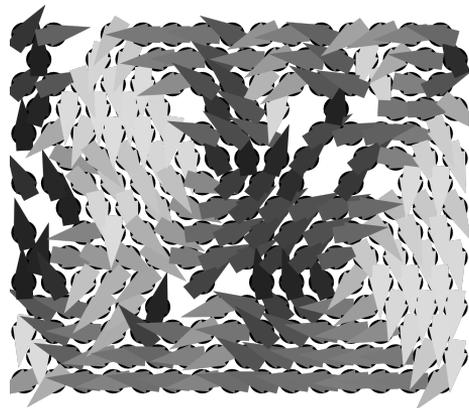
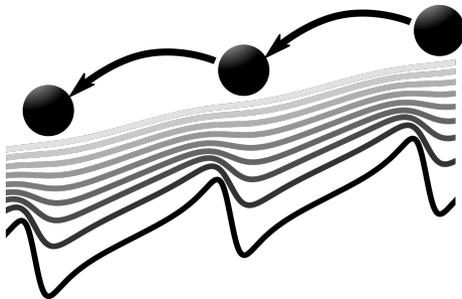


# Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades  
*Dr. rer. nat.*

vorgelegt von  
*Daniel Kappe*

## Simulationen der Mikrostruktur und Dynamik von Nanopartikeln im Kontext von Hydrodynamik und magneto-resistivem Transport



eingereicht  
*Dezember 2019*

Fakultät für Physik  
Universität Bielefeld



## **Eigenständigkeitserklärung**

Hiermit bestätige ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel benutzt habe.

Bielefeld, 17. Februar 2020

Daniel Kappe

Betreuer :

*Prof. Dr. Andreas Hütten*

*Prof. Dr. Christian Schröder*

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>Magnetische Ratschen</b>	<b>10</b>
2.1	Partikeldynamik . . . . .	10
2.1.1	Brownsche Bewegung und die Langevin Gleichung	12
2.1.2	Die modifizierte Langevin Gleichung . . . . .	13
2.2	Magnetische Felder . . . . .	15
2.2.1	Das Biot-Savart Gesetz . . . . .	17
2.2.2	Magnetisierte Materie . . . . .	17
2.2.3	Magnetische Materie im magnetischen Feld . . .	19
2.3	Ratschen . . . . .	21
2.3.1	Pulsierende Ratschen . . . . .	21
2.3.2	Gekippte Ratschen . . . . .	23
2.3.3	Die magnetische On-Off Ratsche . . . . .	24
2.4	Modellierung der magnetischen Ratsche . . . . .	26
2.5	Ergebnisse zur magnetischen Ratsche . . . . .	30
2.5.1	Partikeldynamik Simulationen . . . . .	30
2.5.2	Magnetische Felder . . . . .	36
2.5.3	Simulation der magnetischen Ratsche . . . . .	38
2.6	Zusammenfassung . . . . .	42
<b>3</b>	<b>Riesenmagnetowiderstand in granularen Systemen</b>	<b>44</b>
3.1	Beschreibungen des Riesenmagnetowiderstands . . . . .	44
3.1.1	Der <i>GMR</i> in Mehrschichtsystemen . . . . .	45
3.1.2	Zwei-Spin-Kanal Widerstandsmodell . . . . .	47
3.1.3	Der <i>GMR</i> in granularen Systemen . . . . .	50
3.2	Ladungsträgertransport in inhomogenen Festkörpern .	51
3.2.1	Das Knotenpotentialverfahren . . . . .	52
3.3	Makrospindynamik . . . . .	54
3.4	Wegfindung . . . . .	56
3.4.1	Graphen und Distanzen . . . . .	57
3.4.2	Nachbarschaften, kürzeste Wege und Richtungen	59
3.5	Modellierung des <i>GMR</i> in granularen Systemen . . . . .	63
3.6	Ergebnisse zum granularen Riesenmagnetowiderstand .	68
3.6.1	Ladungstransport in granularen Systeme . . . . .	68
3.6.2	Makrospindynamik Simulationen . . . . .	70
3.6.3	Wegfindung und Vernetzung von Partikelclustern	74

3.6.4	Simulation granularer Systeme . . . . .	76
3.6.5	Untersuchung der Magnetisierungs–GMR Kurve	84
3.7	Zusammenfassung, Diskussion und Ausblick . . . . .	86
<b>4</b>	<b>Fazit</b>	<b>88</b>
4.1	Ausblick . . . . .	90
	<b>Danksagung</b>	<b>91</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>92</b>
	<b>Veröffentlichungen</b>	<b>100</b>
	Veröffentlichte Artikel . . . . .	100
	Konferenzbeiträge . . . . .	102

# 1 Einleitung

Die Serie *Star Trek* startete im Jahr 1966 und erträumte sich die Technologie des 23. Jahrhunderts. Darunter waren die Kommunikatoren, welche kabellos und im Hosentaschenformat Kommunikation über große Distanzen ermöglichen, Computer, welche mit Sprache gesteuert werden können und vieles mehr. Heutzutage, knapp 50 Jahre später, ist einiges bereits Realität, wie die beiden genannten Beispiele, und anderes ist schon näher als damals gedacht. Die Nanotechnologie ist eines jener Felder, das sich Nahe an der Grenze zur Science Fiction befindet, besonders wenn man auf das schaut, was möglich scheint. Auf Größenskalen weit kleiner als die, die sich mit dem Auge oder einem einfachen Mikroskop auflösen lassen, sind die Verhältnisse zwischen altbekannten Effekten, wie etwa der Gravitation und der Diffusion, deutlich verschoben, und zuvor unbekannte Effekte lassen sich beobachten, wie etwa der Riesenmagnetowiderstand.

Einen wichtigen Teil dieser Nanowelt machen magnetische Nanopartikel aus, an deren diversen Anwendungsmöglichkeiten vielerorts geforscht wird. So können Medikamente an die Oberfläche der Partikel gebunden, mithilfe magnetischer Feldern durch den Körper des Patienten bewegt, an erkrankten Stellen konzentriert und dort freigesetzt werden (Ulbrich u. a. 2016). Bei der Bekämpfung von Tumorzellen können Nanopartikel benutzt werden, um lokal die Temperatur der kranken Zellen zu erhöhen und diese gezielt zu zerstören, was bereits in den 1950er Jahren erforscht wurde (Mahmoudi u. a. 2018). Sie können in der Magnetresonanztomografie als flexibles Kontrastmittel verwendet werden, welches sich für verschiedene Einsatzzwecke anpassen lässt (Shin u. a. 2015). Nanopartikel können verwendet werden um Giftstoffe, wie etwa Schwermetalle, Bakterien oder Farbstoffe, in Abwässern binden. Mithilfe eines magnetischen Feldes lassen sich so Verschmutzungen filtern (Pratt 2014).

Darüber hinaus haben magnetische Nanopartikel ein wichtiges Anwendungsgebiet in der Biosensorik. Hier lassen sich zwei Ziele feststellen: die *Miniaturisierung* und *Sensibilisierung* diagnostischer Verfahren. Als Vorbild mag hier der *Tricorder* aus der eingangs erwähnten *Star Trek* Serie dienen. Mit diesem handlichen Gerät lassen sich an Ort und Stelle biologische Proben untersuchen und Krankheiten diagnostizieren. Solche Miniaturlabore (*lab-on-a-chip*) gibt es bereits, wenn sie auch sehr spezifische Anwendungen haben, wie etwa die Messung

der Glukosekonzentration im Blut. Die bereits erhältlichen Systeme beruhen dabei meist auf einfachsten chemischen Reaktionen und Auswertungen, für komplexere Analysen müssen jedoch Arbeitsschritte eines Labors von dem Gerät ausgeführt werden. Dazu gehören das Mischen von unterschiedlichen Substanzen, das Sortieren verschiedener Stoffe und der Transport dieser zu einem Sensor (Reyes u. a. 2002). All diese Aufgaben können von magnetischen Partikeln übernommen werden, welche mit spezifisch bindenden Oberflächen versehen sind. Durch magnetische Felder können die Partikel zu rotierenden Ketten geformt werden, was die Diffusion begünstigt (Wittbracht u. a. 2012). Mit inhomogenen Magnetfeldern können die Partikel an bestimmte Punkte transportiert und dort konzentriert werden. Die Sortierung der magnetischen Partikel ist mit einem magnetischen Feld im Zusammenspiel mit einem weiteren Effekt, wie etwa der Diffusion oder einem hydrodynamischen Fluss, möglich.

Genau dieses Zusammenspiel aus Diffusion und magnetischen Feldern wird in der *magnetischen On-Off Ratsche* ausgenutzt (Auge u. a. 2009). Eine Ratsche ist ein System, welches ungerichtete, thermische Fluktuation in gerichtete Bewegung umwandeln kann. Ratschen finden sich abseits von Laboren auch in Lebewesen wieder. Die Kontraktion eines Muskels oder der Transport von Stoffen in einer Zelle wäre ohne molekulare Motor-Proteine, welche sich den Ratscheneffekt zunutze machen, nicht möglich (Vale u. Milligan 2000).

Im Rahmen dieser Arbeit steht die Ratsche im mikrofluidischen Kontext im Mittelpunkt, genauer die bereits erwähnte *magnetische On-Off Ratsche*. Ziel ist es diesen Ratschenprozess zu modellieren und visualisieren, damit die Bewegung von (Nano)-Partikeln, abhängig von Größe und magnetischem Moment, vorhergesagt und optimiert werden kann. So erlauben bestimmte Ratschengeometrien und Schaltprozesse etwa den Transport von verschiedenen Partikelsorten in unterschiedliche Richtungen (Martinez-Pedrero u. a. 2016).

Die erste Hälfte dieser Arbeit befasst sich mit der theoretischen Beschreibung und der Simulation jener *On-Off Ratsche*. Folgende Fragen sind dabei von besonderem Interesse:

- Wie verhalten sich magnetische Partikel unterschiedlicher Größenordnungen in der Ratsche?
- Wie kann bei fester Ratschengeometrie und Nanopartikelgröße der Transport mithilfe der Schaltzeiten optimiert werden?

- Wie können auch kleinste Nanopartikel mit Durchmesser  $< 50$  nm transportiert werden?

Die zweite Hälfte der Arbeit befasst sich mit der Detektion magnetischer Objekte. Dafür müssen kleine Änderungen des magnetischen Feldes gemessen werden, um das Streufeld von magnetischen Nanopartikeln aufzulösen.

Ein Ansatz ist die Nutzung des Riesenmagnetowiderstandeffekts. Ursprünglich wurde dieser in Schichtstapeln aus magnetischen und nicht-magnetischen Metallschichten gemessen, welche bei angelegtem Magnetfeld einen verringerten Widerstand zeigen (Baibich u. a. 1988; Binasch u. a. 1989). Einige Jahre später konnte derselbe Effekt auch in granularen Systemen, das heißt solchen aus magnetischen Partikeln und nicht-magnetischen Umgebungen, nachgewiesen werden (Xiao u. a. 1992). Der Effekt lässt sich selbst dann beobachten, wenn das umhüllende Matrixmaterial nicht metallisch ist und dadurch eine um Größenordnungen geringere Leitfähigkeit aufweist (Meyer u. a. 2013). Diese granularen Systeme aus wasserbasierten Gelen erlauben eine große Flexibilität bei der Anordnung der magnetischen Nanopartikel. Eickenberg u. a. (2013) schlugen des Weiteren vor druckbare Riesenmagnetowiderstands-Sensoren auf dieser Grundlage zu entwickeln.

Mit diesem neuen Level an Gestaltungsmöglichkeiten wird es interessant den magnetischen Zustand des granularen Systems stärker in den Fokus zu rücken. Wo Theorien zum granularen Riesenmagnetowiderstand bisher große Ensembles von Partikeln betrachteten, bei denen lokale magnetische Momente vernachlässigt wurden (Rubinstein 1994; Altbir u. a. 1996), wird der Fokus hier auf den Einfluss dieser Momente gelegt. Die gängige phänomenologische Beschreibung des Riesenmagnetowiderstandeffekts wird auf ein Widerstandsmodell erweitert, mit dem sich kleine, granuläre Systeme mit geringer Matrixleitfähigkeit beschreiben lassen. Der gesamte magnetische Zustand des Systems fließt dabei in das Modell ein, und aus der resultierenden Simulation ergeben sich Magnetisierungs- und Widerstandskurven für die analysierten Systeme. Folgende Fragestellungen stehen dabei im Vordergrund:

- Können Konzepte aus dem Schichtriesenmagnetwiderstand auf granuläre Systeme erweitert werden?
- Kann das Modell einem granularen System einen Widerstand

abhängig von der magnetischen Konfiguration zuweisen?

- Ist das Modell (qualitativ) vergleichbar mit experimentellen Systemen?

## 2 Magnetische Ratschen

Ratschen erlauben einen gerichteten Transport in einem System, welches sich nicht im thermischen Gleichgewicht befindet. Die Methode, mit der das System aus diesem Gleichgewicht gebracht wird, kann dabei viele Formen annehmen. Diese Arbeit beschränkt sich auf den Fall eines periodischen, asymmetrischen Potentials, welches die Symmetrie des Systems bricht und den Transport richtet. Einen tieferen und umfassenderen Einblick bietet beispielsweise der Reviewartikel von Reimann (2002).

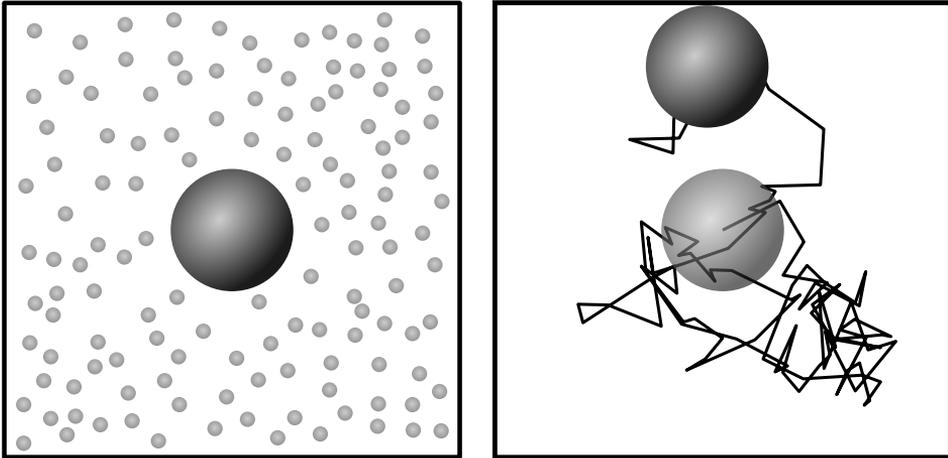
Das folgende Kapitel zeigt einen Ansatz, um den Transport einer Ratsche zu simulieren. Im Rahmen der Arbeit werden nur Systeme mit magnetischen Komponenten implementiert und untersucht. Der Ansatz lässt sich allerdings auf eine Vielzahl von Systemen erweitern, solange diese auf einem Kraftfeld und der Brownschen Bewegung beruhen.

Zuerst soll nun kurz der theoretische Hintergrund erläutert werden. Dieser unterteilt sich in die *Partikeldynamik* (Kap. 2.1), die Berechnung der *magnetischen Felder* (Kap. 2.2) und den daraus resultierenden Kraftfeldern gefolgt von einer kurzen Einführung in die *Ratsche* (Kap. 2.3) und ihre Funktionsweise. Anschließend wird die *Modellierung und Umsetzung* (Kap. 2.4) beschrieben, wobei tiefer gehende Informationen aus der Dokumentation (Kappe 2019b) bezogen werden können. Es folgen die *Ergebnisse* (Kap. 2.5) mit denen das Modell überprüft wird. Abschließend werden diese diskutiert, eingeordnet und es wird ein Blick auf zukünftige Anknüpfungspunkte geworfen (Kap. 2.6).

### 2.1 Partikeldynamik

Dieses Kapitel gibt eine kurze Einleitung in die theoretischen Hintergründe der Partikeldynamik und die Grundlagen der Simulation, welcher später in Abschnitt 2.4 verwendet wird. Die hier dargestellten Gleichungen und Informationen können unter anderem in den Veröffentlichungen von Risiken (1996), Allen u. Tildesley (2001), Frenkel u. Smit (2001), Andersen u. Oppenheim (1963), Chandrasekhar (1943) und Feynman u. a. (2011) nachvollzogen werden. Dort finden sich ausführliche Einleitungen, sowie Herleitungen und Beweise.

Ein Partikel, welches sich in einem Fluid mit endlicher Temperatur



**Abbildung 2.1:** Ein Partikel mit Fluid in einer Box (links). Die Bewegung des Partikels aufgrund von Kollisionen mit dem Fluid (rechts).

befindet, zeigt ein zufälliges Bewegungsmuster, wie in Abbildung 2.1 dargestellt. Auf einer mikroskopischen Skala besteht das Fluid aus unzähligen kleinen Bestandteilen, zum Beispiel Leitungswasser, das ein Gemisch aus Wasser-, Salz- und anderen Molekülen ist. Diese werden im Folgenden der Einfachheit halber als Fluidpartikel bezeichnet. Die Bewegung des großen, makroskopischen Partikels und die der mikroskopischen Fluidpartikel werden dabei von Newtons Bewegungsgleichungen beschrieben.

In einer *Molekulardynamik Simulation* werden diese Gleichungen für alle Bestandteile gelöst, was zu einem System mit sehr vielen Freiheitsgraden führt. Dabei ist die Anzahl der Kollisionen zwischen Partikel und Fluidpartikeln mit einer Größenordnung von  $10^{14} \text{ s}^{-1}$  (Feynman u. a. 2011) sehr groß. Entsprechend klein muss die Schrittgröße der Simulation gewählt werden und je nach Größe des gesamten Systems wird es sehr aufwendig, bis unmöglich, die Bewegung über Zeitskalen von Sekunden bis Minuten darzustellen. Des Weiteren interessiert im Fall der Ratsche einzig und allein die Bewegung des makroskopischen Partikels.

In diesem Fall ist es daher effizienter das System mit *Brownscher Dynamik* zu beschreiben.

### 2.1.1 Brownsche Bewegung und die Langevin Gleichung

Als *Brownsche Bewegung* wird die temperaturabhängige, zufällige Bewegung von makroskopischen, aber kleinen Partikeln in einem Fluid bezeichnet. Im Gegensatz zur *Molekulardynamik* wird in diesem Fall die Interaktion zwischen dem Partikel und den Fluidpartikeln durch eine Kraft in Form einer Zufallsvariablen modelliert. Dazu werden die Newtonschen Bewegungsgleichungen durch die stochastische Langevin Gleichung

$$\frac{du}{dt} = -\beta u + A(t) + K(t, r), \quad (2.1)$$

mit der Partikelgeschwindigkeit  $u = \frac{\partial r}{\partial t}$ , der Partikelposition  $r$  zum Zeitpunkt  $t$ , der Reibung  $\beta$ , der Zufallsvariablen  $A(t)$  und dem Beschleunigungsfeld  $K(t, r)$  ersetzt. Die Reibung  $\beta$  ist dabei eine Abkürzung für

$$\beta = \frac{6\pi\nu R}{m}, \quad (2.2)$$

mit der Viskosität des Fluids  $\nu$ , der Partikelmasse  $m$  und dem Partikelradius  $R$ . Die Gleichung (2.2) gilt jedoch nur für sphärische Partikel in einem laminaren Fluss. Die Zufallsvariable  $A(t)$  folgt der Gaussverteilung mit Mittelwert

$$\langle A(t) \rangle = 0 \quad (2.3)$$

und einer Varianz von

$$\langle A(t)A(t') \rangle = 2\beta k_B T \cdot \delta(t - t'). \quad (2.4)$$

Um später die Güte des Iterators zu testen, werden nun einige einfache, analytisch lösbare Fälle beschrieben.

**Partikel ohne äußere Kraft oder Strömung** Aus den Gleichungen (2.1) - (2.4) ergibt sich für die mittlere, quadratische Positionsänderung eines solchen Partikels

$$\langle (r(t) - r(0))^2 \rangle = 2dDt, \quad (2.5)$$

mit der Dimensionalität  $d$  und der Diffusionskonstante  $D$ , welche mit der von (Einstein 1905) hergeleiteten Konstante

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\nu R} \quad (2.6)$$

übereinstimmt (siehe (Risken 1996, Kap. 3.1.1)).

**Partikel in einem homogenen, konstanten Kraftfeld** Solange eine konstante Kraft auf ein Partikel einwirkt, ist seine Geschwindigkeit, bei vernachlässigter Brownscher Bewegung, gegeben durch die Stokes Gleichung

$$\vec{u}_t = \frac{\vec{F}_a}{6\pi\nu R}, \quad (2.7)$$

mit dem externen, konstanten und homogenen Kraftfeld  $\vec{F}_a$ . Für realistische Kräfte  $F_a$  können Diffusion und Konvektion separat voneinander betrachtet werden. Somit bleibt die Diffusionskonstante wie zuvor (2.6). Abbildung 2.2 zeigt beispielhaft diesen Prozess.

### 2.1.2 Die modifizierte Langevin Gleichung

Die *Langevin Gleichung* (2.1) lässt sich nur in wenigen Spezialfällen analytisch lösen. Für komplexere Anwendungen mit inhomogenen, nicht trivialen Kraftfeldern ist es sehr schwer oder sogar unmöglich eine analytische Lösung zu finden. In diesen Fällen ist es daher angebracht die Gleichung numerisch zu lösen. Für diese Arbeit wird eine modifizierte Version der Langevin Gleichung benutzt (Andersen u. Oppenheim 1963; Allen u. Tildesley 2001).

Wird der Beschleunigungsterm aus der Langevin Gleichung (2.1) vernachlässigt, ergibt sich

$$\beta u = A(t) + K(t, r). \quad (2.8)$$

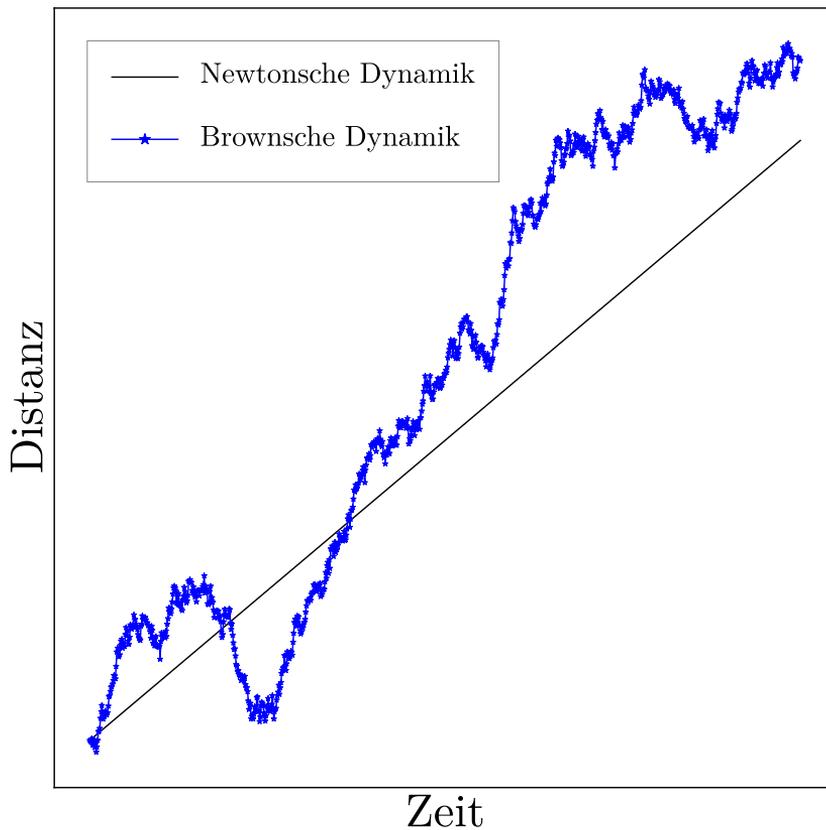
Eine Integration über einen Zeitschritt  $\Delta t$  resultiert in der numerische

lösbarer Gleichung

$$\underbrace{\beta \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} u(t') dt'}_{(2.9.a)} = \underbrace{\int_{t_0}^{t_0+\Delta t} K(t', r) dt'}_{(2.9.b)} + \underbrace{\int_{t_0}^{t_0+\Delta t} A(t') dt'}_{(2.9.c)}. \quad (2.9)$$

Der erste Teil (2.9.a) entspricht der Distanz, welche das Partikel im Zeitraum  $\Delta t$  zurücklegt

$$\beta \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} u(t') dt' = \beta (r(t_0 + \Delta t) - r(t_0)) = \Delta r. \quad (2.10)$$



**Abbildung 2.2:** Eine konstante Kraft auf ein Objekt mit Newtonscher (schwarz) und Brownscher Bewegung (blau)

Der zweite Term (2.9.b) kann durch eine Taylorentwicklung um  $t_0$  vereinfacht werden:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} K(t', r) dt' &= \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} (K(t_0, r(t_0)) + \mathcal{O}(t' - t_0)) dt' \\ &= K(t_0, r(t_0))\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Die Integration der Zufallsvariablen (2.9.c) ergibt, unter der Bedingung, dass der Zeitschritt über genügend Kollisionen mittelt ( $\Delta t \gg \beta^{-1}$ ), nach Chandrasekhar (1943):

$$B(\Delta t) = \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} A(\xi) d\xi, \quad (2.12)$$

eine gaußverteilte Zufallsvariable mit

$$\langle B(\Delta t) \rangle = 0 \quad (2.13)$$

$$\langle B(\Delta t)^2 \rangle = 2D\Delta t. \quad (2.14)$$

Somit lautet die modifizierte Langevin Gleichung

$$\Delta r = \beta^{-1}K(r(t_0))\Delta t + \beta^{-1}B(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (2.15)$$

Nach Andersen und Oppenheim 1963 gleicht sich das Verhalten der modifizierten Langevin Gleichung (2.15) und der unmodifizierten Langevin Gleichung (2.1), solange  $\Delta t \gg \beta^{-1}$  und die Beschleunigungsänderung  $\Delta K = K(r(t_0 + \Delta t)) - K(r(t_0)) \approx 0$  vernachlässigbar ist. Letztere Bedingung kann durch eine Taylor Entwicklung höherer Ordnung gelockert werden.

