

Domänenwandbewegung in magnetischen Nanostrukturen

Thomas Schrefl, Josef Fidler, Werner Scholz, Dieter Süss, Vassilios Tsiantos
Institut für Angewandte und Technische Physik
TU Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10, Austria

<http://atp6000.tuwien.ac.at/MAGNET/>

1 Problemstellung

Erscheinungen des Magnetismus sind aus dem täglichen Leben nicht mehr wegzudenken. Magnetische Werkstoffe sind wichtige Bestandteile in Transport- und Informationstechnologie, Maschinen und vielen anderen Systemen. Neben der magnetischen Datenspeicherung spielen magnetische Werkstoffe eine wichtige Rolle als Sensoren in vielen elektro-, magneto-mechanischen und elektronischen Anwendungen. Die Entwicklung moderner magnetischer Werkstoffe für Speichermedien mit hoher Speicherkapazität oder magnetische Sensoren erfordert die gezielte Optimierung der magnetischen Eigenschaften.

Simulationsrechnungen, wie sie im Projekt vorgesehen sind, können diese Effekte beschreiben und liefern die theoretischen Grundlagen für die Entwicklung zukünftiger Magnetwerkstoffe. Ein Beispiel sind magneto-elektronische Schaltelemente. Der elektrische Widerstand einer magnetischen Vielfachschicht hängt von der Magnetisierungsverteilung ab. Sogenannte "spin tunnel junctions" bestehen aus einer magnetisch harten Schicht, einer dünnen nichtleitenden und nichtmagnetischen Zwischenschicht und einer magnetischen weichen Schicht. Der elektrische Widerstand ist gering, wenn die beiden ferromagnetischen Schichten parallel magnetisiert sind. Der Tunnelstrom nimmt ab, wenn die Magnetisierung der beiden ferromagnetischen Schichten entgegengesetzt gerichtet sind. Die Magnetisierungsverteilung der weichmagnetischen Schicht kann durch ein äußeres Magnetfeld verändert werden. Das Schichtsystem dient als Sensor (Lesekopf) auf einer Festplatte, kann aber auch als Speicherelement in einem sogenannten MRAM (Magnetic Random Access Memory) eingesetzt werden. Durch Computersimulationen können die Eigenschaften von Sensorelementen genau vorhergesagt werden.

2 Numerische Methoden

Zeitabhängige Magnetisierungsvorgänge können auf einer Längenskala von einigen Nanometern durch die numerische Lösung der Gilbertgleichung simuliert werden.¹ Diese Gleichung beschreibt die Bewegung der Magnetisierung in einem effektiven Feld, das sich aus einem äußeren Magnetfeld, dem Entmagnetisierungsfeld, dem Austauschfeld und dem Anisotropiefeld zusammensetzt.

Das preprocessing tool MCS/PATRAN² wird verwendet, um das finite Elementgitter der Speicherschicht beziehungsweise eines Sensorelements zu erzeugen. Die Integration der Bewegungsgleichung erfolgt mit einer Rückwärtsdifferenzmethode. Dazu wird das Softwarepaket VODPK³ verwendet. Die Berechnung des Entmagnetisierungsfeldes erfordert unter anderem die Lösung der Laplacegleichung im Außenraum der Probe. Dazu wird eine Randintegralmethode verwendet. Bei der Implementierung wurde weitgehend auf Routinen der Programmierbibliothek VECFEM⁴ zurückgegriffen.

1. E. D. Dahlberg and J. G. Zhu, Micromagnetic Microscopy and Modeling, *Physics Today* 48, 34-40 (1995).

2. <http://www.macsch.com/>

3. A. C. Hindmarsh and L. R. Petzold, Algorithms and software for ordinary differential equations, part II: higher-order methods and software packages, *Computers in Physics* 9, 148-155, 1995.

