denen beide gleiches Vorzeichen haben, sind eingefärbt (gleiche Einfärbungen in (a/d)). Der THzP ist in (c/f) abgebildet.

Abbildung A.8: Der schichtaufgelöste Schaltprozess a und die Verkantung b der Mn-Untergitter in zwei Simulationen bei einer Feldstärke von $0,7 E_0$.

A.7 SCHICHTAUFGELÖSTE SCHALTPROZESSE IN Mn_2Au



a In (a) der $\Delta\varphi_L$ über der Zeit aufgetragen. In den Graphen (b/c) sind für verschiedene Zeiten der pro Schicht in z -Richtung gemittelte Polarwinkel $\Delta\varphi_L$ (b) und die Auslenkung $\angle M_z$ (c) abgebildet.



b In (a/d) ist der Néelwinkel $\Delta\varphi_L$ abgebildet. Die M_z der beiden Untergitter sind in (b/e) zu sehen, Bereiche, in denen beide gleiches Vorzeichen haben, sind eingefärbt (gleiche Einfärbungen in (a/d)). Der THzP ist in (c/f) abgebildet.

Abbildung A.9: Der schichtaufgelöste Schaltprozess a und die Verkantung b der Mn-Untergitter in zwei Simulationen bei einer Feldstärke von $1,0 E_0$ aus Abbildung 4.1.

A.8 Dynamik der $\text{Mn}_2\text{Au|Py}$

Die Dynamik der Doppelschicht für zusätzliche Feldstärken und eine andere Grenzschichtkopplung. In Abbildung A.11 (b–h) die zusätzlichen Feldstärken, die nicht in Abbildung 4.7 abgebildet sind.

In Abbildung A.10 sind die Schaltensembles zu Abbildung 4.11 dargestellt, wobei eine Grenzschichtkopplung J_{inter} von $-3,8 \text{ meV}$ verwendet wurde.