## 2.2 Magnetische Felder

In der magnetischen On-Off Ratsche (siehe Kap. 2.3.3) wird die zufällige Brownsche Bewegung der Partikel durch magnetische Felder gerichtet. Der Prozess, in dem magnetische Partikel durch magnetische Felder bewegt werden, wird *Magnetophoresis* genannt und hat ein inhomogenes Feld als Voraussetzung. In der später betrachteten Umsetzung der Ratsche (Auge u. a. 2009) wird das Feld durch eine

Reihe von dünnen Goldleiterbahnen erzeugt. Andere Möglichkeiten umfassen beispielsweise magnetische Materialien in wechselnden äußeren Feldern (Martinez-Pedrero u. a. 2016), was größsensensitiven, bidirektionalen Transport ermöglichen kann.

Nachdem im letzten Kapitel die Bewegung der Partikel unter Einfluss einer äußeren Kraft besprochen wurde, widmet sich dieses Kapitel der Berechnung ebendieser Kraft.

Im Allgemeinen werden magnetische Felder innerhalb und außerhalb von Materie mithilfe der *Maxwellschen Gleichungen*

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{B}} = 0 \quad (2.16)$$

$$\nabla \times \vec{\mathbf{H}} = \vec{\mathbf{J}} \quad (2.17)$$

$$\vec{\mathbf{B}} = \mu_0 (\vec{\mathbf{H}} + \vec{\mathbf{M}}) \quad (2.18)$$

beschrieben, mit der magnetischen Feldkonstante  $\mu_0$ , der magnetischen Flussdichte  $\vec{\mathbf{B}}$ , deren Einheit  $\text{T} = \text{kg s}^{-2} \text{A}^{-1}$  ist, der elektrischen Stromdichte  $\vec{\mathbf{J}}$  in der Einheit  $\text{A m}^{-2}$ , dem magnetischen Feld  $\vec{\mathbf{H}}$  und der Magnetisierung  $\vec{\mathbf{M}}$ , welche beide eine Einheit von  $\text{A m}^{-1}$  haben. Mit diesen Gleichungen lassen sich alle magnetischen Felder von Dauermagneten und Leiterschleifen, zumindest im statischen Fall, lösen. Diese Lösungen sind jedoch nicht unbedingt einfach und erfordern oft ein numerisches Verfahren wie beispielsweise die *Finite Elemente Methode*, kurz FEM. Die Umsetzung eines solchen Verfahrens ist dabei eine große Herausforderung, weshalb in den beiden folgenden Kapiteln zwei Möglichkeiten zur Berechnung von magnetischen Feldern vorgestellt werden, welche auf Volumen- und Oberflächenintegralen, statt partieller Differentialgleichungen, basieren.

Im Folgenden wird zuerst das *Biot-Savart Gesetz* (Kap. 2.2.1) eingeführt, mit dem sich aus stationären elektrischen Strömen ein magnetisches Feld berechnen lässt. Anschließend wird ein Integralformalismus für magnetische Materie beschrieben, der auf einer *hybriden Finite-Elemente / Randelemente Methode* basiert (Kap. 2.2.2). Abgeschlossen wird das Kapitel mit der Interaktion zwischen magnetischer Materie und einem magnetischen Feld (Kap. 2.2.3).

### 2.2.1 Das Biot-Savart Gesetz

Gleichung (2.17) zeigt, dass ein elektrischer Strom ein magnetisches Feld erzeugt. Ist der Strom stationär, ändert also über den Betrachtungszeitraum weder Pfad noch Stärke, so lässt sich das resultierende Magnetfeld mit dem Gesetz von Biot und Savart

$$\vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{1}{4\pi} I \int_{\mathcal{I}} \frac{d\vec{\mathbf{l}} \times \vec{\mathbf{r}}}{|\vec{\mathbf{r}}|^3} \quad (2.19)$$

für einen stationären Strompfad  $\mathcal{I}$  mit einer Stromstärke von  $I$  berechnen. Im Allgemeinen sind Ströme selten eindimensional, wenn sie auch oft als solche betrachtet werden können, weshalb hier die verallgemeinerte Form des Gesetzes benutzt werden muss (Jackson 2006)

$$\vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathcal{V}} \vec{\mathbf{J}}(\vec{\mathbf{r}}') \times \frac{\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'|^3} d^3r', \quad (2.20)$$

für ein stromdurchflossenes Volumen  $\mathcal{V}$  mit einer Stromdichte  $\vec{\mathbf{J}}(\vec{\mathbf{r}})$ .

Diese Arbeit beschränkt sich auf Leiterbahnen (Quader) mit angenommener, homogener Stromdichte. In diesem Fall vereinfacht sich die Gleichung (2.20) zu

$$\vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{I}{4\pi} \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} \int_{z_1}^{z_2} \vec{\mathbf{e}}_J \times \frac{\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'|^3} d^3r', \quad (2.21)$$

mit der Stromstärke  $I$  und dem Einheitsvektor  $\vec{\mathbf{e}}_J$  in Richtung des Stroms. Da elektrische Ladung weder erzeugt noch vernichtet werden kann, muss zumindest im stationären Fall der Stromkreis geschlossen werden. Der Schluss wird im Unendlichen realisiert, wie auch beim unendlichen Leiter. Da die numerische Integration ohne Grenzen nicht ohne Umstände möglich ist, wird zur Näherung die Ausdehnung des Stromflusses in Flussrichtung ausreichend groß gewählt, also sehr viel größer als die anderen Raumrichtungen.

### 2.2.2 Magnetisierte Materie

Liegt ein magnetisiertes Material vor, so muss ein anderer Ansatz gewählt werden. Fredkin und Koehler 1990 haben eine Methode entwickelt, welche die Vorteile der Finite-Elemente Methode mit den Vor-

zügen der Randelementemethode vereinen. Mit einer Einschränkung lässt sich daraus ein Integralformalismus gewinnen, mit dem sich das magnetische Feld eines homogen magnetisierten Volumens berechnen lässt.

In Abwesenheit von elektrischen Strömen vereinfacht sich die Gleichung (2.17) zu

$$\nabla \times \vec{\mathbf{H}} = 0 \quad (2.22)$$

und das rotationsfreie magnetische Feld lässt sich durch die Divergenz eines skalaren Feldes darstellen

$$\vec{\mathbf{H}} = -\nabla\phi. \quad (2.23)$$

Sei  $\Omega_m \in \mathbb{R}^3$  ein magnetisches Volumen mit der Oberfläche  $\Gamma = \partial\Omega_m$ , dann ist das magnetische Potenzial  $\phi$  bestimmt durch

$$\Delta\phi(\vec{\mathbf{r}}) = \nabla \cdot \vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{r}}) \quad \forall \vec{\mathbf{r}} \in \Omega_m \quad (2.24)$$

$$\Delta\phi(\vec{\mathbf{r}}) = 0 \quad \forall \vec{\mathbf{r}} \in \mathbb{R}^3 \setminus \Omega_m \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial\vec{\mathbf{n}}}(\vec{\mathbf{r}}) = \vec{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{r}}) \cdot \nabla\phi(\vec{\mathbf{r}}) \quad \forall \vec{\mathbf{r}} \in \Gamma. \quad (2.26)$$

Das Potential  $\phi$  wird in zwei Teile

$$\phi = \phi_1 + \phi_2 \quad (2.27)$$

getrennt.  $\phi_1$  ist die Lösung der Gleichungen

$$\Delta\phi_1(\vec{\mathbf{r}}) = \nabla \cdot \vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{r}}) \quad \forall \vec{\mathbf{r}} \in \Omega_m \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial\phi_1}{\partial\vec{\mathbf{n}}}(\vec{\mathbf{r}}) = \vec{\mathbf{n}} \cdot \vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{r}}) \quad \forall \vec{\mathbf{r}} \in \Gamma \quad (2.29)$$

$$\phi_1(\vec{\mathbf{r}}) = 0 \quad \forall \vec{\mathbf{r}} \in \mathbb{R}^3 \setminus \Omega_m \quad (2.30)$$

und  $\phi_2$  die der Laplace Gleichung

$$\Delta\phi_2(\vec{\mathbf{r}}) = 0 \quad \forall \vec{\mathbf{r}} \in \mathbb{R}^3, \quad (2.31)$$

mit der Randbedingung (Fredkin u. Koehler 1990)

$$\phi_2(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \phi_1(\vec{\mathbf{r}}') \frac{\partial G(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{r}}')}{\partial\vec{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{r}}')} d^2\vec{\mathbf{r}}' + \left( \frac{\Omega(\vec{\mathbf{r}})}{4\pi} - 1 \right) \phi_1(\vec{\mathbf{r}}), \quad (2.32)$$

mit dem Raumwinkel  $\Omega(\vec{\mathbf{r}})$  in  $\vec{\mathbf{r}}$ . Im Fall einer glatten Oberfläche, ohne Ecken und Kanten, gilt  $\Omega(\vec{\mathbf{r}}) = 2\pi$ , innerhalb des Materials  $\Omega(\vec{\mathbf{r}}) = 4\pi$  und außerhalb  $\Omega(\vec{\mathbf{r}}) = 0$ .  $G(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{r}}')$  ist die Greens Funktion des Laplace Operators in drei Dimensionen

$$G(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{r}}') = \frac{1}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'|}. \quad (2.33)$$

Im Rahmen dieser Arbeit werden noch zwei weitere Annahmen gemacht. Die Erste ist, dass das Magnetfeld nur außerhalb des magnetisierten Materials von Interesse ist, womit der Raumwinkelanteil  $\Omega(\vec{\mathbf{r}}) = 0$  ist. Als Zweites wird die Berechnung auf homogen magnetisierte Objekte beschränkt. Die Magnetisierung vereinfacht sich daher zu  $\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{r}}) = \vec{\mathbf{M}}_0$ . Unter diesen Annahmen ist die Lösung  $\phi_1$  für die Gleichungen (2.28)-(2.30)

$$\phi_1(\vec{\mathbf{r}}) = \vec{\mathbf{M}}_0 \cdot \vec{\mathbf{r}} \quad \forall \vec{\mathbf{r}} \in \Omega_m. \quad (2.34)$$

Damit ergibt sich für  $\phi_2$  der Ausdruck

$$\phi_2(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \vec{\mathbf{M}}_0 \cdot \vec{\mathbf{r}}' \frac{\vec{\mathbf{n}}(\vec{\mathbf{r}}') \cdot (\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}')}{|\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}'|^3} d^2\vec{\mathbf{r}}' \quad \forall \vec{\mathbf{r}} \in \mathbb{R}^3 \setminus \Omega_m. \quad (2.35)$$

Dieser Ausdruck beschreibt das magnetische skalare Potenzial außerhalb der Grenzen des magnetisierten Objekts.  $\phi$  kann somit für ein beliebiges Volumen berechnet werden. Durch Anwenden der Divergenz ergibt sich daraus das magnetische Feld. Die Berechnungszeit für das Integral kann zusätzlich mit einer einfachen Finite-Elemente Methode weiter verringert werden.

### 2.2.3 Magnetische Materie im magnetischen Feld

Befindet sich ein Objekt mit magnetischem Moment in einem äußeren magnetischen Feld, so versucht es sein Moment entlang des Feldes auszurichten. Zudem bewegt es sich entlang des Gradienten des Feldes. Die Kraft auf ein ausreichend kleines magnetisches Objekt, über dessen Ausdehnung sich das äußere magnetische Feld nicht wesentlich ändert, ist

$$\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{r}}) = \nabla (\vec{\mathbf{m}} \cdot \vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}})), \quad (2.36)$$

mit dem magnetischen Moment des Partikels  $\vec{\mathbf{m}} = \int_V \vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{r}}) d^3\vec{\mathbf{r}}$ . Diese Formel gilt nur, wenn die Magnetisierung homogen und das magnetische Feld linear über die Ausdehnung des Objektes ist. Sind diese Bedingungen nicht erfüllt, beispielsweise bei größeren Partikeln nahe der Quelle des Feldes oder wenn das Partikel mehr als eine magnetische Domäne hat, muss über das Volumen des Objektes gemittelt werden:

$$\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{r}}) = \nabla \int_V \vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{r}}') \cdot \vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}}') d\vec{\mathbf{r}}' \quad (2.37)$$

Zwei Spezialfälle sind für die Ratsche von Bedeutung und werden nun kurz erläutert.

**(Super)paramagnetische Partikel** zeigen nur dann ein magnetisches Moment, wenn sie sich in einem äußeren Magnetfeld befinden. Befinden sie sich in einem solchen Feld, richten sich die einzelnen magnetischen Momente entlang des Feldes aus. Dieser temperaturabhängige Prozess wird mit der Langevin Funktion beschrieben

$$|\vec{\mathbf{m}}(T, \vec{\mathbf{B}})| = m_{\text{sat}} \left( \coth\left(\frac{m_{\text{sat}}|\vec{\mathbf{B}}|}{k_{\text{B}}T}\right) - \frac{k_{\text{B}}T}{m_{\text{sat}}|\vec{\mathbf{B}}|} \right), \quad (2.38)$$

mit der Sättigungsmagnetisierung  $m_{\text{sat}} = \lim_{\vec{\mathbf{B}}/T \rightarrow \infty} m(T, \vec{\mathbf{B}})$  und der thermischen Energie  $k_{\text{B}}T$ . Ist das magnetische Feld schwach oder die Temperatur sehr hoch, ist die Magnetisierung linear zum äußeren Feld

$$\vec{\mathbf{M}} = \chi_m(T)\vec{\mathbf{B}}, \quad (2.39)$$

mit der magnetischen Suszeptibilität  $\chi_m(T)$ , welche eine temperaturabhängige Materialkonstante ist. Wird die Gleichung (2.39) in (2.36) eingesetzt, ergibt sich der Ausdruck:

$$\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{r}}) = \chi_m \nabla \vec{\mathbf{B}}^2 \quad (2.40)$$

**Bei fixiertem magnetischen Moment** vereinfacht sich die Krafteinwirkung. In diesem Fall ist die Magnetisierung homogen und konstant  $\vec{\mathbf{M}}(\vec{\mathbf{r}}) = M_{\text{sat}}\vec{\mathbf{e}}_{B_h}$  und die Kraft ist nur noch abhängig von dem inhomogenen, angelegten Feld

$$\vec{\mathbf{F}}(\vec{\mathbf{r}}) = M_{\text{sat}} \nabla \left( \vec{\mathbf{e}}_{B_h} \cdot \vec{\mathbf{B}}(\vec{\mathbf{r}}) \right). \quad (2.41)$$

Umgesetzt werden kann eine solche Fixierung mit einem starken, homogenen Magnetfeld, welches die magnetischen Momente ausrichtet.

## 2.3 Ratschen

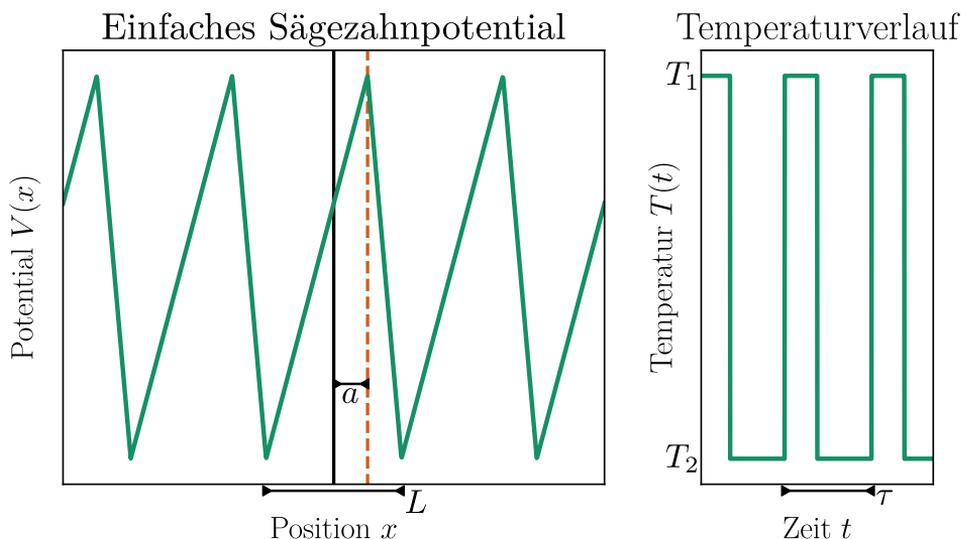
Eine Ratsche ist ein System, welches gerichteten Transport mit einer Kombination aus ungerichtetem, diffusivem Transport und einer Störung erreicht, welche das thermische Gleichgewicht bricht. Die Funktionsweise der Ratschen soll im Folgenden anhand einiger Beispiele illustriert werden. Für einen umfassenden und detaillierten Einblick sei an dieser Stelle nochmals auf das Review von Reimann (2002) verwiesen.

Zuerst wird die *pulsierende Ratsche* (englisch *pulsating ratchet*) (Kap. 2.3.1) beschrieben, zu welcher die in dieser Arbeit thematisierte magnetische On-Off Ratsche gehört. Anschließend wird die *gekippte Ratsche* (englisch *tilted ratchet*) (Kap. 2.3.2) eingeführt, welche später als einfaches Modellbeispiel verwendet werden soll und in einer Kombination mit der pulsierenden Ratsche veränderte Transporteigenschaften zeigt. Abgeschlossen wird dieses Kapitel mit einer Beschreibung der magnetischen On-Off Ratsche (Kap. 2.3.3), wie sie von Auge u. a. (2009) verwendet wurde, die die Grundlage der später gezeigten Untersuchungen bildet.

### 2.3.1 Pulsierende Ratschen

Bei einer pulsierenden Ratsche ändert sich mindestens ein Parameter mit der Zeit. Dies kann das Potential betreffen, welches im einfachsten Fall periodisch an- und ausgeschaltet wird (englisch *On-Off Ratchet*). Es kann allerdings auch die Temperatur sein, die sich periodisch ändert, was zu einer Temperatur Ratsche führt. Diese wurde in Reimann (2002) vorgeschlagen und berechnet. Auch andere Parameter sind hier möglich, wenn auch in der Umsetzung schwieriger. Des Weiteren muss sich der Parameter auch nicht mit einer festen Periode ändern.

Da später noch auf die On-Off Ratsche eingegangen wird, hier soll eine Variation der Temperatur betrachtet werden. Eines der einfachsten Ratschenpotentiale ist das Sägezahnpotential, welches in Abbildung 2.3 dargestellt ist. Mit einer Periode von  $\tau$  soll die Temperatur zwischen zwei Werten  $T_1 > T_2$  wechseln. Die Ratsche hat dabei zwei Zustände, einen Niedrigtemperaturzustand  $T_2$ , welcher durch das Po-



**Abbildung 2.3:** Temperaturregung nach Reimann (2002). (links) Ein Sägezahnpotential mit Periode  $L$  und einer Asymmetrie  $\alpha = a/L$ . (rechts) Eine Temperaturmodulation zwischen  $T_1$  und  $T_2$  mit Periode  $\tau$ .

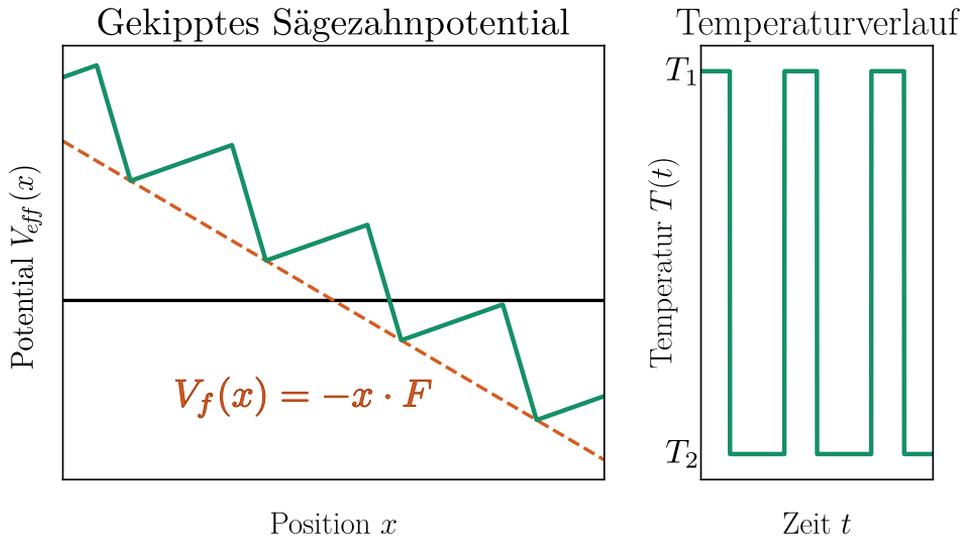
potential  $V(x)$  dominiert ist, und einen Hochtemperaturzustand  $T_1$ , in dem die Brownsche Bewegung überwiegt.

Im Zustand  $T_2$  bewegen sich die Partikel näherungsweise deterministisch auf die Minima des Potentials zu und werden dort eingefangen. Im Zustand  $T_1$  bewegen sich die Partikel jedoch überwiegend isotropisch und stochastisch, sodass das Maximum des Potentials in negativer Richtung in kürzerer Zeit und somit wahrscheinlicher erreicht werden kann als jenes in positiver Richtung. Wird anschließend die Temperatur wieder abgesenkt, ergibt sich eine Nettobewegung in negativer Richtung.

Für einen optimalen Transport müssen die Zeiten der Hoch- und Niedrigtemperatur an das System angepasst werden. Wird der Durchmesser der Partikel erhöht, sinkt dadurch die Diffusivität und die Dauer der Hochtemperaturphase  $\tau_d$  muss erhöht werden. Eine Erhöhung der Temperatur  $T_1$  erlaubt hingegen kürzere Diffusionszeiten  $\tau_d$ .

Die Temperaturen  $T_1$  und  $T_2$  müssen dabei nicht scharf voneinander getrennt sein, sondern dürfen auch kontinuierlich wechseln. Beispielsimulationen mit Illustration finden sich in Abbildung 2.10 auf Seite 34.

### 2.3.2 Gekippte Ratschen



**Abbildung 2.4:** Temperaturratsche nach Reimann (2002). (links) Gekipptes Sägezahnpotential entspricht dem Potential aus Abbildung 2.3 überlagert mit einem linearen Potential  $V_f = -x \cdot F$ . (rechts) Erneut der gepulste Temperaturverlauf.

In einer gekippten Ratsche sind alle Parameter zeitunabhängig, allerdings wirkt auf alle Partikel zu jedem Zeitpunkt und an jeder Stelle eine konstante Kraft  $F \neq 0$ . Das entsprechende Potential ist in Abbildung 2.4 zu sehen. Wird die Kraft  $F$  so gewählt, dass das effektive Potential  $V_{\text{eff}}$  lokale Minima und Maxima ausbilden kann, wie in Abbildung 2.4 (links) und ist die thermische Energie der Partikel ausreichend groß, folgen diese dem globalen Kraftfeld  $F$ . Ist die Energie der Partikel jedoch zu klein, sammeln sie sich um ihr nächstgelegenes lokales Potentialminimum. Anders verhält es sich, sobald die Kraft groß genug ist, um die lokalen Extrema verschwinden zu lassen, womit alle Partikel unabhängig von ihrer thermischen Energie dem Kraftfeld folgen. Im Limit  $F \gg V(x) \forall x$  entspricht die Geschwindigkeit der Partikel derjenigen aus der Gleichung von Stokes (2.7).

Werden nun die Prinzipien der pulsierenden Ratsche (Kap. 2.3.1) mit dem gekippten Potential mit lokalen Extrema verbunden, ist es möglich durch Veränderung eines Parameters den Fluss von Partikeln umzukehren. Beispielhaft dafür soll der Parameter  $F$  untersucht

werden.  $F = 0$  entspricht der einfachen pulsierenden Ratsche aus Abschnitt 2.3.1 und es ergibt sich ein Strom in negativer Richtung. Für  $F_s \gg 0$  entspricht der Fluss in positiver Richtung der Stokes Gleichung. Es muss daher einen Punkt  $0 < F_{ci} < F_s$  geben, an welchem sich das Vorzeichen des Stromes ändert (englisch *current inversion*). Viele Ratschen haben einen oder mehrere Parameter, welche eine Stromumkehr ermöglichen, wodurch es möglich wird, Partikel nach ihren Eigenschaften in unterschiedliche Richtungen zu treiben, wie in der Veröffentlichung von Martinez-Pedrero u. a. (2016) gezeigt.