3 Simulationsergebnisse

Die Abbildung 1 zeigt das Modellsystem zur Berechnung der Ummagnetisierung einer magnetischen Vielfachschicht. Die beiden Schichten sind durch eine nichtmagnetische Zwischenschicht von 1.5 nm Dicke getrennt. Die beiden Schichten werden in finite Elemente mit einer Elementgröße von 5 nm (in der oberen weichmagnetischen Schicht) und einer Elementgröße von 20 nm (in der unteren hartmagnetischen Schicht) unterteilt. Im remanenten Zustand (ohne äußeres Feld) können zwei unterschiedliche Domänenstrukturen auftreten. Die entsprechenden Domänenbilder sind in Abbildung 2 dargestellt. Die Gesamtenergie der beiden Strukturen unterscheiden sich um weniger als 0.2 Prozent. In einem realen Schaltelement treten daher beide Domänenstrukturen mit annähernd gleicher Wahrscheinlichkeit auf.

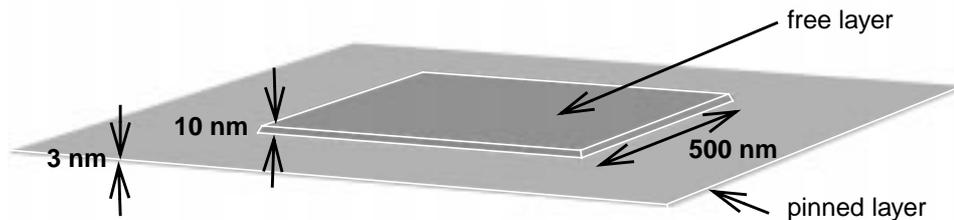


Abbildung 1: Modell einer patterned spin tunnel junction.

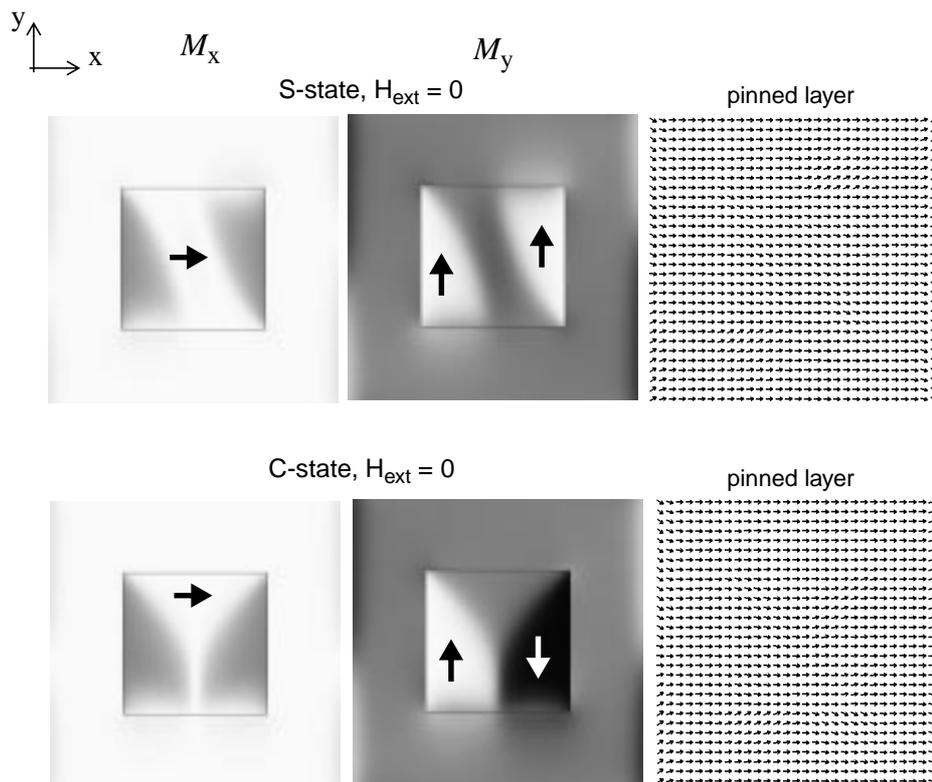


Abbildung 2: Mögliche Domänenstrukturen des Schichtsystem im remanenten Zustand. Links: x-Komponente der Magnetisierung; Mitte: y-Komponente der Magnetisierung; Rechts: Magnetisierungsverteilung in der hartmagnetischen Schicht.