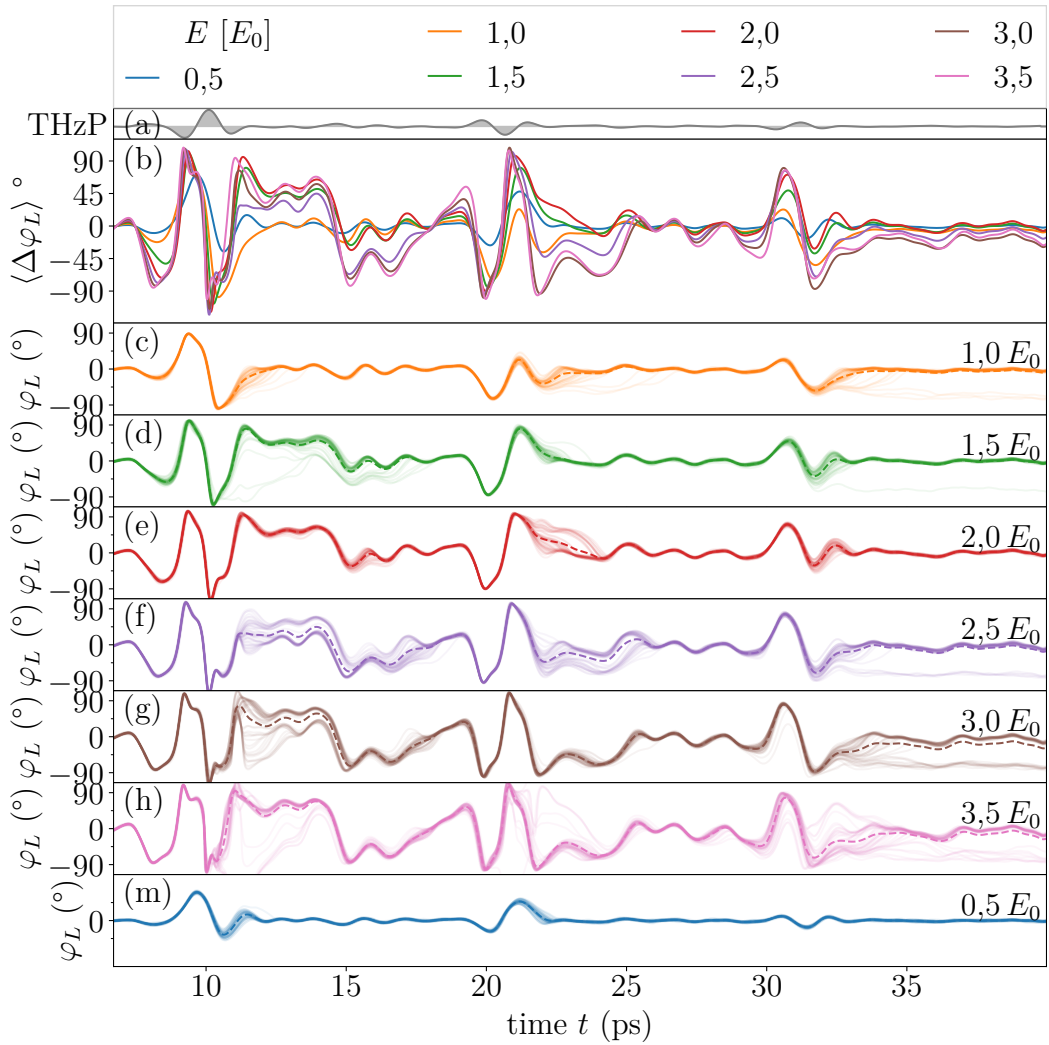


Abbildung A.10: Schaltprozesse (b) mit einer Grenzschichtkopplung von $J_{\text{inter}} = -3,8 \text{ meV}$ bei dem THzP (a). Die Grenzschichtkopplung führt zu einer falschen Resonanzfrequenz.