### 2.3.3 Die magnetische On-Off Ratsche

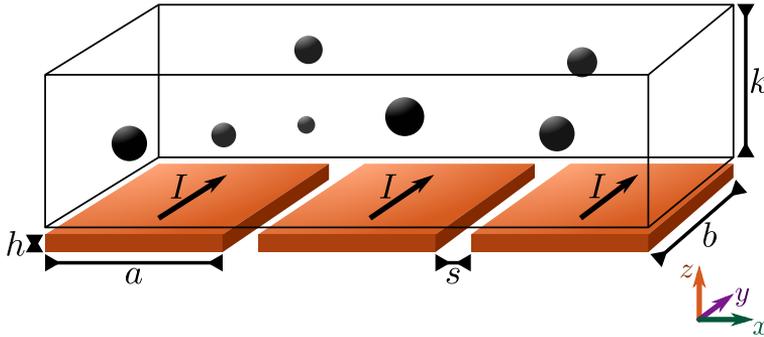
Die magnetische On-Off Ratsche nach Auge u. a. (2009) besteht, wie in Abbildung 2.5 dargestellt, aus einem Kanal, welcher auf einer Reihe von Leiterbahnen ruht. Zusätzlich werden die magnetischen Momente mit einem starken homogenen Magnetfeld in  $z$ -Richtung ausgerichtet. Dieses Feld sorgt sowohl für eine vereinfachte Interaktion zwischen den Partikeln und dem magnetischen Feld (vgl. Gleichung 2.41) als auch dafür, dass sich die Partikel untereinander möglichst weit verteilen solange deren Konzentration gering ist (Auge 2008). Ersteres verhindert, dass die Interaktionen zwischen den magnetischen Momenten vernachlässigt werden können, letzteres sorgt für eine vernachlässigbare Partikel-Partikel Interaktion.

Fließt nun ein Strom durch die Leiterbahnen (*On*), bildet sich ein magnetisches Ratschen-Potential (siehe Abb. 2.6). Die Partikel folgen dem Potentialverlauf und sammeln sich, aufgereiht in  $y$ -Richtung, an den Kanten der Leiterbahnen. Bei Abschalten des Stromes können die Partikel sich frei bewegen (*Off*). Durch den periodischen Wechsel, zwischen *On* und *Off*, kommt so eine gerichtete Bewegung zustande. Durch Umkehr des Stromflusses wird ebenfalls der Partikelfluss umgekehrt.

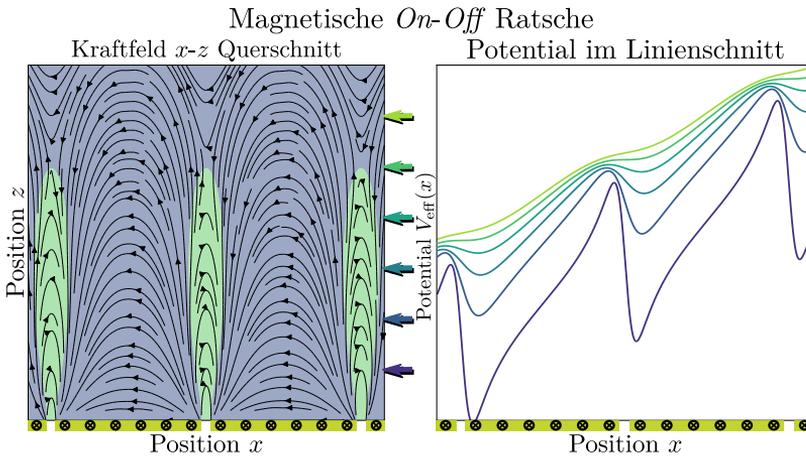
Wie schon bei der Temperatur Ratsche in Kapitel 2.3.1, sind die optimalen Schaltzeiten der magnetischen On-Off Ratsche von einigen Parametern abhängig. Der Einfluss der Ratschengeometrie wird später näher untersucht (siehe Kap. 2.5.2). Die Stromstärke  $I$  geht linear in das magnetische Feld und somit auch in das Kraftfeld ein, entsprechend erlaubt eine höhere Stromstärke kleinere *On*-Zeiten  $\tau_m$ . Alternativ kann die Sättigungsmagnetisierung  $M_s$  der Partikel erhöht werden um die *On*-Zeiten zu verkürzen. Eine Vergrößerung der Parti-

kel erlaubt zwar ebenfalls eine Verkürzung von  $\tau_m$ , allerdings ist der diffusive Transport für diese geringer und die Off-Zeit  $\tau_d$  muss verlängert werden.

Die Funktionsweise der magnetischen *On-Off* Ratsche wird eingehend in Abschnitt 2.5.3 untersucht. Zum einen wird der Transport unterschiedlicher Partikelgrößen auf Seite 38 analysiert. Zum anderen die optimalen Schaltzeiten  $\tau_m, \tau_d$  auf Seite 40 bestimmt.



**Abbildung 2.5:** Magnetische Ratsche nach Auge u. a. (2009). Ein Kanal der Breite  $b$  und Höhe  $k$ , unter dem sich eine Reihe von Leiterbahnen der Breite  $a$  und der Dicke  $h$  in einem Abstand  $s$  befinden.



**Abbildung 2.6:** Kraftfeld und Potential der magnetischen Ratsche. (links)  $x$ - $z$ -Querschnitt durch das Kraftfeld  $\vec{F} = (F_x, F_y, F_z)$ , mit  $F_x > 0$  und  $F_x < 0$ . (rechts) Schnitt bei konstanter  $z$  Höhe durch die Potentiallandschaft, die  $z$ -Koordinate des Schnitts entspricht der farblichen Markierung durch die Pfeile (links).

## 2.4 Modellierung der magnetischen Ratsche

Dieses Kapitel widmet sich der technischen Umsetzung der Simulation. Die Arbeitsschritte des Programms zur Simulation der Partikel Dynamik, kurz *ParDy*, werden im Folgenden schematisch beschrieben. Die explizite Umsetzung in Python ist in der Dokumentation (Kappe 2019b) einzusehen, ebenso wie einige Beispiele zum Einstieg.

Eine *ParDy* Simulation besteht aus folgenden Schritten:

1. Festlegen der Ratschengeometrie und der Schaltzustände.
2. Festlegen der Einheitszelle und deren Diskretisierung.
3. Berechnung des Magnet- und Kraftfeldes für die diskreten Gitterpunkte.
4. Festlegen der Randbedingungen.
5. Initialisierung der Partikel.
6. Der Iterationsprozess:
  - a) Ermitteln der Kräfte für alle Partikelpositionen.
  - b) Werte für die Zufallsvariable generieren.
  - c) Positionen nach Formel (2.15) aktualisieren.
  - d) Positionen gegebenenfalls speichern, Zeit aktualisieren.
  - e) Zurück zu Punkt 6a so lange die Zielzeit nicht erreicht ist.

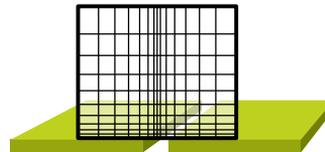
Die Schritte sind in Abbildung 2.7 dargestellt und werden im Folgenden näher erläutert.

**Festlegen der Ratschengeometrie und der Schaltzustände.** Jeder Schaltzustand (z.B. *An/Aus*) der Ratsche kann aus einer beliebigen Kombination Objekten, wie Leiterbahnen (Biot-Savart, 3D Block, nach Kap. 2.2.1), Permanentmagneten (FEM-BEM, 3D Block, nach Kap. 2.2.2) oder einem Leiter (Biot-Savart, 1D Linie, nach Kap. 2.2.1), zusammengesetzt werden. Jedes dieser Objekte kann an einem beliebigen Punkt positioniert werden, alle zusammen ergeben die Ratschengeometrie. Es existiert auch eine Routine, welche die Elemente in definierten Abständen entlang einer Raumachse aneinander reiht. Aktuell sind nur diskrete Schaltzustände (*An/Aus*) implementiert.

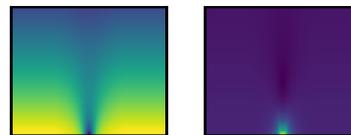
Ratschengeometrie & Schaltzustände definieren



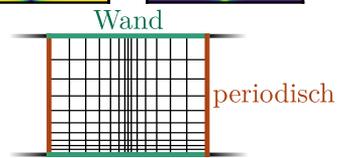
Einheitszelle & Diskretisierung festlegen



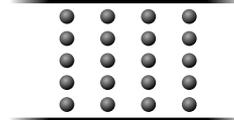
Magnet- & Kraftfeld berechnen



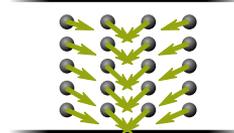
Randbedingungen setzen



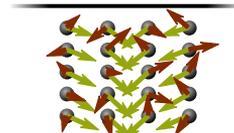
Partikel initialisieren



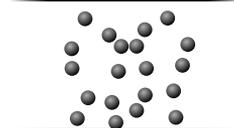
Kraftfeld auswerten



Zufallsvariable  $B$  generieren



Partikelpositionen aktualisieren



**Abbildung 2.7:** Schematische Darstellung der Modellierungsschritte.

**Festlegen der Einheitszelle und deren Diskretisierung.** Die Lösung der Partikelbewegung und damit der Gleichung (2.15) erfordert die Bestimmung der Kraft an jeder Partikelposition und zu jedem Zeitschritt. Die Berechnung des Volumenintegral nach dem Biot-Savart Gesetz ist jedoch für jedes Partikel, zu jedem Zeitpunkt nicht praktikabel. Daher wird eine Einheitszelle, welche symmetrisch fortgesetzt die Ratsche ergibt, räumlich diskretisiert und das Kraftfeld für jene Raumpunkte berechnet.

Die bereits erwähnte Routine zur Erzeugung des Schaltzustands erzeugt automatisch eine Einheitszelle in der Mitte der magnetischen Objekte. Alternativ kann der zu diskretisierende Simulationsbereich manuell festgelegt werden. Zur Diskretisierung steht eine Funktion zur Verfügung, welche es erlaubt die Gitterdichte an bestimmten Punkten festzulegen. Dadurch ist es möglich Bereiche, in denen große Änderungen des Feldes zu erwarten sind (zwischen magnetischen Objekten), engermaschiger zu vernetzen als den Rest.

**Berechnung des Magnet- und Kraftfeldes für die diskreten Gitterpunkte.** Sind alle magnetischen Objekte definiert und der Simulationsbereich diskretisiert, so wird zuerst das magnetische Potential aller Permanentmagnete berechnet. Durch Bildung des Gradienten ergibt sich das magnetische Feld, welches dann zu dem magnetischen Feld der elektrischen Leiter addiert wird. Das Kraftfeld wird aus dem Magnetfeld und dem magnetischen Moment der Partikel berechnet. Es müssen daher die beiden Fälle des fixierten und freien Moments unterschieden werden. Bei Ersterem wird die Kraft mit der Formel (2.41) berechnet, für letzteres wird zuerst das ortsabhängige mittlere magnetische Moment mithilfe der Langevin Formel bestimmt und anschließend die Kraft mit der Gleichung (2.36) berechnet.

**Festlegen der Randbedingungen.** Als Randbedingungen kommen eine periodische Randbedingung entlang einer Achse oder eine Wandrandbedingung infrage. Bei einer periodischen Randbedingung werden die Partikelpositionen entlang der gegebenen Achse mit einer Modulooperation in den Simulationsbereich projiziert. Die Wandrandbedingung wird umgesetzt, indem in der Nähe am Rand ein zusätzliches Potential eingesetzt wird. Im Programm ist dies der abstoßende Teil des Lennart-Jones Potentials und entsprechend eine Kraft proportional

zu  $r^{-13}$  (mit  $r$  dem Abstand von Partikel zum Rand) in Richtung der Randnormalen.

**Initialisierung der Partikel.** Für die Partikel müssen deren Startposition, Radius, Masse oder Dichte, magnetisches Moment oder Magnetisierung festgelegt werden. Es ist möglich die Positionen manuell oder auf einem Gitter festzulegen.

**Der Iterationsprozess** lässt sich in 4 Unterschritte aufteilen

- *Ermitteln der Kräfte für alle Partikelpositionen.* – Für jede Partikelposition wird der Kraftfeldvektor in dem diskreten Kraftfeld interpoliert. Die Interpolationsordnung lässt sich festlegen.
- *Werte für die Zufallsvariable generieren.* – Für jedes Partikel wird die drei komponentige Zufallsvariable mit Gaußscher Verteilung generiert.
- *Positionen nach Formel (2.15) aktualisieren.* – Die Positionen der Partikel werden entsprechend den Kräften und der Zufallsvariable aktualisiert.
- *Positionen gegebenenfalls speichern, Zeit aktualisieren.* – Die Positionen aller Partikel werden alle  $x$  Zeitschritte gespeichert, wodurch der Speicherbedarf verringert wird. Abschließend wird die Zeit um den aktuellen Zeitschritt erhöht und gegebenenfalls die Zeitschrittgröße angepasst.

Dieses Schema wird wiederholt, bis die zuvor festgelegte Anzahl an Zeitschritten erreicht ist.

## 2.5 Ergebnisse zur magnetischen Ratsche

Im Folgenden werden die Ergebnisse, welche im Bereich der Ratschensimulation entstanden sind, präsentiert, ausgewertet und diskutiert.

### 2.5.1 Partikeldynamik Simulationen

Als Testszenarien dienen freie Partikel, Partikel in einem homogenen Kraftfeld (siehe Kap. 2.1.1) und eine gekippte Temperaturratsche (siehe Kap. 2.3.2).

**Freie Brownsche Bewegung** In Abbildung 2.8 sind die Ergebnisse für freie Partikel bei Raumtemperatur in Wasser dargestellt. Abbildung 2.8 (a) zeigt exemplarisch die Pfade dreier Partikel, wobei diese im Ursprung beginnen und am Ende mit einem schwarzen Punkt versehen sind. Die Partikel bewegen sich auf den ersten Blick zufällig und ungerichtet. Auf kurze, lokale Bewegungen folgen immer wieder größere Sprünge. Bei dieser Betrachtung muss bedacht werden, dass die Pfade eine geringe zeitliche Auflösung darstellen und der tatsächliche Pfad, im Sinne der Langevin Gleichung, unendlich komplex ist.

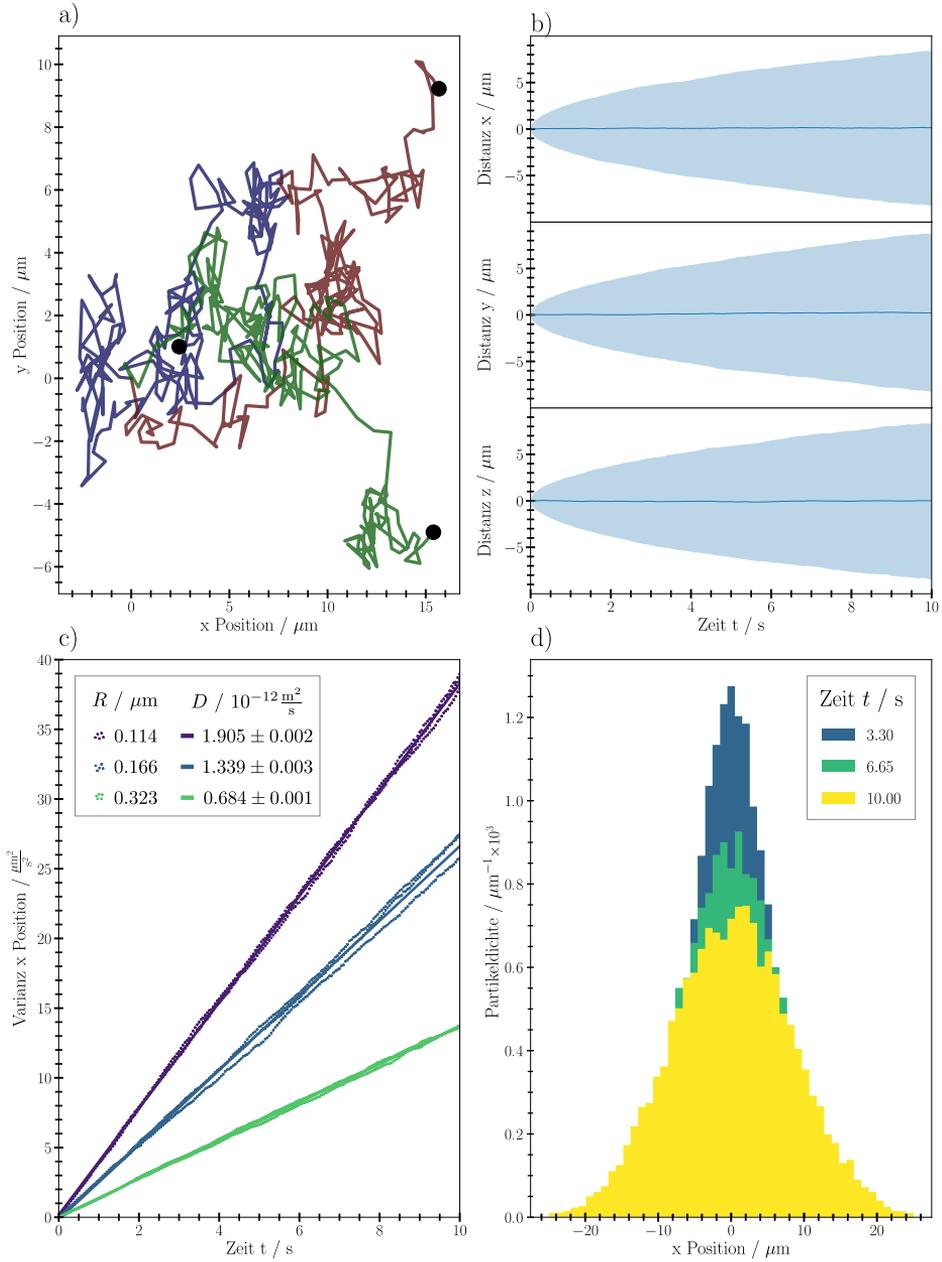
Abbildung 2.8 (b) zeigt die zurückgelegte Distanz aller Partikel im Mittel (Kurve) und deren Standardabweichung  $\sigma$  (Flächen). Wie erwartet schwanken die Mittelwerte der Positionen um den Nullwert und die Standardabweichungen folgen der Funktion  $\sqrt{t}$ .

In Abbildung 2.8 (c) ist die Varianz  $\langle x^2 \rangle = \sigma^2$  für drei verschiedene Partikelgrößen gezeigt. Für alle drei zeigt sich ein linearer Verlauf und über die Formel (2.5)  $\langle x^2 \rangle = 2Dt$  lässt sich die Diffusionskonstante bestimmen und mit Gleichung (2.6) vergleichen.

Partikelradius / nm	Diffusionskonstante / $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$		Abweichung
	Theorie	Simulation	
114	$1.9275 \cdot 10^{-12}$	$1.905 \cdot 10^{-12}$	1.18%
166	$1.3237 \cdot 10^{-12}$	$1.339 \cdot 10^{-12}$	-1.14%
323	$0.6803 \cdot 10^{-12}$	$0.684 \cdot 10^{-12}$	-0.54%

Die Abweichungen sind gering und lassen sich mit höherer Partikelzahl weiter verringern.

Zuletzt sind in Abbildung 2.8 (d) noch die Verteilungen der Partikel entlang der x-Achse für 3 Zeitpunkte dargestellt. Es ergibt sich eine Gaußverteilung, deren Mittelwert und Varianz bereits in den Abbildung (b) zu sehen sind.



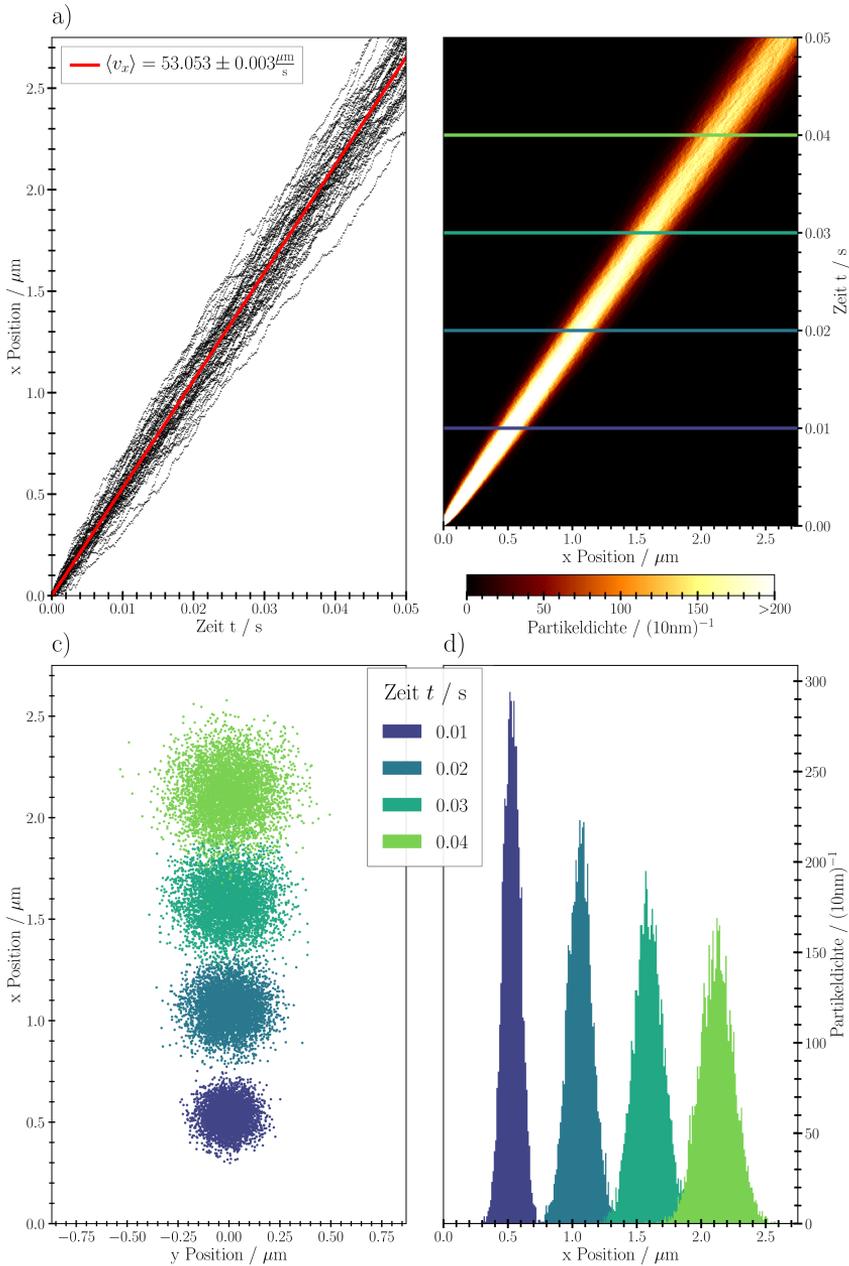
**Abbildung 2.8:** Ergebnisse für freie Brownsche Bewegungen. Partikelanzahl  $N = 5000$ , -radius  $R = 1 \mu\text{m}$ , -dichte  $\rho = 8900 \text{ kg m}^{-3}$ , Temperatur  $T = 300 \text{ K}$ , Viskosität  $\nu = 0.001 \text{ Pa s}^{-1}$ , Zeitschrittgröße  $\Delta t = 0.05 \text{ s}$ . (a) Drei Beispieltrajektorien. (b) Zeitliche Entwicklung der zurückgelegten Distanz. (c) Zeitliche Entwicklung der Varianz mit Fit für  $D$ . (d) Partikelverteilungen.

**Partikel im homogenen Feld** In Abbildung 2.9 sind die Ergebnisse der Simulation für Partikel, welche sich in einem konstanten Kraftfeld  $\vec{\mathbf{F}} = (1, 0, 0)$  pN befinden, zu sehen. Nach dem Gesetz von Stokes (2.7)  $\vec{\mathbf{u}} = \vec{\mathbf{F}}/6\pi\nu R$  führt dies zu einer mittleren Geschwindigkeit von  $\langle \vec{\mathbf{v}} \rangle = (53.052, 0, 0) \mu\text{m s}^{-1}$ .

Abbildung 2.9 (a) zeigt die zeitliche Entwicklung der  $x$  Position von 50 Partikeln, in Rot ist die lineare Regression der  $x$  Positionen aller 5000 Partikel gezeigt. Dabei zeigt sich eine sehr hohe Übereinstimmung mit den zuvor berechneten Geschwindigkeiten.

Abbildung 2.9 (b) zeigt die zeitliche Entwicklung der  $x$  Positionen als Farbhistogramm. Jede Reihe parallel zur  $x$  Achse ist dabei ein Histogramm der Partikelverteilung für einen einzigen Zeitschritt. Diese Art des zweidimensionalen Histogramms gibt auch bei hohen Partikelzahlen ein Bild kollektiver Bewegungen, was für Pfade wie sie in (a) dargestellt sind, nicht gilt.

Zur Verdeutlichung sind zu den Zeiten  $t = [0.1, 0.2, 0.3, 0.4]$  s die Reihen zusätzlich als Histogramm in Abbildung 2.9 (d) gezeigt. Anhand der Partikelverteilungen in der  $x$ - $y$  Ebene in Abbildung 2.9 (c) zeigt sich, dass die durch das Kraftfeld induzierte Bewegung den Diffusionsprozess nicht beeinflusst, da letzterer sowohl in Richtung der Krafteinwirkung als auch senkrecht dazu gleichstark ist.