Der Ummagnetisierungsprozeß und das zum Schalten der weichmagnetischen Schicht benötigte Feld hängen vom remanenten Zustand ab. Zum Schalten des sogenannten “C-states” wird ein ungefähr zweifach so hohes Feld benötigt wie zum Schalten des “S-states”. Die Abbildung 3 zeigt den zeitlichen Verlauf der Ummagnetisierung ausgehend vom “C-state”. Die Simulationsergebnisse können die aus in situ Experimenten im Transmissionselektronenmikroskop gewonnenen Domänenbilder¹ erklären.

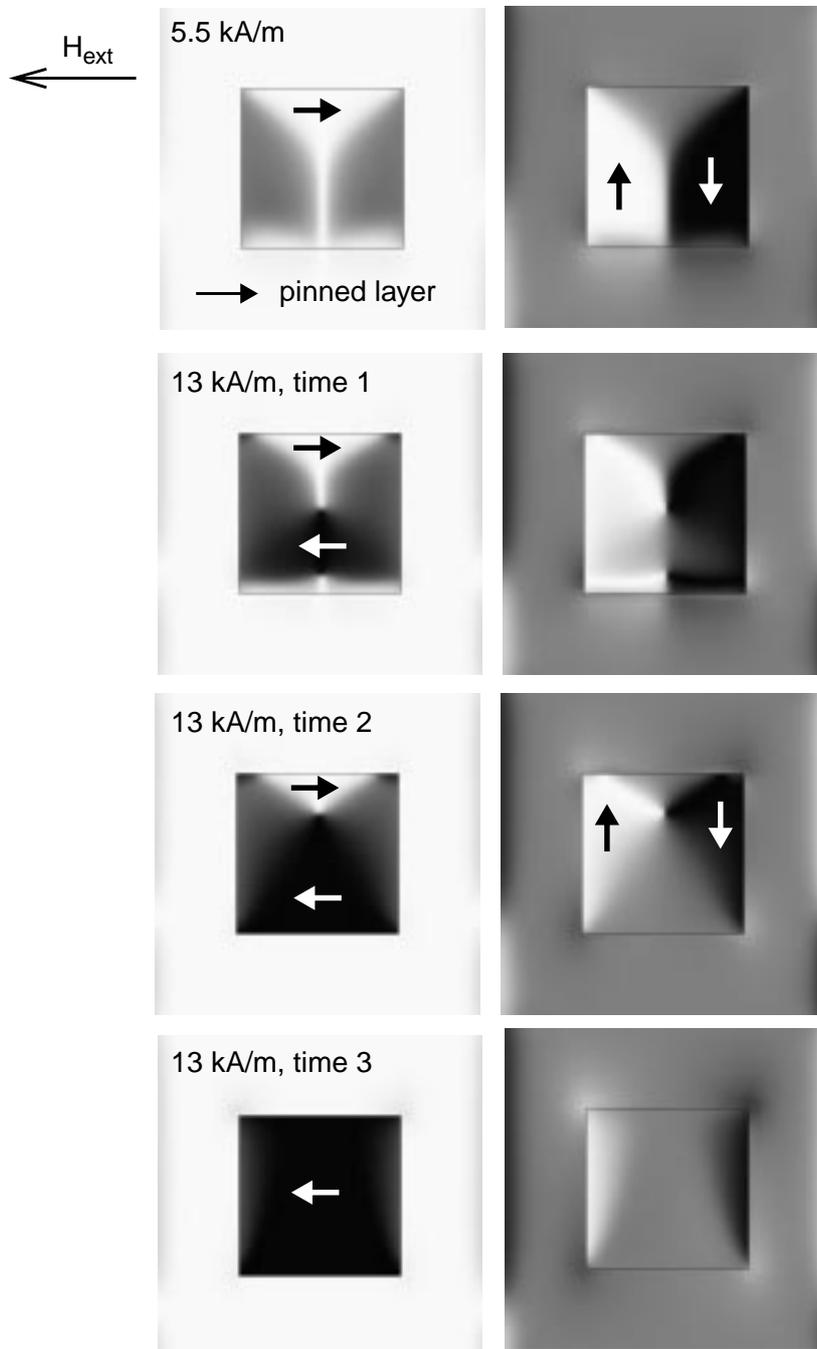


Abbildung 3: Ummagnetisierung des Schichtsystems ausgehend vom C-state.

1. H. Arduin, J.N. Chapman, P. R. Aitchison, M. F. Gillies; K. J. Kirk, C. D. W. Wilkinson, Magnetization reversal of patterned spin-tunnel junction material: A transmission electron microscopy study, *J. Appl. Phys.* 88, 2760-2765 (2000).

Liste von Publikationen

- (1) Fidler and T. Schrefl, "Micromagnetic modelling - the current state of the art," *Journal of Physics D: Applied Physics* 33 (2000) R135-R156.
- (2) W. Chantrell, M. Wongsam, T. Schrefl and J. Fidler, "Micromagnetics I: Basic principles," *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, Elsevier, in press.
- (3) T. Schrefl, J. Fidler, R. W. Chantrell, and M. Wongsam, "Micromagnetics II: Finite element approaches," *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, Elsevier, in press.
- (4) T. Schrefl, J. Fidler, D. Suess and W. Scholz, "Hysteresis and switching dynamics of patterned magnetic elements", *Journal Physica B-Condensed Matter* 275, 55-58 (2000).
- (5) T. Schrefl and J. Fidler, "Reversal modes and reversal times in submicron-sized elements for MRAM applications", *Computational Materials Science* 17 (2000) 490-495.
- (6) B. Streibl, J. Fidler and T. Schrefl, "Domain wall pinning in high temperature Sm(Co,Fe,Cu,Zr)₇₋₉ magnets," *J. Appl. Phys.* 87 (2000) 4765-4767.
- (7) T. Schrefl, J. Fidler and M. Zehetmayer, "Micromagnetic simulation of 360 degree domain walls in thin Co-films," *J. Appl. Phys.* 87 (2000) 5517-5519.
- (8) D. Suess, M. Dahlgren, T. Schrefl, R. Grössinger and J. Fidler, "Micromagnetic analysis of remanence and coercivity of nanocrystalline Pr-Fe-B magnets," *J. Appl. Phys.* 87 (2000) 6573-6575.
- (9) W. Scholz, D. Suess, T. Schrefl and J. Fidler, "Micromagnetic simulation of structure-property relations in hard and soft magnets," *Computational Materials Science* 18 (2000) 1-6.