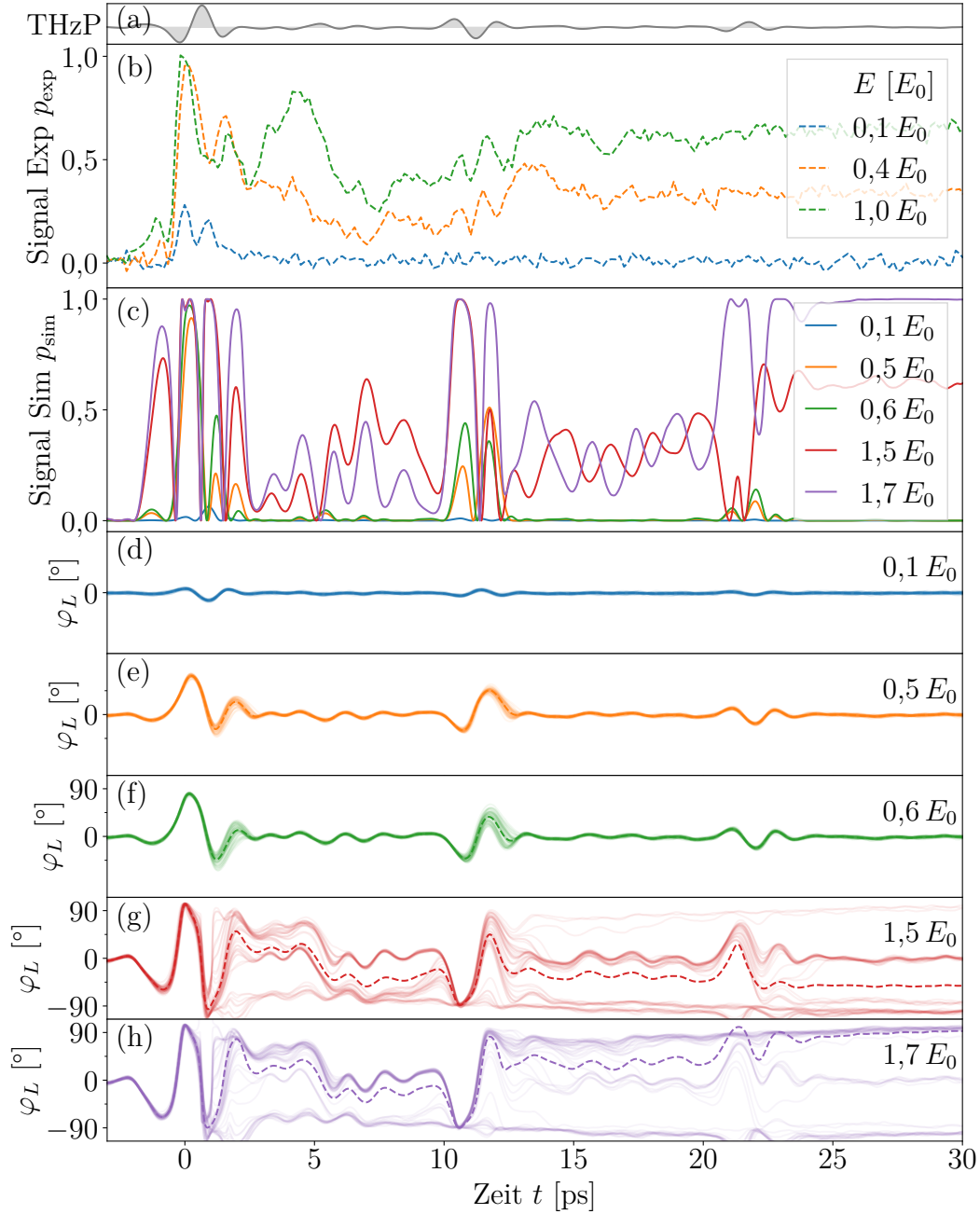


Abbildung A.11: Bestimmung der Grenzfeldstärke des THzP (a) in der Doppelschicht $\text{Mn}_2\text{Au|Py}$ im Vergleich zu den experimentellen Daten. In (b) ist das p_{exp} -Signal, Gleichung 3.4 des Experiments gezeigt, wie auch in Abbildung 3.4. Die simulierten Kurven mit dem äquivalenten p_{sim} , Gleichung 3.5, sind in (c) zu sehen. Die bei verschiedenen Feldstärken aufgenommenen Ensembles von 50 Kurven sind in (d–h) abgebildet, wobei die gestrichelte Linie den mittleren Néelwinkel $\langle \varphi_L \rangle$ des Ensembles darstellt, der auch die Grundlage von (c) bildet.

ERKLÄRUNG:

Ich versichere hiermit, dass ich die anliegende Abschlussarbeit mit dem Thema **„Simulation der terahertzinduzierten Spindynamik in Mn₂Au|Py-Doppelschichten“** selbständig verfasst und keine anderen Hilfsmittel und Quellen als die angegebenen benutzt habe.

Falls ich textgenerierende KI-Tools als Hilfsmittel verwendet habe, ist mir bewusst, dass ich allein für die inhaltliche Richtigkeit von KI generierten Textpassagen und die Kennzeichnung von Formulierungen und Ideen anderer Personen gemäß den Grundsätzen der guten wissenschaftlichen Praxis verantwortlich bin. Die Stellen, die anderen von natürlichen Personen verfassten Werken (auch aus dem Internet und oder anderen elektronischen Text- und Datensammlungen entnommen) dem Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, habe ich in jedem einzelnen Fall durch Angabe der Quelle bzw. der Sekundärliteratur als Entlehnung kenntlich gemacht.

Ich habe zur Kenntnis genommen, dass die Prüfungs- oder Studienleistung bei Täuschung über die Eigenständigkeit oder durch Benutzung nicht zugelassener oder ggf. zugelassener aber nicht ausreichend angegebener Hilfsmittel als „nicht bestanden (5,0)“ bewertet wird und dass in besonders schwerwiegenden Täuschungsfällen der zuständige Prüfungsausschuss mich von der Wiederholungsprüfung ausschließen kann mit der Folge des endgültigen Verlustes des Prüfungsanspruchs.

Weiterhin versichere ich hiermit, dass die o.g. Arbeit noch nicht anderweitig als Abschlussarbeit einer Diplom-, Bachelor- bzw. Masterprüfung eingereicht wurde. Mir ist ferner bekannt, dass ich bis zum Abschluss des Prüfungsverfahrens die Materialien verfügbar zu halten habe, welche die eigenständige Abfassung der Arbeit belegen können.

Die Arbeit wird nach Abschluss des Prüfungsverfahrens der Bibliothek der Universität Konstanz übergeben und katalogisiert. Damit ist sie durch Einsicht und Ausleihe öffentlich zugänglich. Die erfassten beschreibenden Daten wie z. B. Autor, Titel usw. stehen öffentlich zur Verfügung und können durch Dritte (z. B. Suchmaschinenanbieter oder Datenbankbetreiber) weiterverwendet werden.

Als Urheber der anliegenden Arbeit stimme ich dem obigen Veröffentlichungsverfahren zu.

Konstanz, den

(Fynn Renner)