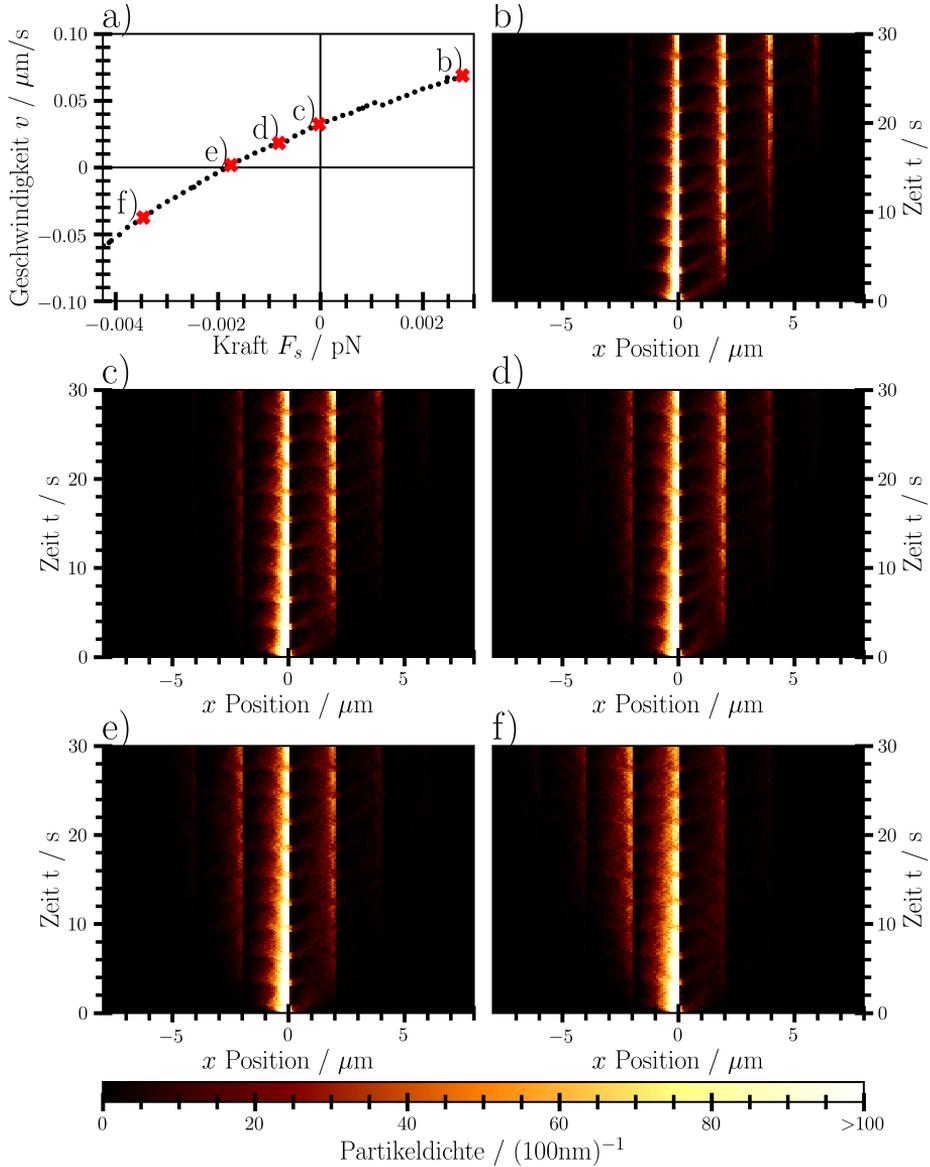
**Abbildung 2.9:** Ergebnisse für Partikel unter konstanter Kraft  $F = 1$  pN, Zeitschrittgröße  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-7}$  s, Parameter entsprechen sonst denen in Abbildung 2.8. (a)  $x$  Positionen von 50 Partikeln (schwarz) mittlere  $x$  Position (rot). (b) Zeitliche Entwicklung der Partikelverteilung als Farbhistogramm. (c) Partikelverteilung in der  $xy$  Ebene (d) Partikelverteilungen als Histogramm, entspricht dem Linienschnitt der entsprechenden Farbe durch (b).

**Gekippte Sägezahn-Temperatur Ratsche** Abbildung 2.10 zeigt die Ergebnisse der Simulation für eine gekippte Sägezahn-Temperaturratsche. Dabei wirkt ein periodisches Kraftfeld  $\vec{\mathbf{F}} = -\nabla V(x) + (F_s, 0, 0)$  auf die Partikel ein, wobei  $V(x)$  ein periodisches Sägezahnprofil ist.

Ist das Potential  $V(x)$  nicht gekippt, also  $F_s = 0$ , bewegen sich alle Partikel in positiver  $x$ -Richtung (siehe Abb. 2.10 c). Deutlich erkennbar sind die Schaltvorgänge der Ratsche. Sobald die Temperatur auf  $T_1$  erhöht wird verbreitert sich die Partikelverteilung, bei niedriger Temperatur  $T_2$  leert sich der Bereich zwischen den Potentialminima. So bewegen sich die Partikel statistisch mit jedem Puls der Ratsche von Minimum zu Minimum.

Wird der Ratscheneffekt nun mit einer zusätzlichen Kraft  $F_s > 0$  verstärkt, erhöht sich die mittlere Geschwindigkeit der Partikel (siehe Abb. 2.10 b). Für die recht kleinen Kräfte im Rahmen dieser Untersuchung sind die Geschwindigkeiten additiv, letztendlich muss für dominierende Kräfte  $F_s \gg 0$  das Stokes Gesetz befolgt werden.

Wird nun die Richtung der Kraft umgekehrt  $F_s < 0$  gibt es einen kleinen Bereich, bis etwa  $F_s = -1.7 \cdot 10^{-15}$  N, in dem der Ratscheneffekt größer als die angelegte Kraft ist (siehe Abbildung 2.10 d). Der Punkt der Stromumkehr (*current inversion*) ist in Abbildung 2.10 (e) zu sehen. Hier heben sich Ratscheneffekt und Kraftfeld exakt auf, was in verringerter Diffusivität resultiert. Sinkt die Kraft  $F_s$  weiter, bewegen sich die Partikel im Mittel in die negative  $x$  Richtung, wie Abbildung 2.10 (f) zeigt. Der allgemeine Verlauf liegt in qualitativer Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Reimann (2002) (vgl. dort Abb. 2.5 Seite 77)



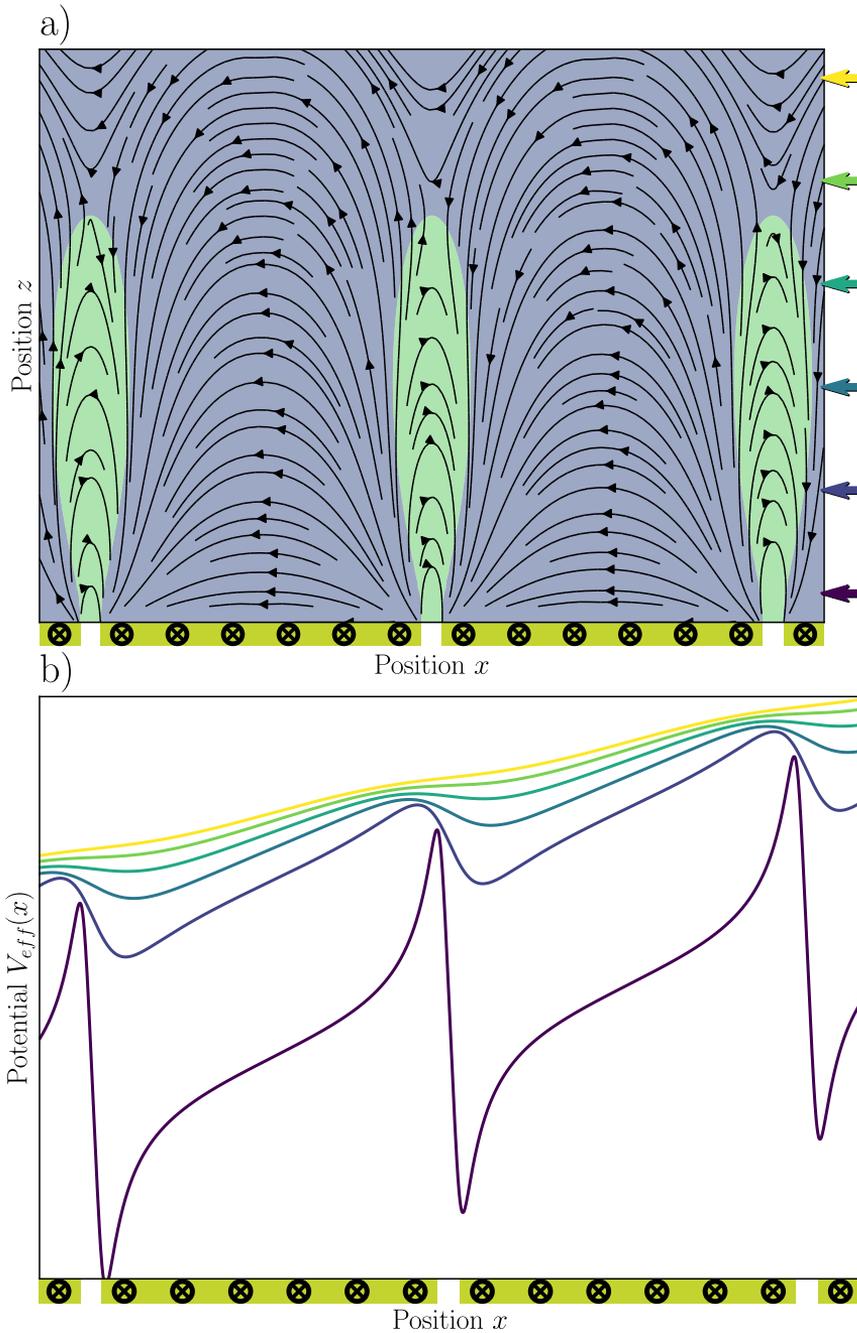
**Abbildung 2.10:** Ergebnisse gekippte Temperatur Ratsche: Potentialdifferenz  $\Delta V = 1.173 \cdot 10^{-20}$  J, -periodizität  $L = 2 \mu\text{m}$ , -asymmetrie  $a = 0.75 \mu\text{m}$ , Temperaturen  $T_1 = 400$  K,  $T_2 = 100$  K mit den Schaltzeiten  $\tau_1 = 0.75$  s,  $\tau_2 = 2.25$  s und einer Zeitschrittlänge von  $\Delta t = 10^{-5}$  s. Alle anderen Parameter entsprechen denen aus Abbildung 2.8. (a) Mittlere Geschwindigkeit in  $x$  Richtung in Abhängigkeit von der angelegten Kraft  $F_s$ . (b-f) Zeitliche Entwicklung der Partikelverteilung als Farbhistogramm (vgl. Abb. 2.9 (b))

### 2.5.2 Magnetische Felder

Das Kraftfeld in der magnetischen *On-Off* Ratsche wird, wie bereits in Kapitel 2.3.3 beschrieben, von Leiterbahnen am Boden des Kanals erzeugt. Um das Problem zu vereinfachen, wird angenommen, dass diese Leiterbahnen deutlich länger als die Kanalbreite sind. Dadurch sind die  $y$ -Komponente der Kraft entlang der Kanalbreite, wie auch die  $y$ -Abhängigkeit, vernachlässigbar und die Behandlung kann auf zwei Raumdimensionen beschränkt werden.

Abbildung 2.11 zeigt die Ergebnisse der Kraftfeld-Berechnung. Das Kraftfeld ist positiv zwischen den Leiterbahnen und negativ oberhalb dieser. Zudem ist der positive Bereich nach oben hin beschränkt, da in hoher Entfernung die Aneinanderreihung von Leiterbahnen das gleiche Feld erzeugt wie eine einzige, große Leiterbahn. Das bedeutet für die Ratsche, dass alle Partikel, welche sich oberhalb des positiven Bereichs befinden nur durch Magnetophorese bewegen und nicht vom Ratscheneffekt profitieren. Die Größe des positiven Bereichs lässt sich durch Variation der Leiterbahnparameter verändern, allerdings auf Kosten des Kraftbetrags. Für optimale Transporteigenschaften muss daher die Kanalhöhe an die Leiterbahnparameter angepasst werden.

Ein Blick auf den Potentialverlauf in Abbildung 2.11 (b) verdeutlicht wie die Ausprägung des Ratschenpotentials mit der Höhe abnimmt. Dem entgegen wirkt die  $z$ -Komponente des Kraftfeldes, welches die Partikel zum Boden des Kanals zieht.



**Abbildung 2.11:** Kraftfeld und Potential der magnetischen Ratsche. Der Stromfluss  $I$  erfolgt aus der Zeichenebene hinaus. (a)  $x$ - $z$ -Querschnitt durch das Kraftfeld  $(F_x, F_z)$ , dargestellt durch die Stromlinien, mit  $F_x > 0$  und  $F_x < 0$ . (b) Linienschnitt bei konstanter Höhe durch die Potentiallandschaft, die  $z$ -Koordinate entspricht der farblichen Markierung durch die Pfeile in (a).

### 2.5.3 Simulation der magnetischen Ratsche

Im Gegensatz zu den bisher gezeigten Simulationen werden hier Randbedingungen benötigt, welche dafür sorgen, dass die Partikel die Ratsche nicht in  $z$ -Richtung verlassen. Die Zeitschrittgrößen müssen in diesem Fall ebenfalls deutlich verkleinert werden, da sichergestellt werden muss, dass sich die Kraft, die ein Partikel erfährt, zwischen zwei aufeinanderfolgenden Iterationsschritten nur unwesentlich ändert. Zusätzlich müssen größere Zeiträume betrachtet werden, damit eine hinreichend aussagekräftige Zeitstatistik möglich ist. Als Kompromiss werden hier 6 bis 8 Zyklen der Ratsche gewählt.

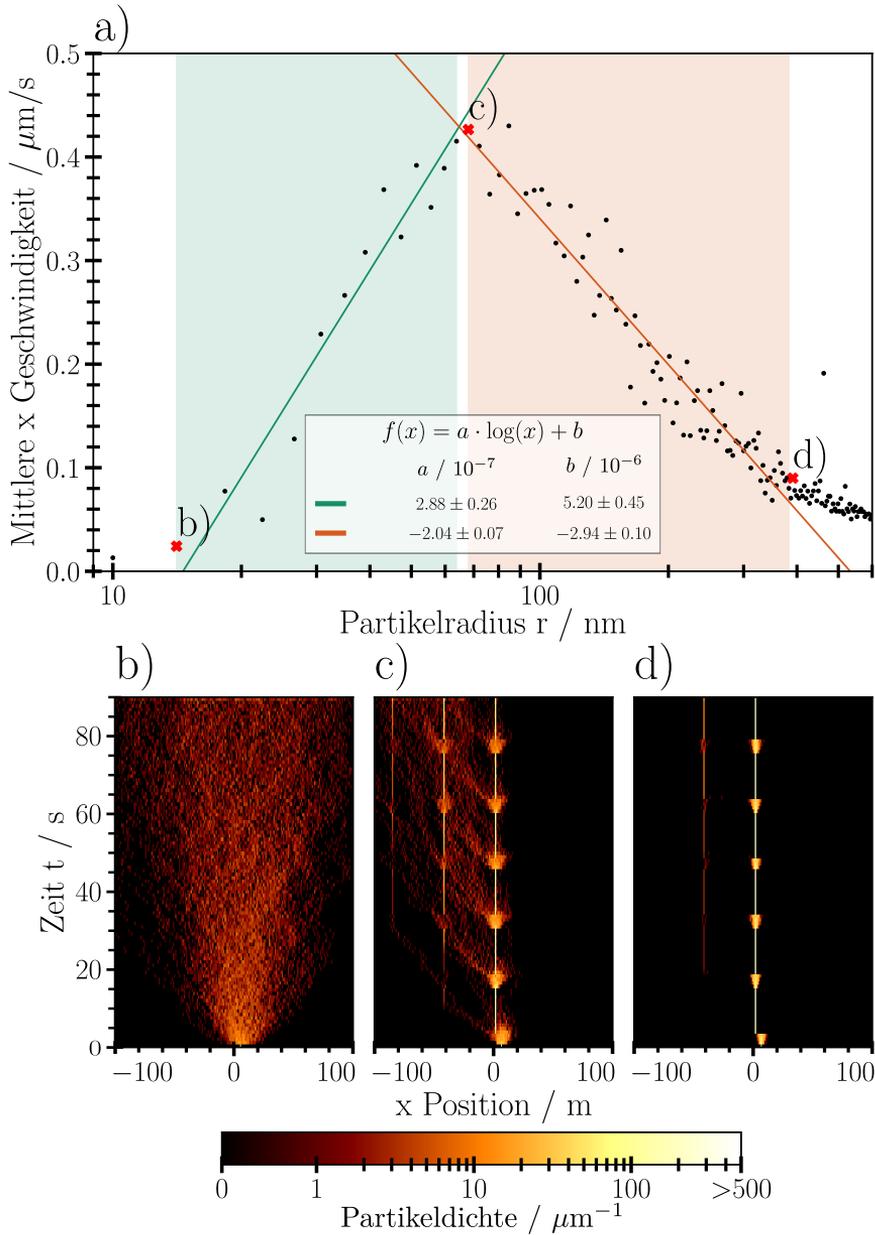
Um den Rechenaufwand zu verringern wird daher bei jeder Simulation der Ratsche die Zeitschrittgröße um den Faktor 16 erhöht, solange das Magnetfeld ausgeschaltet ist. Mit diesem Trick liegen die Rechenzeiten pro Parametersatz jedoch immer noch bei 10 Stunden bis 3 Tagen.

**Variation der Partikelradien** Die einfachste Variation ist die der Partikelradien. Diese beeinflussen, im Gegensatz zur Magnetisierung, sowohl den magnetischen, als auch den diffusiven Transport. Das magnetische Moment eines Partikels ist, bei fester Magnetisierung, kubisch von seinem Radius abhängig und somit auch die Kraft  $F \propto m \propto R^3$ . Daraus ergibt sich eine quadratische Abhängigkeit der zu erwartenden mittleren Geschwindigkeit von dem Radius  $v_{\text{Stokes}} \propto F/R \propto R^2$ . Die Diffusionskonstante  $D$  und damit der diffusive Transport ist jedoch invers-proportional zum Radius  $D \propto R^{-1}$ . Es muss daher für jeden Parametersatz der Ratsche einen optimalen Partikelradius geben, welcher den Ratscheneffekt maximiert.

In Abbildung 2.12 (a) sind die Ergebnisse einer solchen Variation des Partikelradius gezeigt. Wird vom Maximum aus an beide Flanken die Funktion  $f(x) = a \cdot \log(x) + b$  angepasst, ergibt sich ein optimaler Partikeldurchmesser von  $R_{\text{opt}} = 65.27 \text{ nm}$ .

Bei den Abbildungen 2.12(b-d) wird eine logarithmische Farbskala gewählt, um den Kontrast zu verbessern. Dadurch lässt sich der Ratscheneffekt in (c) besser beobachten, allerdings ist eine Aussage über die Größe des Effektes kaum möglich, da die logarithmische Skala gravierende Unterschiede für kleine Konzentrationen aufbläht und für große Konzentrationen marginalisiert.

Die Abbildung (b) zeigt den Transport für einen Partikelradius von



**Abbildung 2.12:** Variation der Partikelradien.  $N = 200$ ,  $\rho = 8900 \text{ kg m}^{-3}$ , Magnetisierung  $M = 1.8 \cdot 10^6 \text{ A m}^{-1}$ . Die Ratsche hat folgende Geometrie nach Auge u. a. (2009) (siehe Abbildung 2.5)  $a = 41 \mu\text{m}$ ,  $h = 0.1 \mu\text{m}$ ,  $b = 200 \mu\text{m}$ ,  $s = 2.5 \mu\text{m}$ ,  $k = 20 \mu\text{m}$  mit einem Stromfluss von  $I = 0.0197 \text{ A}$  durch jeden Leiter. Die Schaltzeiten sind  $\tau_{\text{on}} = 11.5 \text{ s}$  und  $\tau_{\text{off}} = 3.5 \text{ s}$ , die Zeitschrittlänge ist  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ . (a) Mittlere Geschwindigkeit in  $x$  Richtung gegen Partikelradius  $R$ . (b-d) Zeitliche Entwicklung der Partikelverteilung als Farbhistogramm (vgl. Abb. 2.9 (b))

$R = 14$  nm. In diesem Fall dominiert die Diffusion den Transport klar und es ist kaum ein Ratscheneffekt zu sehen. Einzig die Tatsache, dass es sich um ein gekipptes Ratschenpotential handelt, sorgt für einen minimalen Drift.

Die mittlere Abbildung (c) für einen Partikelradius von  $R = 68$  nm verdeutlicht den Transport nahe dem optimalen Radius. Während die Ratsche angeschaltet ist, findet ein konstanter Transport der Partikel in die Transportrichtung statt. Die Diffusionszeiten sind groß genug, um das Potentialmaximum in die eine Richtung zu überwinden, aber einen Transport in die andere Richtung zu verhindern.

Zuletzt ist in Abbildung (d) bei einem Radius von  $R = 383$  nm der magnetisch dominierte Fall gezeigt. Die Diffusionszeiten reichen kaum aus, um das Potentialmaximum zu erreichen und nur 1% aller Partikel erreicht nach 6 Ratschenzyklen das nächste Minimum.

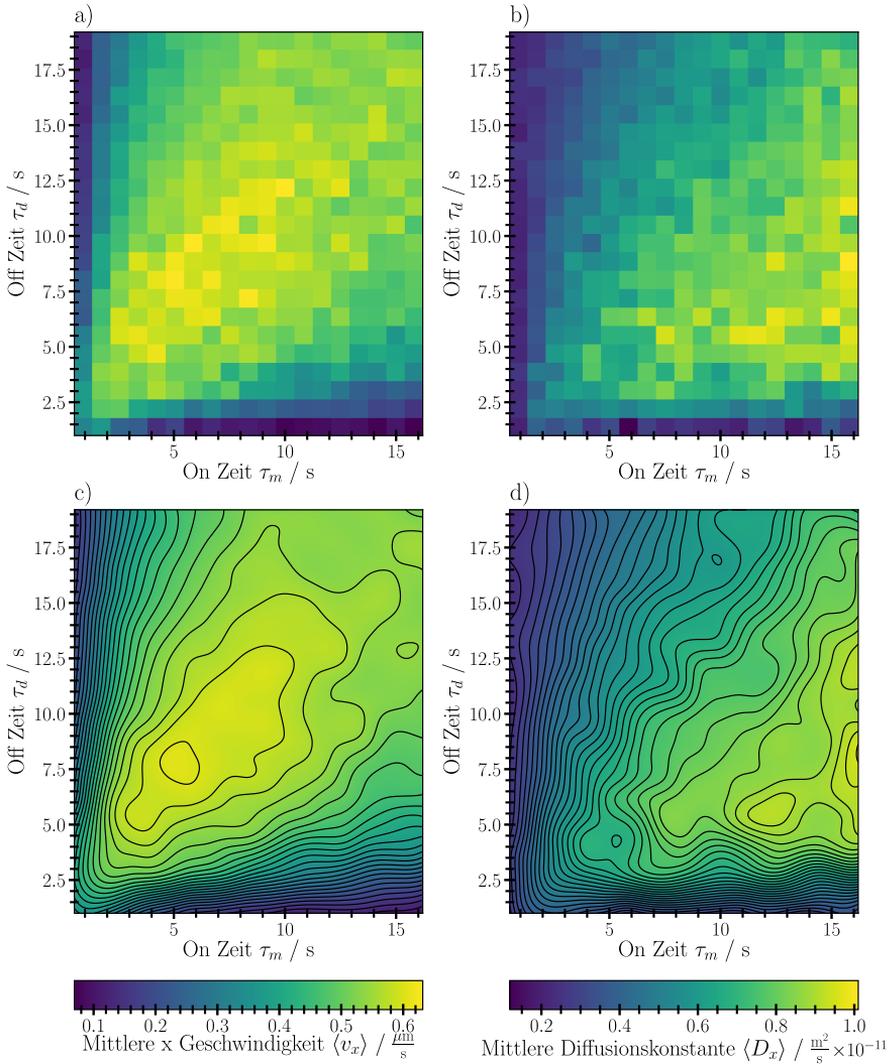
**Optimierung der Schaltzeiten** Unabhängig von der gegebenen Ratschengeometrie lassen sich die Schaltzeiten  $\tau_m$  und  $\tau_d$  nahezu frei einstellen. Damit ist es möglich ein und dieselbe Struktur für unterschiedliche Partikel zu optimieren. Dafür wird im Rahmen dieser Arbeit der Parameterraum  $[\tau_d, \tau_m]$  abgetastet. Die Ergebnisse dieser Studie sind in Abbildung 2.13 zu sehen. Wie zuvor wurden geringe Partikelzahlen und Ratschenzyklen gewählt, um große die Anzahl an Simulationen zu bewältigen. Die Rohdaten in Abbildung 2.13 (a) und (b) sind entsprechend verrauscht. Nichtsdestotrotz lassen sich die Parameter des maximalen Transports abschätzen. Eine erste Abschätzung legt eine Diffusionszeit im Bereich von  $\tau_d \in [4\text{ s}, 14\text{ s}]$  und eine Transportzeit von  $\tau_m \in [2\text{ s}, 12\text{ s}]$  nahe.

Mithilfe eines Gaußfilters ( $\sigma = 0.8$ ) werden die Daten geglättet, um eine genauere Bestimmung des Maximums zu ermöglichen. Zusätzlich ist die Abbildung 2.13 (c) mit Kontourlinien versehen. Dadurch ist es möglich die optimalen Schaltzeiten auf jeweils  $\tau_d \in [7\text{ s}, 8.5\text{ s}]$  und  $\tau_m \in [4\text{ s}, 6\text{ s}]$  einzuschränken.