- (10) W. Scholz, T. Schrefl, and J. Fidler, "Micromagnetic simulation of thermally activated switching in fine particles," *J. Magn. Magn. Mater.*, in press.
- (11) J. Fidler, T. Schrefl and D. Suess, "Grain boundaries in high performance magnets, reasons for poor or excellent properties," Proc. of Workshop on Grain Boundaries, Institute of Materials, University of Birmingham, (1999) in press.
- (12) J. Bernardi, T. Schrefl, J. Fidler, T. Rijks, K. de Kort, V. Archambault, D. Pere, S. David, D. Givord, J.F. Sullivan, P. Smith, J.M.D. Coey, U. Czernik and M. Grönefeld, "Preparation, magnetic properties and microstructure of lean rare-earth permanent magnetic materials", *J. Magn. Magn. Mater.* 219 (2000) 186-198.
- (13) T. Schrefl, D. Süß and J. Fidler, "Wavelet based matrix compression in numerical micromagnetics", Technical Proceedings of the Third International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, March 27-29, 2000, San Diego, USA, *Computational Publications*, Boston, 429-431 (2000).
- (14) T. Schrefl, J. Fidler and W. Scholz, "Modeling and future trends of advanced magnets", *IEEE Trans. Magn.*, in press.
- (15) W. Scholz, T. Schrefl and J. Fidler, "Langevin micromagnetics of recording media using subgrain discretization" *IEEE Trans. Magn.*, in press.
- (16) D. Suess, T. Schrefl and J. Fidler, "Micromagnetic simulation of high energy density permanent magnets", *IEEE Trans. Magn.*, in press.
- (17) T. Schrefl, D. Suess, W. Scholz, J. Fidler, "Finite element simulation of hard magnetic properties", *Proc. 19th Annual Conference on Properties and Applications of Magnetic Materials*, Chicago, May 2000.
- (18) J. Fidler, T. Schrefl and T. Matthias, "TEM study of novel Sm-Co based high temperature magnets", *Proc. European Electron microscopy conference EUREM 12*, Brno, July 2000, Volume II, (2000) P154-P155.
- (19) T. Schrefl, W. Scholz, D. Suess and J. Fidler, "Computational micromagnetics: Prediction of time dependent and thermal properties", *J. Magn. Magn. Mater.*, (2000) in press.
- (20) W. Scholz, J. Fidler, D. Suess and T. Schrefl, "Langevin dynamics of small ferromagnetic particles and wires", *Proc. 16th IMACS World Congress*, Lausanne, August 2000, M. Deville, R. Owens (ed).