Eine genauere Bestimmung ist nur mit einem feineren Raster und mehr Ratschenzyklen möglich. Ist lediglich die optimale Schaltzeit von Interesse, ist eine Parameteroptimierung dem Rastern vorzuziehen.

Die Abbildungen 2.13 (b) und (d) zeigen die Werte der  $x$  Achsen-Diffusionskonstante  $D$  im Parameterraum. Diese ist ein Maß dafür, wie kohärent sich ein Partikelpaket durch die Ratsche bewegt. Da-

bei zeigt sich, dass Kohärenz und Transportrate separat voneinander optimiert werden können.



**Abbildung 2.13:** Variation der Schaltzeiten. Partikelradius  $r = 100$  nm, die restlichen Parameter entsprechen denen aus Abbildung 2.12. Der Parameterraum ist mit  $22 \times 19$  Punkten gerastert, jede Simulation umfasst 8 Zyklen. (a/c) zeigen die partikel- und zeitgemittelte Geschwindigkeit in  $x$  Richtung, (b/d) die zeitgemittelte Diffusionskonstante in  $x$  Richtung. (a/b) zeigen die Rohdaten, (c/d) sind mit einem Gaußfilter ( $\sigma = 0.8$ ) geglättet.

## 2.6 Zusammenfassung

Es zeigt sich, dass das im Rahmen der Arbeit entwickelte Simulationsprogramm in der Lage ist die Brownsche Bewegung von makroskopischen Partikeln unter Einfluss eines Kraftfeldes zu berechnen. Dafür wurden verschiedene Testszenarien aufgestellt und ausprobiert (siehe Kap. 2.5.1). Die dabei erreichten Werte sind in guter Übereinstimmung mit den theoretisch berechneten Werten. Das komplexe Beispiel der gekippten Temperaturregler liefert Ergebnisse, welche in qualitativer Übereinstimmung mit der Literatur stehen.

Für die magnetische On-Off Ratsche wurden als Parameter der Partikelradius und die Schaltzeiten der Ratsche eingehend untersucht. Der optimale Partikelradius ließ sich dabei durch Anpassung von logarithmischen Funktionen bestimmen. Klar unterscheiden lassen sich Bereiche diffusiv-dominierten und magnetisch-dominierten Transports.

Der Einfluss von Partikelgröße und magnetischem Moment, beides wurde in dieser Arbeit nur gekoppelt untersucht, ist besonders interessant, wenn nicht-magnetische Objekte, beispielweise biologische Proben, gleicher Größenordnung an die magnetischen Partikel gebunden werden. Dadurch ändert sich deren Diffusivität, jedoch nicht das magnetische Moment der Partikel. Eine Optimierung der Ratsche auf das Trennen von solchen Verbundpartikeln von freien Partikeln ist ein interessanter Ausgangspunkt für die Detektion.

Zuletzt wurde der Parameterraum der Schaltzeiten  $[\tau_d, \tau_m]$  abgerastert, zum einen um die optimalen Parameterwerte zu bestimmen und zum anderen um eine Vorstellung von dem Verlauf des Raumes zu bekommen. Es zeigt sich ein großer Bereich hoher Transportgeschwindigkeit mit einem schwach ausgeprägten Maximum in einem langgezogenen Plateau, in dem die Geschwindigkeit nur langsam abnimmt. Wird zudem der Verlauf der Diffusionskonstanten betrachtet, zeigt sich, dass je nach Einstellung der Schaltzeiten, Partikel mehr oder weniger konzentriert transportiert werden können, ohne die Geschwindigkeit wesentlich zu ändern.

**Ausblick** Die entwickelte Simulationssoftware bietet eine Vielzahl neuer Möglichkeiten, magnetische Ratschenstrukturen zu optimieren. Darüber hinaus gibt es einige Ansatzpunkte für weitere Forschung und Optimierung des bestehenden Programms:

- Die Kopplung des Programms mit einem iterativen Optimierer würde es erlauben schneller optimale Parametersätze für die Ratsche zu berechnen. Dadurch wäre es beispielsweise möglich nicht nur die Schaltzeiten, sondern auch die Ratschengeometrie selbst, für eine bestimmte Partikelart anzupassen. Dies entspricht einer Optimierung mit fünf freien Parametern ( $\tau_m$  Magnetfeld an,  $\tau_d$  Magnetfeld aus,  $a$  Leiterbahnlänge,  $h$  Leiterbahnhöhe,  $s$  Leiterbahnabstand). Manuell lässt sich dieses Problem nicht mehr lösen.
- Beschleunigung der Simulation. Die momentane Umsetzung basiert auf Python wobei ein Großteil der Numerik vom Pythonpaket NumPy übernommen wird. Eine Umsetzung des Langevin Iterators in beispielsweise Cython oder reinem C könnte zu deutlichen Performanceverbesserungen führen. Des Weiteren ist die Berechnung der magnetischen Felder numerisch sehr anspruchsvoll, da hierfür ein Volumenintegral verwendet wird. Diese Verbesserung würde weitere, umfangreichere Parameterstudien ermöglichen.
- Das Simulationsprogramm unterstützt zu diesem Zeitpunkt bereits die Berechnung von Magnetfeldern homogen-magnetisierter Materie. Es gibt einige interessante Ratschenkonzepte, welche auf der Verschiebung von magnetischen Domänen beruhen. Diese könnten realisiert werden, um die Ergebnisse zu vergleichen und die Konzepte auszubauen.
- Die Art des Kraftfeldes ist im Programm selbst nicht festgelegt. Wie schon bei der Temperaturratsche gezeigt, kann jedes beliebige Kraftfeld verwendet werden. Somit sind auch andere Ratschentypen umsetzbar.
- Theoretisch wäre es auch möglich, Partikel-Partikel-Interaktionen innerhalb der Ratsche abzubilden. Dies wird zu einer längeren Laufzeit führen, da die zum einen die Zeitschrittgröße deutlich verringert werden müsste und zum anderen die Kräfte auf einzelne Partikeln nicht mehr nur von ihrer Position abhängen.

### 3 Riesenmagnetowiderstand in granularen Systemen

In magnetischen Systemen mit mehreren magnetischen, durch nicht-magnetische Bereiche getrennten, Domänen kommt es zu einer Änderung des Widerstands, sobald das System einem magnetischen Feld ausgesetzt wird. Dieser sogenannte Riesenmagnetowiderstand wurde zuerst in Mehrschichtsystemen beobachtet (Baibich u. a. 1988; Binasch u. a. 1989), kurz darauf wurde der Effekt auch in granularen Systemen gemessen (Berkowitz u. a. 1992; Xiao u. a. 1992; Dupuis u. a. 1997). Diese Systeme bestehen aus magnetischen Partikeln, die in eine Matrix aus nicht magnetischem, elektrisch leitendem Material eingebettet werden. Näheres zum Riesenmagnetowiderstand, der Entwicklung und seinen Anwendungen findet sich beispielsweise im Übersichtsartikel von Ennen u. a. (2016).

Das folgende Kapitel wird sich mit der Simulation granularer Systemen beschäftigen und eine Möglichkeit vorstellen, den Einfluss der Partikelordnung auf den Riesenmagnetowiderstand zu untersuchen. Der vorgestellte Ansatz beschränkt sich dabei auf Systeme in denen die Leitfähigkeit des Matrixmaterials deutlich geringer ist, als die der Partikel. Zuerst werden kurz die theoretischen Grundlagen des Riesenmagnetowiderstands in Mehrschicht- und granularen Systemen eingeführt (Kap. 3.1). Anschließend wird der Transport von Ladungsträgern behandelt zusammen mit dem Knotenpotenzial-Verfahren zur Lösung von Widerstandsnetzwerken (Kap. 3.2). Danach folgt eine kurze Einführung in Makrospin-Dynamik (Kap. 3.3) und Wegfindungsalgorithmen (Kap. 3.4). Abschnitt 3.5 widmet sich der Modellierung des granularen Riesenmagnetowiderstands und die Umsetzung des Modells in Programmcode. Darüberhinausgehende Informationen finden sich in der Dokumentation (Kappe 2019a). Es folgen erste Ergebnisse und der qualitative Vergleich mit experimentellen Daten (Kap. 3.6). Abgeschlossen wird das Kapitel mit einer Diskussion der Ergebnisse und einem Ausblick auf zukünftige Einsätze (Kap. 3.7).

#### 3.1 Beschreibungen des Riesenmagnetowiderstands

Der Riesenmagnetowiderstand (im Folgenden kurz *GMR* für giant magnetoresistance) entsteht durch Streuung von Elektronen in magnetischem Material und seinen Grenzschichten. Die Häufigkeit dieser Streuungen ist dabei abhängig von der Spinorientierung des Elek-

trons. Wenn dessen Spin und die Magnetisierung des Materials gleichgerichtet sind, im Folgenden als *Spin-Up* Elektronen bezeichnet, ist die Transmissionswahrscheinlichkeit höher als im Fall der entgegengesetzten Ausrichtung (im Folgenden antiparalleler Zustand genannt). Durch das magnetische Material kommt es so zu einer Spinpolarisation des elektrischen Stroms, deren Ausprägung exponentiell mit der Spindiffusionslänge  $\lambda_{sf}$  abfällt. Folgen in Richtung des Stromflusses mehrere magnetische Domänen im parallelen Zustand, führt dies zu wenig Streuprozessen und einem niedrigeren Widerstand. Ist hingegen ein antiparalleler Zustand vorhanden, gibt es viele Streuprozesse und einen hohen Widerstand. Für die Effektgröße des *GMR* gibt es zwei verschiedene Berechnungsarten, im Folgenden wird dafür

$$\text{GMR}(H) = \frac{R(H) - R(\infty)}{R(\infty)} = \frac{R(H) - R_P}{R_P} \quad (3.1)$$

benutzt, wobei  $R(H)$  den Widerstand bei einem externen Magnetfeld  $H$  und  $R(\infty) = R_P$  den Widerstand bei komplett ausgerichteten magnetischen Momenten bezeichnet. Der maximale Effekt wird bei entgegengesetzter Magnetisierung aller benachbarten Schichten mit

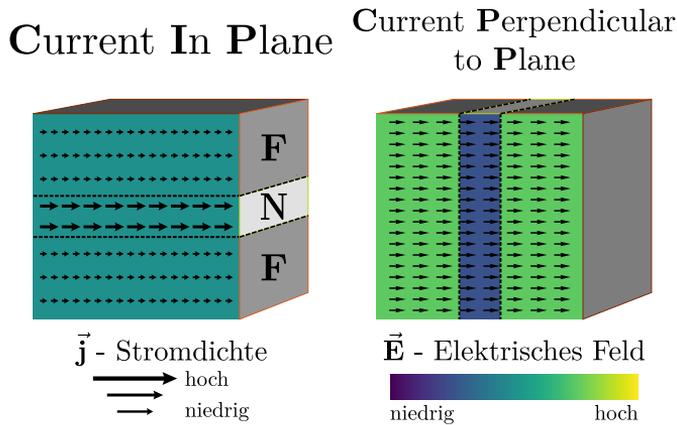
$$\text{GMR} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P} \quad (3.2)$$

erreicht, mit  $R_{AP}$  dem Widerstand im antiparallelen Zustand.

Im Folgenden soll nun näher auf Mehrschichtsysteme eingegangen werden, da es sich hier um gut untersuchte und beschriebene Systeme handelt (Kap. 3.1.1). Insbesondere wird dabei das Zwei-Spin-Kanal-Widerstandsmodell besprochen (Kap. 3.1.2). Anschließend werden diese Mechanismen auf granulare Systeme angewendet und erweitert (Kap. 3.1.3). Eine tief gehende, umfassende Erklärung und Behandlung der Theorien zum *GMR* sprengt den Rahmen dieser Arbeit und ist nicht nötig um das Modell und Simulationsprogramm nachzuvollziehen. Einen umfassenden Überblick über dieses weite Feld bieten unter anderem Tsymbal u. Zutic (2011) und Ennen u. a. (2016).

### 3.1.1 Der *GMR* in Mehrschichtsystemen

Ein Mehrschichtsystem aus abwechselnd magnetischen ( $\mathbf{F}$ ) und nichtmagnetischen Schichten ( $\mathbf{N}$ ), wie in Abbildung 3.1 dargestellt, zeigt



**Abbildung 3.1:** Elektrisches Feld  $\vec{E}$  und Stromdichte  $\vec{j}$  in einer einfachen GMR Doppelschicht. Links in **CIP** und rechts in **CPP** Konfiguration.

einen Widerstand, welcher sich durch ein magnetisches Feld beeinflussen lässt. Wie eingangs erwähnt, liegt dies an der spinabhängigen Streuwahrscheinlichkeit in magnetischen Material. Der Schichtstapel kann in zwei Orientierungen vom Strom durchflossen werden, (siehe Abb. 3.1). Die ersten Experimente (Binasch u. a. 1989; Baibich u. a. 1988) wurden mit Stromrichtung parallel zu den Schichten (siehe Abb. 3.1 links) durchgeführt, kurz als **CIP** (*Current In Plane*) bezeichnet. Wird der Stromfluss senkrecht zu den Schichten angelegt (siehe Abb. 3.1 links) wird dies als **CPP** (*Current Perpendicular to Plane*) bezeichnet. Beide Orientierungen zeigen den *GMR* Effekt, wobei dieser im **CPP** Fall üblicherweise ausgeprägter auftritt.

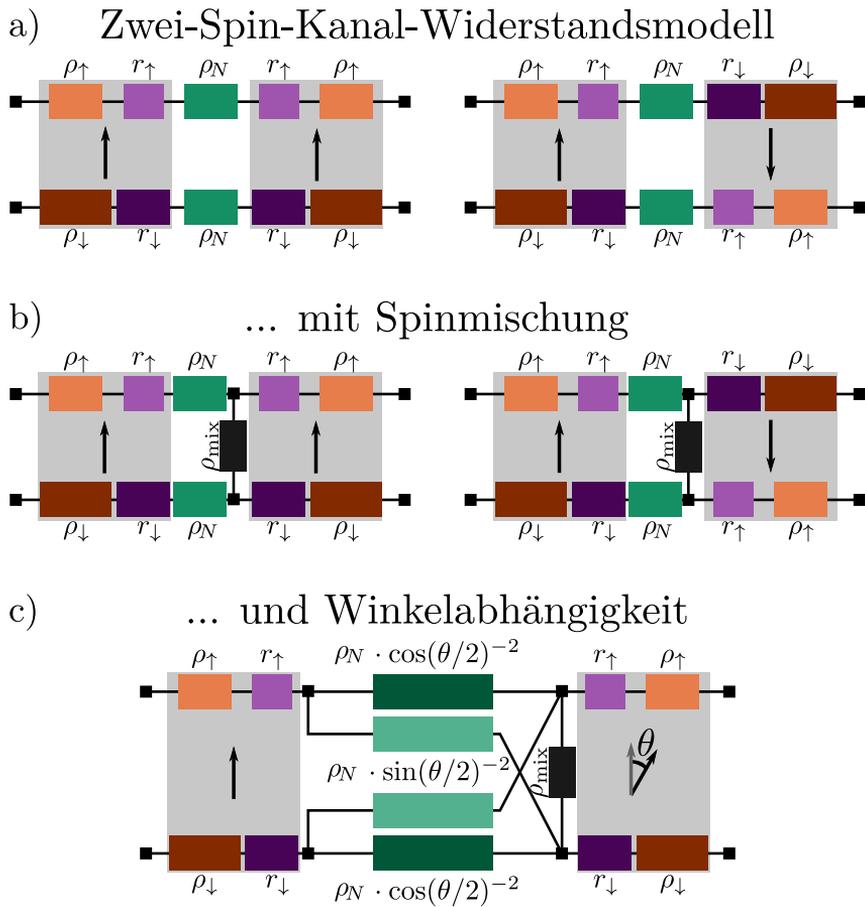
**CIP GMR** Beim **CIP GMR** ist das elektrische Feld makroskopisch betrachtet homogen, dafür die Stromdichte  $\vec{j}$  in den Schichten und an der Grenzschicht unterschiedlich. Die Spininformation der Elektronen muss hier senkrecht zur Stromrichtung ausgetauscht werden. Daher ist diese Art des *GMR* empfindlicher von der Schichtdicke  $t_N$  der nicht-magnetischen Schicht (**N**) abhängig. Genauer, der Transport von Elektronen zwischen den magnetischen Schichten wird durch Streuung im nicht-magnetischen Medium gehemmt. Daher ist eine kleine Schichtdicke  $t_N$  im Verhältnis zur freien Weglänge  $\lambda_n$  entscheidend für große Effekte. Die theoretische Beschreibung über eine Boltzmann Transport Gleichung wird jedoch durch das homogene elektri-

sche Feld vereinfacht. Beispiele für solche Modelle zur Beschreibung des **CIP GMRs** finden sich in den Artikeln von Camley u. Barnaś (1989), Johnson u. Camley (1991) und Zhang u. a. (1992).

**CPP GMR** Beim **CPP GMR** fällt auf, dass die makroskopische Stromdichte homogen ist, wogegen das elektrische Feld  $\vec{E}$  sich von Schicht zu Schicht unterscheidet. Die Spininformation der Elektronen wird hier entlang der Stromrichtung ausgetauscht, wodurch auch dickere **N** Schichten einen *GMR* Effekt zeigen. Entscheidend ist in diesem Fall das Verhältnis von Schichtdicke  $t_N$  zur Spin-Diffusionslänge  $\lambda_{sf}$ , welche in der Regel deutlich größer als die freie Weglänge ist. Die Inhomogenität, genauer die Sprünge des elektrischen Feldes an den Übergängen zwischen magnetischen und nicht-magnetischen Schichten erschweren zwar das theoretische Modell, die homogene Stromstärke erlaubt jedoch eine phänomenologische Beschreibung mithilfe eines Widerstandsnetzwerkes. Beispiele für solche Berechnungen des **CPP GMRs** finden sich in Zhang u. Levy (1991), Camblong u. a. (1993) und Valet u. Fert (1993).

### 3.1.2 Zwei-Spin-Kanal Widerstandsmodell

Für den Fall, dass die Schichtdicken deutlich kleiner als die Spin-Diffusionslänge sind  $t_N, t_F \ll \lambda_{sf}$  (Valet u. Fert 1993), kann ein *GMR* Schichtsystem mithilfe eines Widerstandsmodells beschrieben werden. Die Abbildung 3.2 (a) zeigt ein solches Modell, welches eine parallel Schaltung aus zwei Reihen von Widerständen ist, je eine für *Spin-Up* und *Spin-Down* Elektronen. Dabei werden folgende Parameter benötigt: die spezifischen Widerstände der nicht-magnetischen Schicht  $\rho_N$ , der magnetischen Schicht für *Spin-Up* Elektronen  $\rho_\uparrow$  und *Spin-Down* Elektronen  $\rho_\downarrow$ , sowie der Grenzschichtwiderstand für *Spin-Up*  $r_\uparrow$  und *Spin-Down*  $r_\downarrow$  Elektronen. Sind nun, wie im linken Fall, alle magnetischen Momente in eine Richtung ausgerichtet, reihen sich für die *Spin-Up* Elektronen die Widerstände  $\rho_\uparrow, r_\uparrow$  und  $\rho_N$  aneinander und für die *Spin-Down* Elektronen die Widerstände  $\rho_\downarrow, r_\downarrow$  und  $\rho_N$ . Bei alternierenden magnetischen Moment, wechseln sich die niedrigen *Spin-Up* und hohen *Spin-Down* Widerstände jeweils ab. Experimentell können die Widerstandswerte bestimmt werden und so der Größe des *GMR* Effekts für verschiedene Schichtdicken und Anzahlen vorhersagen. Des



**Abbildung 3.2:** Darstellung des Ersatzschaltbildes für ein Doppelschicht *GMR* System für ein einfaches Schichtsystem mit parallel ausgerichteten magnetischen Momenten nach Valet u. Fert (1993) in (a). (b) zeigt ein Modell mit Spinmischung in der nicht-magnetischen Schicht nach Ustinov u. Kravtsov (1995). (c) zeigt die Erweiterung für beliebige Winkel zwischen den magnetischen Momenten benachbarter Schichten (vgl. Gl. (3.4)).

Weiteren ergibt sich ein linearer Zusammenhang zwischen den Widerständen für ausgerichtete Magnetisierungen  $R_P$  und entgegengesetzte Magnetisierungen  $R_{AP}$  mit der Anzahl der Schichten  $n$

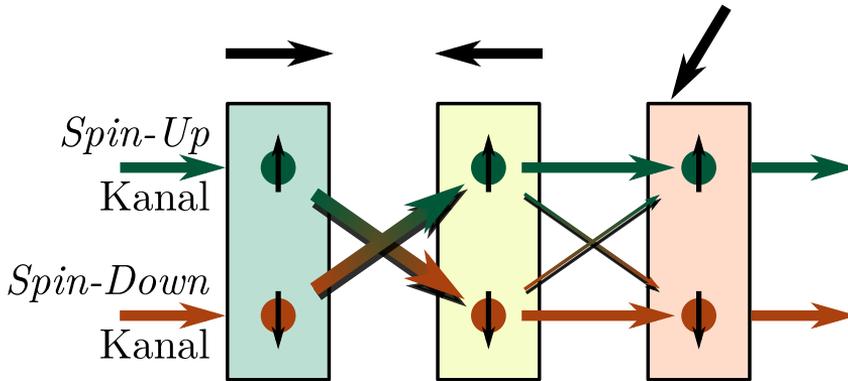
$$\sqrt{(R_{AP} - R_P)R_{AP}} = \frac{n}{2} \left( \frac{\rho_{\downarrow} - \rho_{\uparrow}}{2} t_F + r_{\downarrow} - r_{\uparrow} \right). \quad (3.3)$$

Unberücksichtigt bleibt bisher die Spindiffusionslänge. Diese setzt sich aus zwei Vorgängen zusammen, der elastischen Streuung an Störstellen, insbesondere schweren Atomen mit hoher Spin-Bahn Kopplung und der nicht-elastischen Streuung an Phononen und Magnonen (Fert u. a. 1995). Letzterer ist temperaturabhängig und bei Messungen nah der Raumtemperatur relevant und kann im Zwei-Spin-Kanal-Widerstandsmodell berücksichtigt werden (Ustinov u. Kravtsov 1995). Dabei sind die beiden Spinkanäle durch einen Widerstand verbunden (siehe Abb. 3.2 (b)). Dieser Widerstand  $\rho_{\text{mix}}$  modelliert den Prozess der Spinmischung (*engl. spin-mixing*). Die Streuung an Störstellen und somit der komplette Spindiffusionsprozess lässt sich nicht in einem einfachen Widerstandsmodell berücksichtigen, da dieses Modell nur für sehr große Spindiffusionslängen gültig ist.

Im Gegensatz zu einem Schichtsystem beschränken sich die magnetischen Zustände ohne und mit Feld bei einem System aus magnetischen Nanopartikeln selten auf eine antiparallele und parallele Ausrichtung. Beim Übergang von einer magnetischen Domäne zu einer anderen, deren magnetische Momente unter einem Winkel von  $\theta$  zueinander stehen, ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein *Spin-Up* Elektron eines bleibt  $\cos(\theta/2)^2$  und umgekehrt dafür, dass es zum *Spin-Down* Elektron wird  $\sin(\theta/2)^2$ . Die Ströme  $\vec{\mathbf{J}} = (J^{\uparrow}, J^{\downarrow})^T$ , wobei  $J^{\uparrow}/J^{\downarrow}$  die Ströme im *Spin-Up/Spin-Down* Kanal repräsentieren, transformieren hierbei mit

$$\vec{\mathbf{J}}' = \begin{pmatrix} J'^{\uparrow} \\ J'^{\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)^2 & \sin(\theta/2)^2 \\ \sin(\theta/2)^2 & \cos(\theta/2)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J^{\uparrow} \\ J^{\downarrow} \end{pmatrix} = \mathbf{D}(\theta) \vec{\mathbf{J}}. \quad (3.4)$$

Im Stromnetzwerk wird diese Transformation mithilfe eines Stromteilers umgesetzt. Dabei sind die Leitungskanäle für *Spin-Up* und *Spin-Down* Elektronen verbunden wie in Abbildung 3.2 (c) gezeigt. Für die parallele und antiparallele Ausrichtung benachbarter Domänen führt dies zu demselben Widerstandsnetzwerk wie zuvor.



**Abbildung 3.3:** Transformation des Elektronenspins im Übergang zwischen Materialien unterschiedlicher Magnetisierung (schwarze Pfeile). Grün ist der *Spin-Up* und orange der *Spin-Down* Kanal.

### 3.1.3 Der *GMR* in granularen Systemen

Der Riesenmagnetowiderstand ist nicht auf Schichtsysteme beschränkt. Ein System aus magnetischen Partikeln **PF** in einer leitenden nicht-magnetischen Matrix **MN** zeigt ebenfalls einen *GMR* Effekt. Dieser Effekt hat sowohl Eigenschaften des **CIP** wie auch des **CPP** *GMRs* (Rubinstein 1994). Die Längenskala für die Partikelabstände ist sowohl durch die Spindiffusionslänge wie auch durch die freie Weglänge bestimmt. Das elektrische Feld wie auch der elektrische Strom sind nicht trivial und hängen von den Materialeigenschaften sowie der Partikelanordnung und -konzentration ab. Im Gegensatz zum Schicht *GMR* ist der Effekt jedoch nahezu unabhängig von der Stromflussrichtung.

Die theoretische Behandlung wie auch frühe Experimente beschränken sich auf rein metallische Systeme. Diese Arbeit befasst sich mit einer Beschreibung des granularen *GMR* für diejenigen Systeme, in welchen die Leitfähigkeit der Matrix **MN** deutlich geringer als die der Partikel **PF** ist  $\rho_{MN} \ll \rho_{PF}$ . Dadurch beschränkt sich die elektrische Leitung auf räumlich begrenzte Pfade (siehe Kap. 3.6.1). Mit dieser Einschränkung ähnelt das System einem Widerstandsnetzwerk. Dieses Netzwerk in Kombination mit dem erweiterten Zwei-Spin-Kanal-Widerstandsmodell (Kap. 3.1.2) wurde im Rahmen der Arbeit entwickelt und getestet. Die Umsetzung desselben wird in Abschnitt 3.5 genauer beschrieben.

### 3.2 Ladungsträgertransport in inhomogenen Festkörpern

Im vorangegangenen Kapitel wurde das Zwei-Spin-Kanal Modell eingeführt, welches den Riesenmagnetowiderstand in einer CPP Struktur beschreibt. Weiterhin wurde die Ähnlichkeit zwischen einer CPP-Struktur und einem granularen System mit hohen Matrixwiderständen gezeigt. Die Stromdichteverteilung  $\vec{\mathbf{j}}(\vec{\mathbf{r}})$  in granularen Strukturen gibt eine zusätzliche Motivation für die Verwendung eines Widerstandsnetzwerks. Diese lässt sich für die meisten Materialien mit dem Ohm'schen Gesetz berechnen

$$\vec{\mathbf{j}} = \sigma(\vec{\mathbf{r}})\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}), \quad (3.5)$$

mit der Leitfähigkeit  $\sigma(\vec{\mathbf{r}})$  und dem elektrischen Feld  $\vec{\mathbf{E}}$ . Weiterhin muss  $\vec{\mathbf{j}}$  die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\vec{\mathbf{r}}, t) + \nabla \cdot \vec{\mathbf{j}}(\vec{\mathbf{r}}, t) = 0, \quad (3.6)$$

mit der Ladungsdichte  $\rho(\vec{\mathbf{r}}, t)$  erfüllt werden. Es wird davon ausgegangen, dass sich alle berechneten Systeme im Gleichgewicht befinden und somit vereinfacht sich die Kontinuitätsgleichung zu

$$\nabla \cdot \vec{\mathbf{j}}(\vec{\mathbf{r}}) = 0. \quad (3.7)$$

Zuletzt kann das elektrische Feld  $\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}})$  durch den Gradienten des skalaren, elektrischen Potentials

$$\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}) = -\nabla\phi(\vec{\mathbf{r}}) \quad (3.8)$$

ausgedrückt werden, da das elektrische Feld nach den Maxwell Gleichungen rotationsfrei ist

$$\nabla \times \vec{\mathbf{E}} = 0. \quad (3.9)$$

Wird nun die Gleichung (3.8) in (3.5) eingesetzt und die Divergenz gebildet ergibt sich mit der Gleichungen (3.7):

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{(3.7)}{=} \nabla \cdot \vec{\mathbf{j}}(\vec{\mathbf{r}}) = \nabla \cdot \sigma(\vec{\mathbf{r}})\vec{\mathbf{E}}(\vec{\mathbf{r}}) \stackrel{(3.8)}{=} -\nabla \cdot \sigma(\vec{\mathbf{r}})\nabla\phi(\vec{\mathbf{r}}) \\ 0 &= -\nabla\sigma(\vec{\mathbf{r}}) \cdot \nabla\phi(\vec{\mathbf{r}}) - \sigma(\vec{\mathbf{r}})\Delta\phi(\vec{\mathbf{r}}), \end{aligned} \quad (3.10)$$

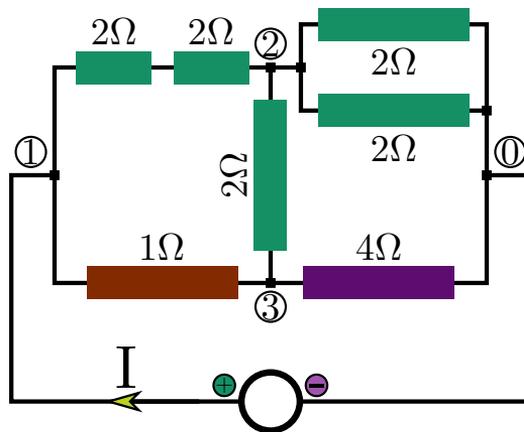
mit der sich der Potentialverlauf in einem Material zwischen zwei Äquipotentialflächen berechnen lässt (Brandt u. Dahmen 2005).

### 3.2.1 Das Knotenpotentialverfahren

Ausgangspunkt für das Zwei-Spin-Kanal Modell, siehe Kapitel 3.1.2, ist das Widerstandsnetzwerk. Im Folgenden wird das *Knotenpotentialverfahren* erklärt. Als Beispiel dazu dient das einfache Widerstandsnetzwerk aus Abbildung 3.4. Das Verfahren wurde gewählt, da es sich einfach verstehen, umsetzen und programmieren lässt. Näheres zu diesem und darauf aufbauenden Verfahren findet sich in Gräßer (2017). Der Nachteil des Verfahrens besteht in seiner Beschränkung auf Quellen und Widerstände als einzige Bauelemente, was hier jedoch ausreichend ist.

Zuerst wird jedem *Knoten*, einer Verbindung von 3 oder mehr Leitern, ein Index zugewiesen, im Beispiel sind dies  $\textcircled{0}$  –  $\textcircled{3}$ . Einem der Knoten, hier  $\textcircled{0}$ , wird im Verfahren das Null-Potential zugeschrieben und alle anderen Potentiale sind immer in Relation zum Knoten  $\textcircled{0}$ . Anschließend wird die *Leitfähigkeitsmatrix*  $C$  nach folgenden Regeln aufgestellt:

1. Jedem Element  $c_{ij}$ , mit  $i \neq j$ , ist die negative Leitfähigkeit zwischen den Knoten  $\textcircled{i}$  und  $\textcircled{j}$  zugeordnet.



**Abbildung 3.4:** Widerstandsnetzwerk mit 3 verschiedenen Widerständen  $R_{\text{braun}} = 1\Omega$ ,  $R_{\text{violett}} = 4\Omega$  und  $R_{\text{grün}} = 2\Omega$ .

2. Die Diagonalelemente  $c_{ii}$  sind jeweils die Summen aller an den Knoten  $(i)$  angeschlossenen Leitfähigkeiten.

Des Weiteren muss der Quellstromvektor  $i_k$  aufgestellt werden, in dem die Ströme, welche in den Knoten  $(k)$  ein- und ausfließen, eingetragen sind. Gesucht ist der Spannungsvektor  $u_k$  der das Potential am Knoten  $(k)$  in Relation zum Knoten  $(0)$  enthält. Zu lösen ist somit das lineare Gleichungssystem

$$\vec{\mathbf{i}} = \mathcal{C}\vec{\mathbf{u}}. \quad (3.11)$$

Für das Beispiel aus Abbildung 3.4 ergibt sich für die Einträge  $c_{ij}$  von  $\mathcal{C}$

$$\begin{aligned} c_{12} = c_{21} &= -\frac{1}{2+2} = -\frac{1}{4} & c_{11} &= \frac{1}{1} + \frac{1}{2+2} = \frac{5}{4} \\ c_{13} = c_{31} &= -\frac{1}{1} = -1 & c_{22} &= \frac{1}{2+2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = \frac{7}{4} \\ c_{23} = c_{32} &= -\frac{1}{2} = -\frac{1}{2} & c_{33} &= \frac{1}{1} + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} = \frac{7}{4}. \end{aligned}$$

Das Gleichungssystem lautet demnach

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.25 & -0.25 & -1 \\ -0.25 & 1.75 & -0.5 \\ -1 & -0.5 & 1.75 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} J \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 2/3 & 4/3 \\ 2/3 & 38/45 & 28/45 \\ 4/3 & 28/45 & 68/45 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Der Spannungsabfall über das gesamte Netzwerk beträgt somit

$$u_1 = 2J$$

und der Widerstand ist

$$R = \frac{U}{J} = 2\Omega.$$

Für beliebige Widerstände  $R_{\text{braun}}$ ,  $R_{\text{violett}}$  und  $R_{\text{grün}}$  ergibt sich

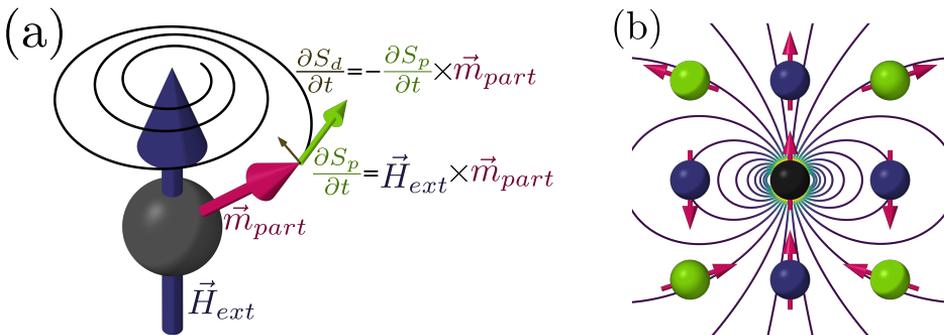
$$R = \frac{R_{\text{grün}}(5R_{\text{braun}}R_{\text{violett}} + 7R_{\text{grün}}(R_{\text{braun}} + R_{\text{violett}}))}{7R_{\text{grün}}^2 + 2R_{\text{braun}}R_{\text{violett}} + 3R_{\text{grün}}(R_{\text{braun}} + 2R_{\text{violett}})}.$$

### 3.3 Makrospindynamik

In Kapitel 2.2.3 wurde bereits die Bewegung von magnetisierten Objekten in magnetischen Feldern thematisiert. Diese beschränkt sich jedoch auf die Translationsbewegung von magnetischen Partikeln, deren Momente entweder durch ein äußeres Feld fixiert sind oder deren Momente parallel zum äußeren Feld stehen. Im Folgenden wird nun die Änderung des magnetischen Moments  $\frac{\partial \vec{m}}{\partial t}$  für fixierte Partikel betrachtet. Es wird des Weiteren davon ausgegangen, dass alle Partikel homogen magnetisierte Kugeln sind, welche eine einzige ferromagnetische Domäne ausbilden. Unter diesen Annahmen können diese als punktförmige magnetische Momente behandelt werden und das Drehmoment  $\tau$ , welches auf sie in einem magnetischen Feld  $\vec{H}$  wirkt ist

$$\tau = \vec{m} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{m}}{\partial t}. \quad (3.12)$$

Wird die Gleichung (3.12) gelöst, so ergibt sich eine gleichmäßige Präzession des magnetischen Moments um die magnetische Feldrichtung. In der Regel ist diese Bewegung jedoch nur von kurzer Lebensdauer, da die Rotationsenergie durch Effekte, wie beispielsweise Wirbelströme, in thermische Energie umgewandelt wird. Dieser Vorgang wurde von Landau, Lifshitz 1992 und später Gilbert 2004 mithilfe eines phä-



**Abbildung 3.5:** Interaktion zwischen Partikeln und magnetischem Feld.  
 (a) Präzession des magnetischen Moments im äußeren Magnetfeld. (b) Ausrichtung des Partikelmoments abhängig von der Position zum schwarzen Partikel.

nomenologischen Dämpfungskoeffizienten beschrieben

$$\frac{\partial \vec{\mathbf{m}}}{\partial t} = \gamma \vec{\mathbf{H}} \times \vec{\mathbf{m}} - \frac{\lambda}{|\vec{\mathbf{m}}|^2} (\vec{\mathbf{H}} \times \vec{\mathbf{m}}) \times \vec{\mathbf{m}}, \quad (3.13)$$

mit der Dämpfungskonstante  $\lambda$  und dem gyromagnetischen Verhältnis  $\gamma$ , welche beide materialabhängige Parameter sind. Im Fall eines Systems aus  $N$  magnetischen Partikeln wird aus der Gleichung (3.13) ein System aus  $N$  gekoppelten gewöhnlichen Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{\mathbf{m}}_i}{\partial t} = & \gamma \vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{m}}_1, \vec{\mathbf{m}}_2, \dots, \vec{\mathbf{m}}_N) \times \vec{\mathbf{m}}_i \\ & + \frac{\lambda}{|\vec{\mathbf{m}}_i|^2} (\vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{m}}_1, \vec{\mathbf{m}}_2, \dots, \vec{\mathbf{m}}_N) \times \vec{\mathbf{m}}_i) \times \vec{\mathbf{m}}_i, \end{aligned} \quad (3.14)$$

wobei das magnetische Feld  $\vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{m}}_1, \dots, \vec{\mathbf{m}}_N)$  aus der Summe der Streufelder der einzelnen Momente besteht. Das magnetische Feld einer homogen magnetisierten Kugel entspricht dem eines Punktdipols

$$\vec{\mathbf{H}}(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{m}}_i) = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{3(\vec{\mathbf{m}}_i \cdot \vec{\mathbf{r}}) \vec{\mathbf{r}}}{|\vec{\mathbf{r}}|^5} - \frac{\vec{\mathbf{m}}_i}{|\vec{\mathbf{r}}|^3} \right) \quad \text{für } |\vec{\mathbf{r}}| > R, \quad (3.15)$$

wobei  $\vec{\mathbf{r}}$  vom Moment  $\vec{\mathbf{m}}_i$  zu dem Punkt zeigt, an dem das magnetische Feld gesucht ist und dem Partikelradius  $R$ .

Aus der Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung (3.13) resultiert die in Abbildung 3.5(a) gezeigte Präzession des magnetischen Moments um das äußere Feld. Für zwei Partikel zeigt Abbildung 3.5(b), wie sich das magnetische Moment entlang der Feldlinien des schwarzen Partikels, mit fixiertem magnetischen Moment, ausrichtet. Die blau markierten Positionen mit paralleler beziehungsweise antiparalleler Ausrichtung sind energetisch günstiger, als die anderen gezeigten Positionen. Für drei und mehr Partikel können so sehr komplexe magnetische Zustände entstehen, Beispiele dafür werden später in Abschnitt 3.6.2 gezeigt.

Es sei an dieser Stelle noch angemerkt, dass es möglich ist die Landau-Lifshitz-Gilbert Gleichung (3.13) um einen temperaturabhängigen Anteil ähnlich der Langevin Gleichung (2.1) zu erweitern. Des Weiteren sind neben der Dipol-Dipol Wechselwirkung ebenfalls ferro- und antiferromagnetische Kopplungen zwischen Momenten möglich, sowie Anisotropien. Näheres dazu findet sich beispielsweise in Schröder (2000), Engelhardt u. Schröder (2011) oder Weddemann (2009).

### 3.4 Wegfindung

Wie später in der Modellierung (Kap. 3.5) beschrieben wird, ist es notwendig jeder Verbindung zwischen zwei Partikeln eine Richtung zuzuweisen. Dazu wurde im Programmcode ein einfacher Algorithmus aus der Graphentheorie implementiert. Diese Herangehensweise wird im Folgenden beschrieben (Kap. 3.4.1). Anschließend wird erklärt, wie aus der resultierenden Matrix die nächsten Nachbarn eines Objektes gefunden werden können (Kap. 3.4.2). Abgeschlossen wird dieser Abschnitt mit einer Methode die Richtungen für Verbindungen zwischen zwei Partikeln zu bestimmen.

Zur Illustration wird der einfache Graph in Abbildung 3.6 verwendet. Jeder Knotenpunkt ist ein potenzieller Start- oder Zielpunkt und diese sind mit einer schwarzen Zahl zwischen 1 und 5 nummeriert. Die Kanten stehen für ungerichtete Verbindungen und sind mit einer farbig markierten Distanz versehen. Die Distanz ist dabei nur allgemein ein Maß für die Schwierigkeit eine Verbindung zu benutzen. Die eingangs erwähnten Aufgaben lassen sich dabei in folgende Fragen umformulieren:

1. Wie lang ist der kürzeste Weg zwischen zwei Punkten?
2. Welche sind die zu einem Punkt nächstgelegenen Punkte?
3. In welcher Richtung wird eine bestimmte Verbindung passiert?

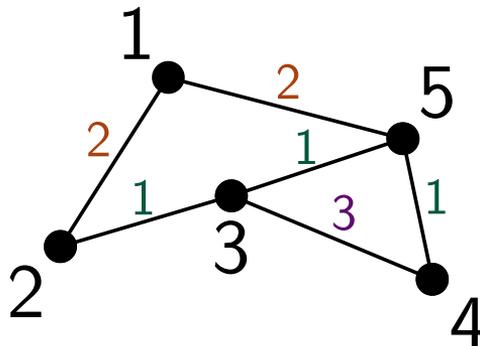


Abbildung 3.6: Einfacher Graph mit Kantengewichten

### 3.4.1 Graphen und Distanzen

Alle Systeme, die im späteren Verlauf untersucht werden, fallen in die Kategorie der einfachen, endlichen, kantengewichteten, zusammenhängenden Graphen. Die folgenden Definitionen sind sinngemäß aus Krumke u. Noltemeier (2009) entnommen.

**Definition** (einfache Graphen). Ein *einfacher Graph* ist ein Tripel  $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, \gamma)$  mit den folgenden Eigenschaften

1.  $\mathcal{V}$  ist eine nicht leere Menge, die Eckmenge des Graphen.
2.  $\mathcal{E}$  ist eine Menge, die Kantenmenge des Graphen.
3.  $\gamma$  ist eine Abbildung

$$\gamma : \mathcal{E} \rightarrow \{u, v \in \mathcal{V}\}.$$

4. Es gilt  $\mathcal{V} \cap \mathcal{E} = \emptyset$ .
5. Der Graph hat weder Schlingen, also Kanten, deren Endpunkte gleich sind, noch Parallelen, also mehrere Kanten zu ein und demselben Eckpaar.

Ein Graph  $G$  heißt *endlich*, wenn sowohl die Eckmenge  $\mathcal{V}$  als auch die Kantenmenge  $\mathcal{E}$  endlich sind.

**Definition** (Weg). Sei  $G$  ein *einfacher Graph*. Ein Weg in  $G$  ist eine endliche Folge  $P = (v_0, e_1, v_1, \dots, e_k, v_k)$  mit  $k \geq 0$ , sodass  $v_0, v_1, \dots, v_k \in \mathcal{V}$  Ecken von  $G$  und  $e_1, e_2, \dots, e_k \in \mathcal{E}$  Kanten mit  $\gamma(e_i) = \{v_{i-1}, v_i\}$  sind.

**Definition** (Zusammenhängender Graph). In einem zusammenhängenden Graph  $G$  gibt es für jeden Startpunkt  $u \in \mathcal{V}$  und Zielpunkt  $v \in \mathcal{V}$  einen Weg.

**Definition** (Kantengewichte). In einem kantengewichteten Graph ist jeder Kante  $e \in \mathcal{E}$  zwischen zwei Knotenpunkten  $\gamma(e) = \{u, v\}$  ein Gewicht  $d(e)$  zugeteilt. Dabei erfüllen die Gewichte die *Dreiecksungleichung*

$$d(u, v) \leq d(u, w) + d(w, v) \quad \forall u, v, w \in \mathcal{V}.$$

Für einen *ungerichteten Graphen* gilt zudem

$$d(u, v) = d(v, u) \quad \forall u, v \in \mathcal{V}$$

**Definition** (Adjazenzmatrix). Die *Adjazenzmatrix* eines einfachen, endlichen Graphen  $G(\mathcal{V}, \mathcal{E}, \gamma)$  mit Kantengewichten  $d : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}$  ist eine  $n \times n$  Matrix  $\mathbf{A}(G)$  mit

$$a_{ij} = \begin{cases} d(e) & \text{wenn } \{i, j\} \in \mathcal{E} \\ 0 & \text{wenn } i = j \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.16)$$

Für den einfachen Graphen in Abbildung 3.6 ergibt sich damit folgende Adjazenzmatrix

$$\mathbf{A}(G) = \begin{bmatrix} 0 & 2 & \infty & \infty & 2 \\ 2 & 0 & 1 & \infty & \infty \\ \infty & 1 & 0 & 3 & 1 \\ \infty & \infty & 3 & 0 & 1 \\ 2 & \infty & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

Um die kürzesten Weglängen im Graphen  $G$  zu bestimmen, wird ein neuer Operator eingeführt (Bellman 1952; Rader 2011).

**Definition** (min.+ Operator). Seien  $\mathbf{A}, \tilde{\mathbf{A}}$  quadratische Matrizen, dann hat die Matrix  $\mathbf{B}$

$$\mathbf{B} = \mathbf{A} \text{ min.} + \tilde{\mathbf{A}} \quad (3.18)$$

folgende Elemente

$$B_{ij} = \min_k \{a_{ik} + \tilde{a}_{kj}\}. \quad (3.19)$$

Wird der min.+ Operator auf eine Adjazenzmatrix  $\mathbf{A}$  angewendet, erhält die resultierende Matrix  $\mathbf{A}^{\diamond 2}$  die Länge der kürzesten *Wege* aus maximal zwei Kanten, daher wird die Matrix mit  $\diamond 2$  überschrieben.

**Algorithmus.** Die Matrix  $\mathbf{D}$  mit den kürzesten Entfernungen zwischen allen Eckpunkten eines zusammenhängenden Graphen  $G$  wird mit folgenden Schritten berechnet:

1. Erstelle die *Adjazenzmatrix*  $\mathbf{A}$  des Systems.
2. Berechne das Ergebnis  $\mathbf{A}^{\diamond 2r} = \mathbf{A}^{\diamond 2(r-1)} \text{ min.} + \mathbf{A}^{\diamond 2(r-1)}$  mit  $r = 1$  und  $\mathbf{A}^{\diamond 0} = \mathbf{A}$ .
3. Wiederhole Schritt 2 mit  $r = r + 1$  solange bis  $\mathbf{A}^{\diamond 2r} = \mathbf{A}^{\diamond 2(r-1)}$ .

4. Setze  $\mathbf{D} = \mathbf{A}^{\diamond 2r}$

Im Falle der Adjazenzmatrix (3.17) ergibt sich

$$\mathbf{A}^{\diamond 2} = \mathbf{A} \text{ min.} + \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 3 & 3 & 2 \\ 2 & 0 & 1 & 4 & 2 \\ 3 & 1 & 0 & 2 & 1 \\ 3 & 4 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.20)$$

Die Matrix  $\mathbf{A}^{\diamond 2}$  enthält nun auch die Länge des Weges von 1 nach 4, obwohl beide Ecken im Graphen nicht durch eine Kante verbunden sind. Eine weitere Anwendung des min.+ Operators auf die resultierende Matrix ergibt alle Wege aus maximal vier Kanten

$$\mathbf{A}^{\diamond 4} = \mathbf{A}^{\diamond 2} \text{ min.} + \mathbf{A}^{\diamond 2} = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 3 & 3 & 2 \\ 2 & 0 & 1 & 3 & 2 \\ 3 & 1 & 0 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.21)$$

Nach diesem Schritt fällt auf, dass ein kürzerer Weg zwischen den Ecken 2 und 4 gefunden wurde. Jede weitere Anwendung des Operators würde die Matrix nicht weiter verändern und somit gilt  $\mathbf{D} = \mathbf{A}^{\diamond 4}$ .

### 3.4.2 Nachbarschaften, kürzeste Wege und Richtungen

**Die nächste Nachbarschaft** einer Ecke  $i$  in einem Graphen  $G$  lässt sich mit der Matrix  $\mathbf{D}$  bestimmen. Dafür werden in Spalte  $D_i$  der Matrix  $\mathbf{D}$  die kleinsten Einträge größer Null gesucht. Im Falle des Beispiels ergibt sich für die Ecke 3

$$D_3 = [3 \quad 1 \quad 0 \quad 2 \quad 1] \quad (3.22)$$

und somit, dass die Ecken 2 und 5 am nächsten liegen. Ist die *Adjazenzmatrix* mit den Distanzen zwischen Objekten gefüllt, lassen sich so Nachbarschaften bestimmen, nicht nur nächste Nachbarn, sondern auch übernächste und Radien.

**Die kürzesten Wege** können ebenfalls aus der *Adjazenzmatrix* rekonstruiert werden.

**Satz.** Sei  $G = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, \gamma)$  ein einfacher, zusammenhängender Graph mit Kantengewichten  $d : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{R}$  und  $\mathbf{D}$  das Ergebnis des Algorithmus in Abschnitt 3.4.1. Der kürzeste Weg zwischen zwei Ecken  $i$  und  $j$  passiert dabei folgende Ecken

$$\operatorname{argmin}(D_i + D_j),$$

wobei  $\operatorname{argmin}$  die Indices der Einträge mit dem niedrigsten Wert sind.