- (21) J. Fidler, T. Schrefl, S. Sasaki and D. Süss "The role of intergranular regions in sintered Nd-Fe-B magnets with $(B.H)_{max} > 420 \text{ kJ/m}^3$ (52.5 MGOe)", *Proc. XI. Int. Symp. on Magnetic Anisotropy and Coercivity in Rare Earth Transition Metal Alloys*, H. Kaneko, M. Homma, M. Okada (ed.), The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan, 2000, pp. S45-S54.
- (22) T. Schrefl, J. Fidler and D. Süss, "Micromagnetic modelling of nanocomposite magnets", *Proc. XI. Int. Symp. on Magnetic Anisotropy and Coercivity in Rare Earth Transition Metal Alloys*, H. Kaneko, M. Homma, M. Okada (ed.), The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan, 2000, pp. S57-S71.
- (23) J. Fidler, T. Schrefl, D. Suess and W. Scholz, "Dynamic micromagnetic simulation of the configurational anisotropy of nanoelements", *IEEE Trans. Magn.* (2001), submitted - Intermag/3M 2001 paper CE-01 .
- (24) D. Süss, T. Schrefl, J. Fidler and V. Tsiantos, "Reversal dynamics of interacting circular nanomagnets", *IEEE Trans Magn.* (2001), submitted - Intermag/3M 2001 paper FD-02.
- (25) T. Schrefl, J. Fidler, J.N. Chapman and K. J. Kirk, "Micromagnetic simulation of domain structures in patterned magnetic tunnel junctions", *J. Appl. Phys.* (2001), submitted - Intermag/3M 2001 paper FD-08.
- (26) D. Suess, T. Schrefl and J. Fidler, "Reversal modes, thermal stability, and exchange length in perpendicular recording media", *IEEE Trans Magn.* (2001), submitted - Intermag/3M 2001 paper FA-10.
- (27) V. Tsiantos, D. Suess, T. Schrefl and J. Fidler, "Stiffness analysis for the muMAG standard problem #4", *J. Appl. Phys.* (2001), submitted - Intermag/3M 2001 paper HF-10.