*Beweis.* Sei  $P = (i, e_1, v_1, e_2, v_2, \dots, e_k, j)$  der kürzeste Weg zwischen  $i$  und  $j$  mit einer Länge von  $d(i, j) = \sum_{l=1}^k d(e_l)$ , so gilt für jede Ecke  $m$  auf  $P$

$$d(i, m) = \sum_{l=1}^m d(e_l) \quad d(m, j) = \sum_{l=m}^k d(e_l) \quad (3.23)$$

und daher

$$d(i, j) = d(i, m) + d(m, j) \quad \forall m \in P. \quad (3.24)$$

Die Summe zwischen den beiden Spalten  $D_i$  und  $D_j$  ist

$$D_i + D_j = \left[ d(i, 1) + d(1, j) \quad \cdots \quad d(i, m) + d(m, j) \quad \cdots \right] \quad (3.25)$$

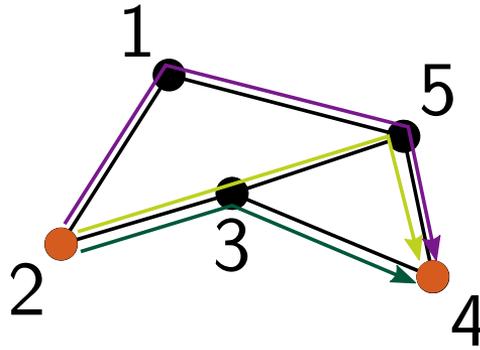
Ein Element dieser Summe kann folgende Werte haben

$$(D_i + D_j)_n = \begin{cases} d(i, n) + d(n, j) & \forall n \neq i, j \\ d(i, j) + d(j, j) = d(i, j) & n = j \\ d(i, i) + d(i, j) = d(i, j) & n = i \end{cases} \quad (3.26)$$

Somit sind nach der Dreiecksungleichung alle Werte von  $(D_i + D_j)_n \geq d(i, j) \forall n$  und alle Einträge, für welche die Gleichheit gilt, liegen auf dem kürzesten Weg  $P$ .  $\square$

**Korolla.** Sind die Ecken  $v_i$  auf einem Weg  $P = (i, e_1, v_1, e_2, v_2, \dots, e_k, j)$  bestimmt, kann die Reihenfolge durch Vergleich mit der Matrixspalte  $D_i$  bestimmt werden.

*Beispiel.* Gesucht ist der kürzeste Weg im Graphen  $G$  aus Abbildung 3.6 von Eckpunkt 2 zu Eckpunkt 4. Die drei in Abbildung 3.7 gezeigten Wege sind möglich aber unterschiedlich lang. Die Kürzeste-Wege-



**Abbildung 3.7:** Die drei möglichen Wege im Graphen aus Abbildung 3.6 von Punkt 2 nach 4.

Adjazenzmatrix  $\mathbf{D}$  für diesen Graphen ist (3.21) mit den Spalten 2 und 4

$$D_2 = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 & 3 & 2 \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

$$D_4 = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 2 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

Aus  $D_2 + D_4$  ergibt sich dann

$$D_2 + D_4 = \begin{bmatrix} 5 & 3 & 3 & 3 & 3 \end{bmatrix}. \quad (3.29)$$

Damit sind die Eckpunkte im kürzesten Weg  $P$  eine Teilmenge von  $\{2, 3, 4, 5\}$ . Ein Blick in die Gleichung (3.27) zeigt, dass der Weg  $P = (2, e_{23}, 3, e_{35}, 5, e_{54}, 4)$  sein muss. Sollten bei diesem Vergleich mehrere Wege die gleiche Entfernung zum Startpunkt haben, so handelt es sich hier um zwei verschiedene Wege mit gleicher Länge.

**Richtungen zuweisen** Die letzte Frage ist die nach der Richtung einer Verbindung. Das Programm wird später aus einem einfachen Graphen, in dem jede Ecke mit jeder anderen verbunden ist, einen gerichteten Graphen erstellen in dem nur nächste Nachbarn verbunden sind. Aus diesem Grund stellt sich die Frage danach, in welcher Richtung Verbindungen passiert werden sollten. Gesucht ist auf dem Weg  $P$ , mit dem Startpunkt  $v_0$  und dem Zielpunkt  $v_k$ , die Richtung der Verbindung zweier Punkte  $v_i, v_{i+1}$ . Dazu müssen die Längen der beiden Wege  $P_{ij} = (v_0, e_1, \dots, v_i, e_{ij}, v_j, \dots, v_k)$  und  $P_{ji} =$

$(v_0, e_1, \dots, v_j, e_{ij}, v_i, \dots, v_k)$  miteinander verglichen werden. Diese ergeben

$$|P_{ij}| = \sum_{l=0}^{k-1} d(v_l, v_{l+1}) = \sum_{l=0}^{i-1} d(v_l, v_{l+1}) + d(v_i, v_j) + \sum_{l=j}^{k-1} d(v_l, v_{l+1})$$

$$\Rightarrow |P_{ij}| = d(v_0, v_i) + d(v_i, v_j) + d(v_j, v_k) \quad (3.30)$$

$$\Rightarrow |P_{ji}| = d(v_0, v_j) + d(v_j, v_i) + d(v_i, v_k), \quad (3.31)$$

mit einer Differenz von

$$|P_{ji}| - |P_{ij}| = (d(v_0, v_j) - d(v_0, v_i)) + (d(v_i, v_k) - d(v_j, v_k)), \quad (3.32)$$

sodass die Verbindung von  $i$  nach  $j$  verläuft, solange dieser Ausdruck positiv ist und andersherum bei negativen Werten.

*Beispiel.* Der Startpunkt des Pfades  $P$  sei  $v_0 = 1$  und der Zielpunkt  $v_k = 4$ . In welcher Reihenfolge passiert der Weg die Punkte 3 und 5? Laut der Adjazenzmatrix  $\mathbf{D}$  aus (3.21) gilt

$$\begin{aligned} d(1, 3) &= 3 \\ d(1, 5) &= 2 \\ d(3, 5) &= 1 \\ d(3, 4) &= 3 \\ d(5, 4) &= 1 \\ \Rightarrow |P_{35}| &= 3 + 1 + 1 = 5 \\ \Rightarrow |P_{53}| &= 2 + 1 + 3 = 6. \end{aligned}$$

Daher muss die Verbindung von 3 nach 5 gehen.

### 3.5 Modellierung des *GMR* in granularen Systemen

Dieses Kapitel widmet sich der technischen Umsetzung der Simulation. Die Arbeitsschritte des Programms zur Simulation des granularen Riesenmagnetowiderstands, kurz *GranMR*, sollen im Folgenden schematisch beschrieben werden. Die explizite Umsetzung in Python ist in der Dokumentation einzusehen (Kappe 2019a), ebenso wie einige Beispiele zum Einstieg.

Eine *GranMR* Simulation besteht aus folgenden Schritten

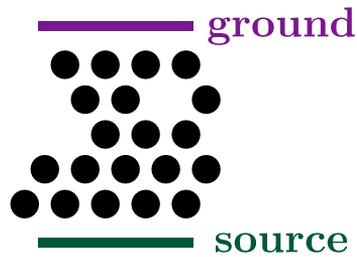
1. Erzeugung der Partikelgeometrie entweder als geordnetes Gitter (mit Fehlstellen) oder als zufällige Anordnung von Partikeln und der Platzierung zweier Terminals Spannungsquelle und Erdung.
2. Berechnung des magnetischen Zustands für eine Hystereseschleife mit CINOLA (Schröder 2000).
3. Automatisiertes Verbinden der Partikel in Stromrichtung.
4. Erzeugung des Widerstandsnetzwerkes.
5. Berechnung des Gesamtwiderstands für alle Magnetfeldwerte.
6. Berechnung des Riesenmagnetowiderstands.

Die wichtigsten Schritte sind in Abbildung 3.8 dargestellt und sollen nun im folgenden genauer beschrieben werden.

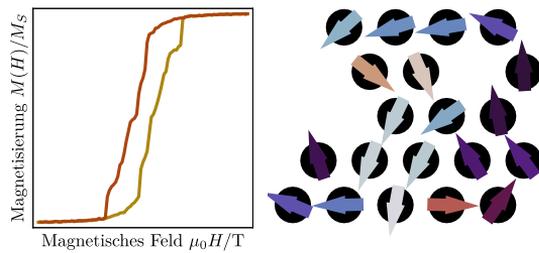
**Die Geometrieerzeugung** des granularen Systems ist vollkommen frei. Dazu wird eine Liste mit *Particle* Objekten angelegt, welche Position, Radius und Magnetisierungsdaten enthält. Es sind ebenfalls Routinen integriert, welche geordnete hexagonale und quadratische Gitter mit und ohne Fehlstellen erzeugen können. Des Weiteren müssen zwei *Terminal* Objekte definiert werden, eine Quelle *source* und eine Erdung *ground*.

**Die Berechnung der Hystereseschleife mit CINOLA** liefert den zeitlichen Verlauf der magnetischen Momente der Partikel. CINOLA (Schröder 2000) berechnet für ein vorgegebenes System von magnetischen Momenten deren Ausrichtung unter Berücksichtigung der Dipol-Dipol Wechselwirkung und dem angelegten Feld. Zusätzlich ist es möglich Austauschwechselwirkungen und Anisotropien zu modellieren, dies wurde allerdings nur für die Rechnungen zum Schicht-GMR getan.

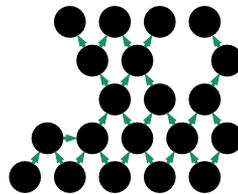
Die Geometrie-  
erzeugung



Die Berechnung  
der Hystereseschleife  
in CINOLA



Vernetzung durch  
Wegfindung



Das Erstellen  
des Widerstands-  
netzwerks

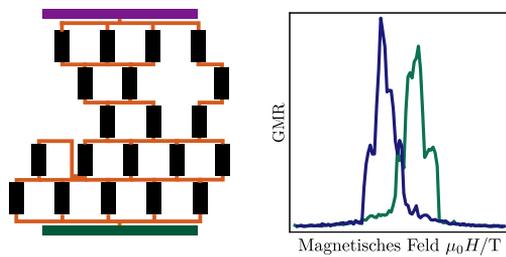


Abbildung 3.8: Schematische Darstellung der Modellierungsschritte.

**Die Vernetzung durch Wegfindung** der Partikel ist eine der wichtigsten Aufgaben des Programms. Ohne diese muss jede nicht triviale Geometrie (einfache Gitter ohne Fehlstellen) von Hand vernetzt werden. Zudem muss jeder Verbindung eine Richtung zugewiesen werden. Zu diesem Zweck wurde der in Kapitel 3.4 beschriebene Wegfindungsalgorithmus implementiert. Damit ist es nicht nur möglich, die zu verbindenden Paare zu ermitteln, je nach gewählter Verbindungsart, sondern auch herauszufinden, welcher der Partner näher an einer Stromquelle positioniert ist, siehe Abschnitt 3.4.2 – *Richtungen zuweisen*.

Im Programm werden zur Vernetzung alle nächsten Nachbarn direkt vernetzt. Anschließend wird für jede Verbindung die Richtung festgelegt. Es wurden auch andere Vernetzungsmöglichkeiten untersucht, welche jedoch durchweg schlechtere Ergebnisse geliefert haben (Kap. 3.6.3).

**Das Erstellen des Widerstandsnetzwerks** erfolgt nach folgenden Regeln:

- Jedes Partikel besteht aus zwei Widerständen, je einen für den *Spin-Up* und den *Spin-Down* Kanal und somit vier Anschlüsse (siehe Abb. 3.9a).
- Die beiden eingehenden Anschlüsse eines Partikels sind durch einen Widerstand verbunden, welcher Spinmischung zulässt (siehe Abb. 3.9(b)).
- Sind zwei Partikel verbunden, so sind die *Spin-Up* und *Spin-Down* Kanäle jeweils *gerade* miteinander verbunden und *gekreuzt* mit dem jeweils anderen (siehe Abb. 3.9 (b)).
- Die Leitfähigkeiten  $G$  bei *gerader* Verbindung sind proportional zu

$$G \propto (\cos(\theta/2))^2,$$

bei *gekreuzter* Verbindung zu

$$G \propto (\sin(\theta/2))^2,$$

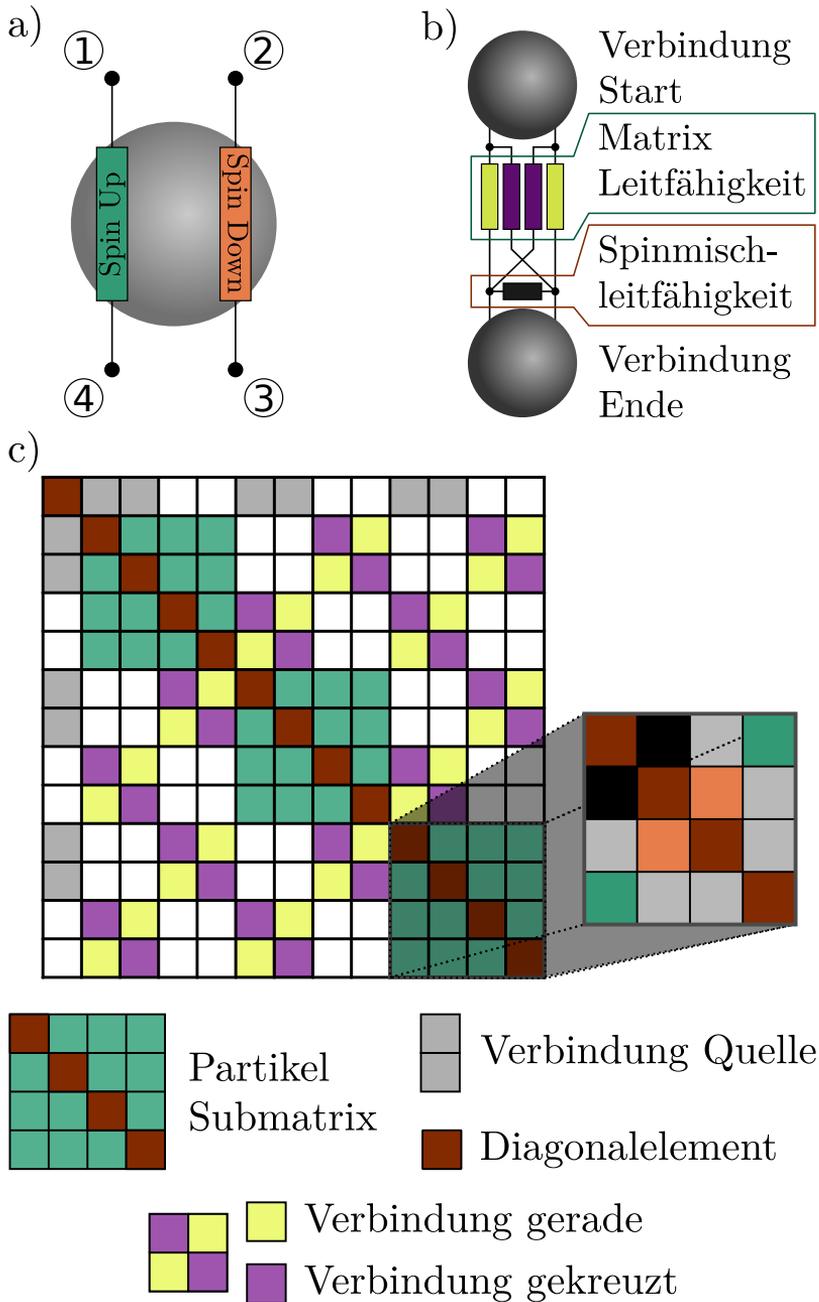
wobei  $\theta$  für den Winkel zwischen den Momenten der beiden Partikel steht. Des Weiteren ist die Leitfähigkeit invers-proportional

zum Abstand  $d$  zwischen den Partikeloberflächen

$$G \propto \frac{1}{d}$$

Nach diesen Regeln wird die Leitfähigkeitsmatrix  $\mathcal{C}$  mithilfe des Knotenpotentialverfahrens (Kap. 3.2.1) aufgestellt. Der Aufbau dieser Matrix ist in Abbildung 3.9 gezeigt. Auf der Diagonalen reihen sich die Einträge der Partikel als  $4 \times 4$  Matrix auf, die Verbindungen zwischen zwei Partikeln sind  $2 \times 2$  Matrizen. Die erste Reihe und Spalte sind für das Quellenterminal und alle Verbindungen zu diesem reserviert.

Da sich die Winkel  $\theta$  zwischen verbundenen Partikeln mit dem angelegten Feld ändern, müssen diese Schritte für jeden magnetischen Zustand wiederholt werden, womit sich dann schlussendlich eine Widerstandskurve ergibt.



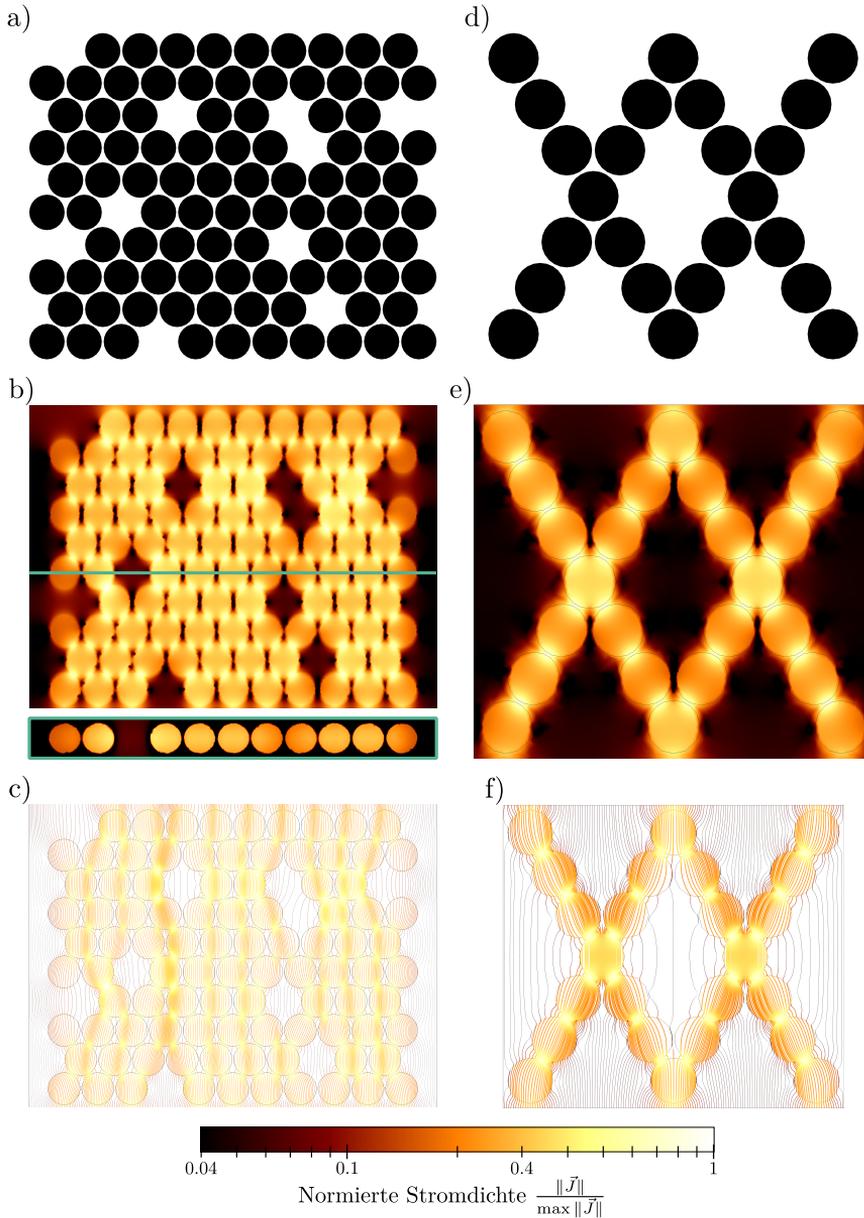
**Abbildung 3.9:** Vernetzung der Partikel.(a) Die Anschlüsse eines Partikels.(b) Die Verbindung zwischen zwei Partikeln.(c) Die Leitfähigkeitsmatrix eines Systems mit drei Partikeln.

## 3.6 Ergebnisse zum granularen Riesenmagnetowiderstand

Im Folgenden werden die Ergebnisse der granularen *GMR* Simulationen präsentiert, ausgewertet und diskutiert.

### 3.6.1 Ladungstransport in granularen Systeme

In Abbildung 3.10 sind die Ergebnisse zweier Finiten Elemente Simulationen (FEM) des Stromflusses durch dreidimensionale granuläre Systeme zu sehen. Die Simulationen wurden mithilfe von COMSOL Multiphysics<sup>®</sup> durchgeführt. Es wurde ein Leitfähigkeitsverhältnis von Matrix- zu Partikelmaterial von  $\sigma_{\text{part}}/\sigma_{\text{mat}} = 1 \cdot 10^3$  gewählt. Dabei zeigt sich, dass ein großer Teil der Leitung zwischen den Partikeln stattfindet, sowohl in der dichten hexagonalen Struktur (a-c), wie auch bei der dünn besiedelten Kreuzstruktur (d-f). Die Stromdichte zwischen den Partikeln ist ein bis zwei Größenordnungen höher als im umgebenen Matrixmaterial b. Durch die schmalen Leitungskanäle zwischen den Partikeln zeigt sich der Netzwerkcharakter, welcher sich bei größeren Leitfähigkeitsverhältnissen und kleineren Partikelabständen weiter vergrößert. Gerade dieser Partikelabstand ist ein limitierender Faktor für die FEM in granularen Systemen, da der kleine Zwischenraum ausreichend kleinteilig diskretisiert werden muss. Zudem sollten die Gitter nicht zu stark verformt sein. Aufgrund dieser Einschränkungen können die Ergebnisse nur benutzt werden, um ein Gefühl für den Stromfluss im System zu erhalten. In der Kreuzstruktur (siehe Abb. 3.10 (d-f)) zeigt sich die Konzentration der Strompfade noch deutlicher (siehe Abb. 3.10 (f)). Alles in allem lässt sich sagen, dass der Ansatz eines Widerstandsnetzwerkes möglich ist, so lange sich Matrix- und Partikelwiderstand um mehrere Größenordnungen unterscheiden und die Partikelabstände im Verhältnis zur gesamten Struktur und den Partikeln selber klein sind.



**Abbildung 3.10:** FEM Simulation des Stromflusses durch eine Partikelanordnungen mit  $\sigma_{\text{part}} = 1 \cdot 10^3 \text{ S/m}$  in einer schlecht leitenden Matrix  $\sigma_{\text{mat}} = 1 \text{ S/m}$ . Alle Abbildungen sind Querschnitte durch die 3D Struktur, mit der gerechnet wurde. Die linke Seite (a), (c) und (e) zeigen die Ergebnisse für eine hexagonalen Partikelanordnung mit Fehlstellen, die rechte Seite (b), (d) und (f) für eine Struktur Doppel-X-Struktur. Die Abbildungen (c) und (d) zeigen die normierte Stromdichte in logarithmischer Farbskala, (e) und (f) die Stromlinien mit derselben Farbskala.

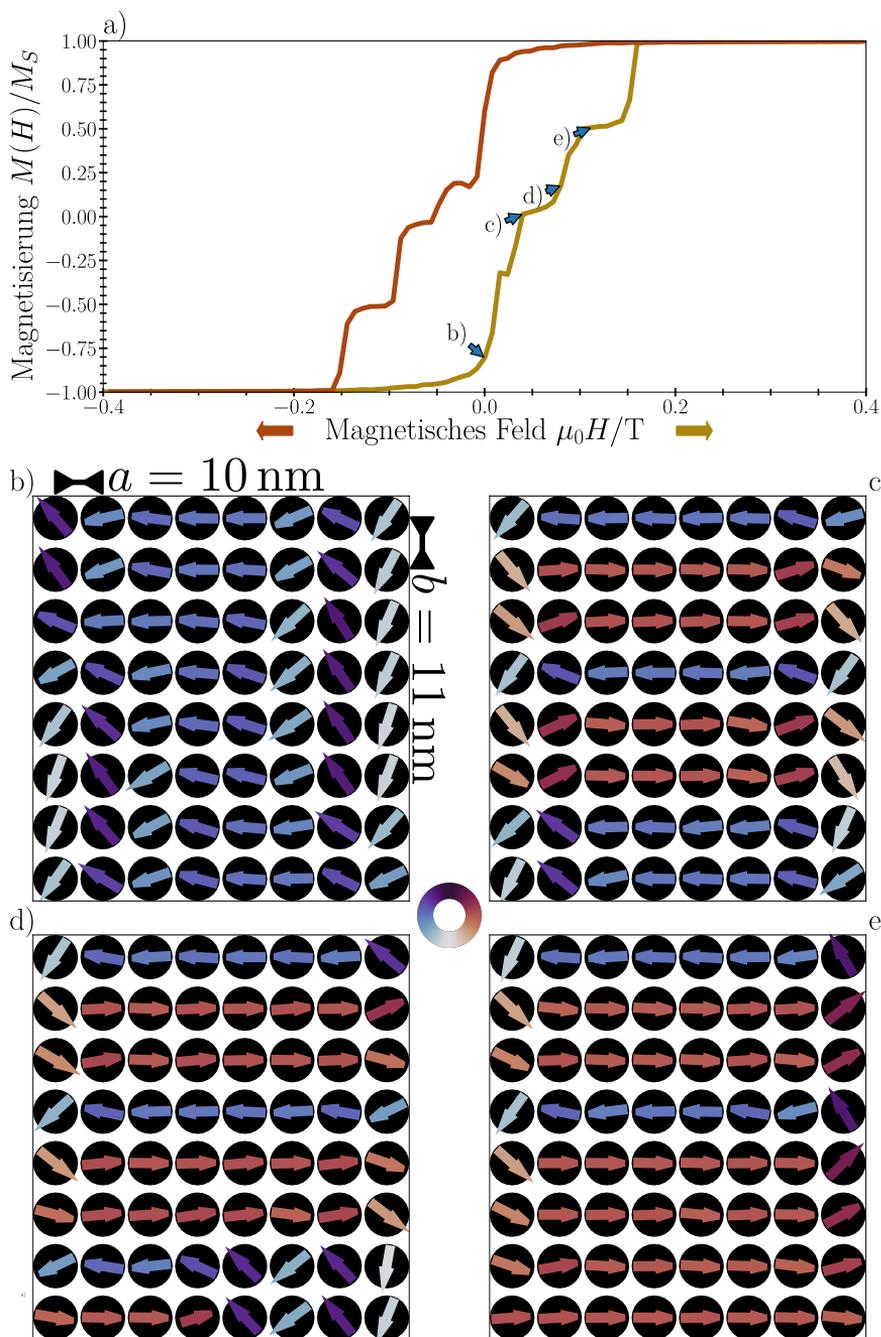
### 3.6.2 Makrospindynamik Simulationen

Es folgen nun die Ergebnisse der Makrospin-Dynamik Simulationen für einige ausgewählte Systeme. Abbildung 3.11 zeigt das einfachste Partikelsystem, ein kubisches Gitter. In der Magnetisierungskurve (siehe Abb. 3.11 (a)) zeigt sich in beiden Richtungen der Hystereseschleife ein treppenartiges Profil. Wie in den Abbildungen (b-e) des magnetischen Zustands zu sehen ist, klappen die Magnetisierungen hier reihenweise um, wodurch sich die Treppenstufen in der Magnetisierungskurve erklären lassen. Da das kubische Gitter leicht in  $y$ -Richtung gestreckt ist, ergibt sich ein recht ausgeprägtes Schaltverhalten der einzelnen Reihen. Abbildung 3.16 zeigt, wie leicht sich das Schaltverhalten durch eine Variation der Gitterparameter manipulieren lässt. Schaltet die Magnetisierung des Systems in Reihen, ist zu erwarten, dass der *GMR* des Systems von der Richtung des Stromflusses abhängt. Wird parallel zu den Reihen gemessen, ist ein zu vernachlässigender *GMR* zu erwarten, bei Messung senkrecht zu den Reihen ein besonders hoher *GMR*.

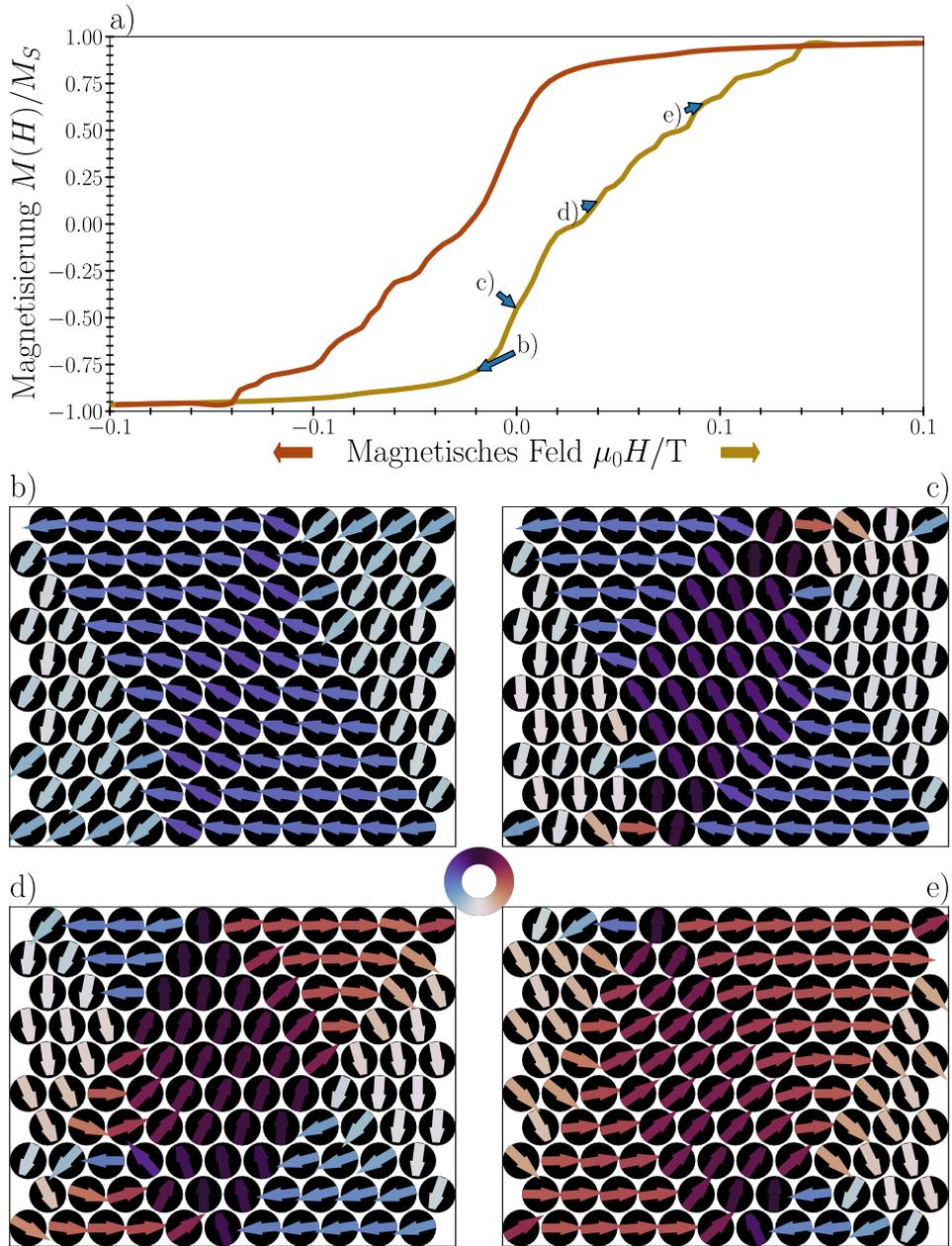
Eine sehr häufige Anordnung für Partikel in der Ebene ist das hexagonale Gitter, welches in Abbildung 3.12 zu sehen ist. Diese Struktur hat eine deutlich glattere Hysteresekurve als das verzerrte kubische Gitter, da sich, anstatt der Reihen, Wirbel ausbilden. Die Position dieser Wirbel lässt sich hier durch Fehlstellen im Gitter beeinflussen, wie in Abbildung 3.17 (f) zu sehen. Auch eine Verzerrung des Gitters würde das Magnetisierungsverhalten ändern, diese wurde im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht untersucht. Bei einer Messung des *GMR* ist im hexagonalen Fall keine Richtungsabhängigkeit zu erwarten, dafür allerdings eine geringere Effektamplitude.

Wie sich das Schaltverhalten von regelmäßigen Gittern durch Fehlstellen verändert zeigt das Kagome-Gitter in Abbildung 3.13. Dieses zeigt, im Gegensatz zum hexagonalen Gitter, keine großen Wirbel, sondern kleine lokale Verdrehungen der Momente gegeneinander. Dadurch ergeben sich mehr Übergänge zwischen Partikeln bei denen die magnetischen Momente einen großen Winkel bilden. Somit ist eine größere Effektamplitude zu erwarten als beim hexagonalen Gitter.

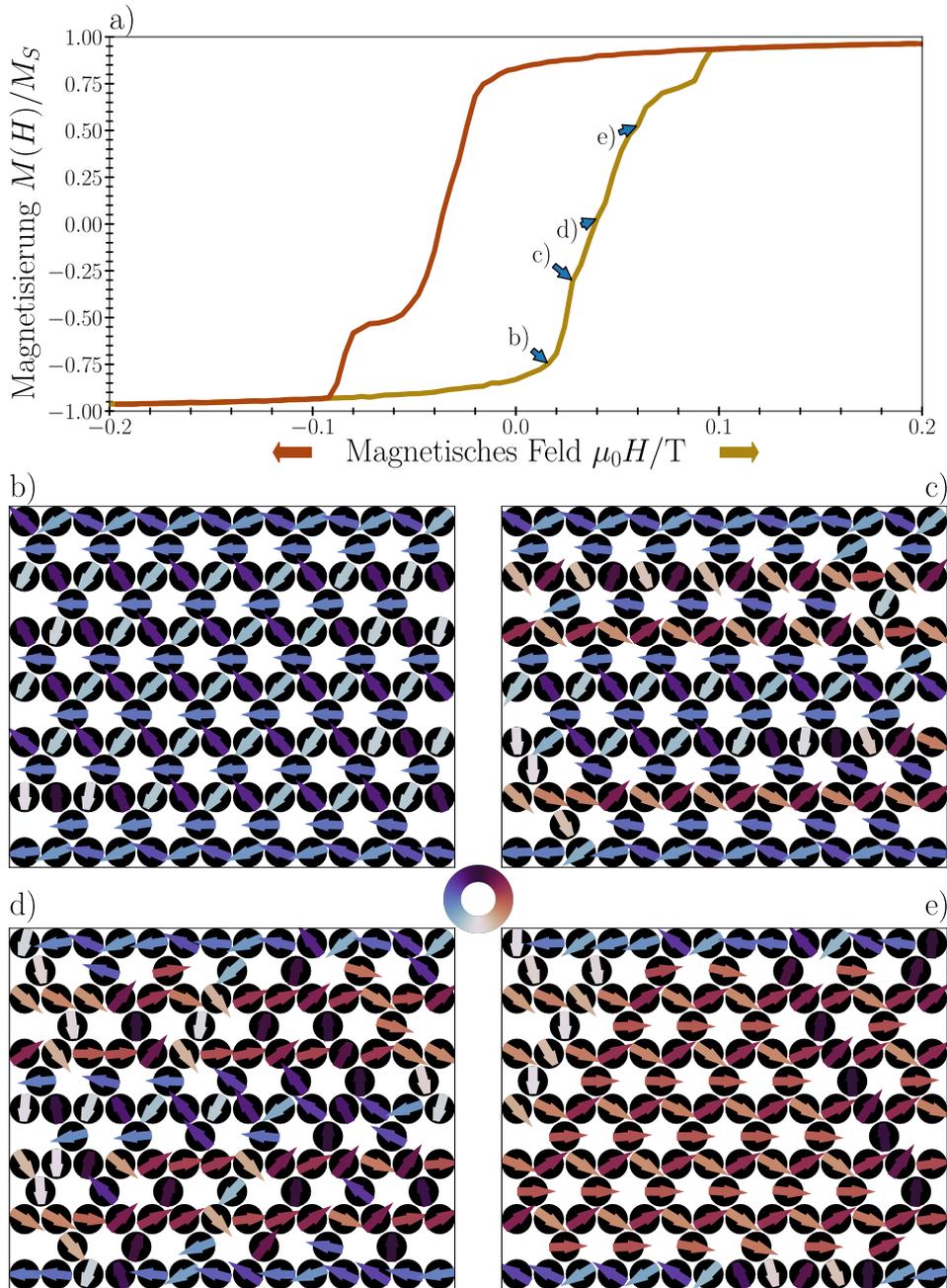
Weitere getestete Strukturen finden sich in den Ergebnissen zum granularen *GMR* (siehe Abb. 3.6.4). Darunter ein System mit Austauschwechselwirkung und Anisotropie oder komplexere Strukturen, wie beispielsweise Kreuze oder verschachtelte Sechsecke.



**Abbildung 3.11:** Simulierte Hysteresekurve und Darstellungen des magnetischen Zustands eines kubischen Gitters. Simulation mit CINOLA bei folgenden Parametern: Zeitschrittlänge  $\Delta t = 1 \cdot 10^{-14} \text{ s}$ , Zeitschritte  $n = 10 \cdot 10^7$ , Gitterparameter  $a = 10 \text{ nm}$ ,  $b = 11 \text{ nm}$ , Temperatur  $T = 30 \text{ K}$ , Magnetisierung  $M_S = 1.48 \cdot 10^6 \text{ A/m}$  und Partikelradius  $r = 4.75 \text{ nm}$ .



**Abbildung 3.12:** Simulierte Hystereseurve und Darstellungen des magnetischen Zustands hexagonalen Gitters mit Gitterparameter  $a = 10$  nm. Die Simulationsparameter entsprechen denen, die in Abbildung 3.11 angegeben sind.



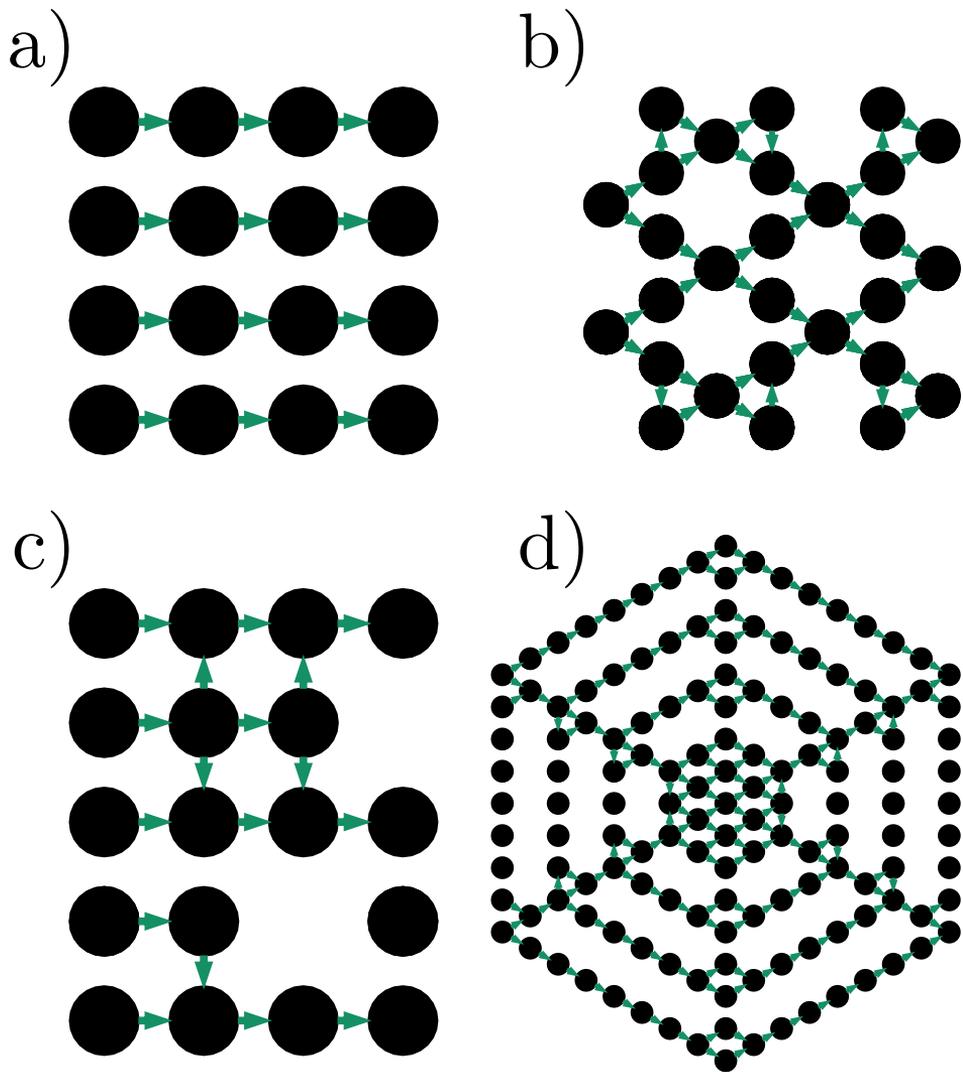
**Abbildung 3.13:** Simulierte Hysteresekurve und Darstellungen des magnetischen Zustands eines Kagome Gitters mit Gitterparameter  $a = 10$  nm. Die Simulationsparameter entsprechend denen, die in Abbildung 3.11 angegeben sind.

### 3.6.3 Wegfindung und Vernetzung von Partikelclustern

Ein zentrales Element des hier vorgestellten Modells ist die Vernetzung der Partikelsysteme. Abbildung 3.14 zeigt beispielhaft die Vernetzung einiger Anordnungen. In Abbildung 3.14 (a) zeigt sich, dass eine einfache Vernetzung senkrecht auf die Vernetzungsrichtung bereits im kubischen Gitter nicht möglich ist, solange keine der Richtungen zu bevorzugen ist. Dafür muss eine lokale Inhomogenität wie in Abbildung 3.14 (c) eingeführt werden. Hier gibt es auch senkrecht zur Vernetzungsrichtung bevorzugte Verbindungen, welche vom Algorithmus auch erkannt werden. Für diese Fälle wurde anfangs mit einem Zufallsverbinder experimentiert, welcher jeder Verbindung, die nicht eindeutig zugewiesen werden kann, eine zufällige Richtung zuweist. Dies führte jedoch besonders bei kleinen Systemen zu sehr starken Schwankungen in der Leitfähigkeit, selbst bei Mittlungen über viele verschiedene Verbindungsmöglichkeiten. Noch problematischer wird dieses Vorgehen jedoch bei Strukturen, wie in Abbildung 3.14 (d) gezeigt, in denen ganze Partikelketten nicht eindeutig verbunden werden können. Hier muss ein Verbindungsalgorithmus alle Partikel einer zusammenhängenden Kette automatisiert erkennen und in ein und derselben Richtung verbinden.

Basieren Strukturen auf einem hexagonalen Gitter, wie etwa das Kagome-Gitter in Abbildung 3.14 (b), findet der Algorithmus gute Gitter, solange Fehlstellen nicht für zu große Lücken sorgen.

Im Laufe der Arbeit wurden verschiedene Vernetzungsalgorithmen getestet. Der Pfadverbinder verbindet alle Partikel, welche sich auf dem kürzesten Weg von der Quelle zum aktuellen Partikel zur Erdung befinden. Diese Methode zeigte sehr ähnliche Ergebnisse zum aktuell verwendeten, gerichteten Nächste-Nachbarn-Verbinder, war jedoch komplexer in der Implementierung. Der gerichtete Sichtlinien-Verbinder, welcher alle Partikel miteinander verbindet, zwischen denen sich kein anderes Partikel befindet, wurde ebenfalls getestet. In diesem Fall konnten zwar auch größere Fehlstellen überwunden werden, allerdings war die Implementation ineffizient. Zuletzt muss noch angemerkt werden, dass eine gerichtete Verbindung aller Partikel untereinander zwar möglich ist, jedoch zu einem verschwindend kleinen *GMR* führt. Zudem widerspricht eine Vernetzung aller Partikel untereinander auch den Ergebnissen aus der FEM Simulation in Abschnitt 3.6.1. Eine zu umfassende Vernetzung sollte daher vermieden werden.



**Abbildung 3.14:** Beispielergebnisse für die automatische Vernetzung von Partikelgittern für einen Stromfluss von links nach rechts. (a) ein einfaches kubisches Gitter, (b) ein Kagome Gitter, (c) ein kubisches Gitter mit Fehlstellen und (d) eine komplexere Struktur auf Basis einer hexagonalen Anordnung.

### 3.6.4 Simulation granularer Systeme

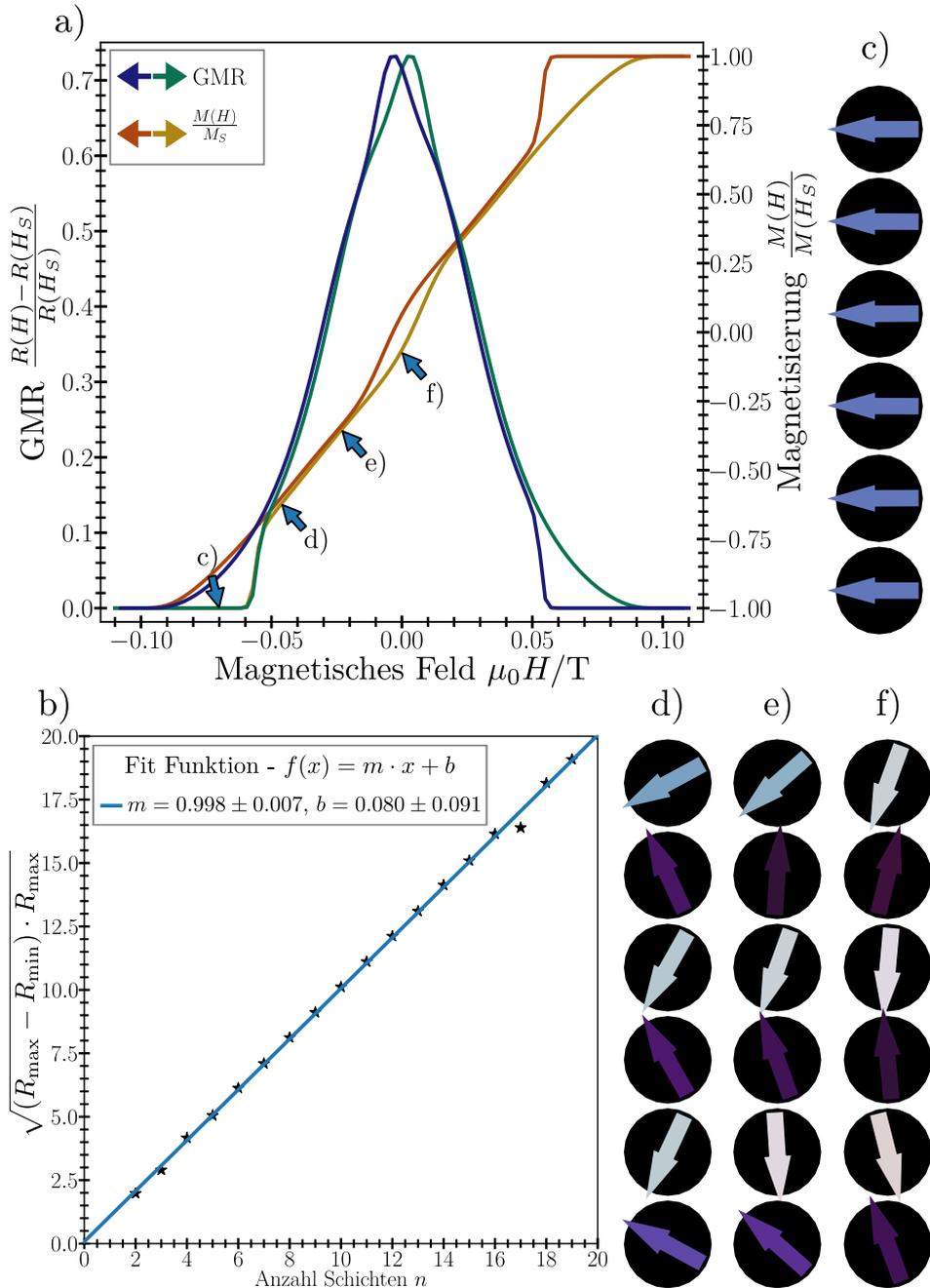
Nachdem die einzelnen Komponenten des Modells getestet wurden, sollen nun einige Systeme analysiert werden.

**Simulation eines Schichtsystems** Die erste Untersuchung findet an einer Kette aus Partikeln statt (siehe Abb. 3.15 (c)). In dieser haben die Partikel eine negative Austauschwechselwirkung  $J_{ex} = -0.001$  und besitzen eine Anisotropiekonstante von  $K = 10$  bei verschwindender Temperatur  $T = 10^{-11}$ . Die übrigen Simulationsparameter für CINO-LA entsprechen denen, die in Abbildung 3.11 verwendet wurden. Beim Durchlauf der Hysteresekurve, mit Feld parallel zur  $x$ -Achse, drehen sich die magnetischen Momente in der  $x$ - $y$ -Ebene, wie es auch bei einem Schichtsystem stattfindet. Es gibt einen komplett ausgerichteten Zustand in Abbildung 3.15 (c) und einen antiparallelen Zustand in Abbildung 3.15 (f).

In diesen beiden Punkten entspricht das zu lösende Widerstandnetzwerk exakt dem Zwei-Spin-Kanal-Widerstandsmodell (Kap. 3.1.2). Wird das Netzwerk korrekt gelöst, so muss bei einer Variation der Anzahl der Schichten die Formel (3.3) reproduziert werden. Die entsprechenden Simulationsergebnisse sind in Abbildung 3.15 (b) zu sehen. Entsprechend der Formel ist ein  $y$ -Achsenabschnitt  $b = 0$  zu erwarten, sowie eine Steigung von

$$m = \left( \frac{\rho_{\downarrow} - \rho_{\uparrow}}{4} t_F + \frac{r_{\downarrow} - r_{\uparrow}}{2} \right) = \left( \frac{8.521 - 0.1}{4} \cdot 0.475 + \frac{0 - 0}{2} \right) = 1. \quad (3.33)$$

Beide Werte stimmen gut mit den Simulationsdaten überein.



**Abbildung 3.15:** Simulation des GMR für ein Schichtsystem aus 6 Lagen. (a) Magnetisierungskurve und GMR gegen magnetisches Feld  $H$ . (b) Abhängigkeit  $\sqrt{(R_{\text{ap}} - R_p)} R_{\text{ap}}$  von der Schichtanzahl. (c-f) Orientierung der Magnetischen Momente für die in (a) markierten Stellen, wobei die Partikel / Ebenen in der  $x-z$ -Ebene und die Magnetisierungen in  $x-y$  dargestellt sind. Für die Widerstände wurden  $\rho_F^\uparrow = 0.1$ ,  $\rho_F^\downarrow = 8.521$  und  $t_f = 0.475$  gewählt.

**Tetragonale Partikelgitter** Eines der einfachsten Gitter ist das kubische oder allgemeiner tetragonale Gitter (siehe Abb. 3.16). Hier lassen sich die Abstände  $a$  der Partikel entlang der  $x$ -Achse und die Abstände  $b$  entlang der  $y$ -Achse variieren.

Eine einzelne Kette an magnetischen Partikeln richtet ihr gesamtes magnetisches Moment in eine Richtung entlang der Kette aus. Ist im tetragonalen Gitter der Abstand  $b \gg a$  so orientieren sich die magnetischen Momente parallel zur  $y$ -Achse, wie in Abbildung 3.16 (d) zu sehen. In diesem System ist der Widerstand abhängig von der Richtung des Stromflusses.

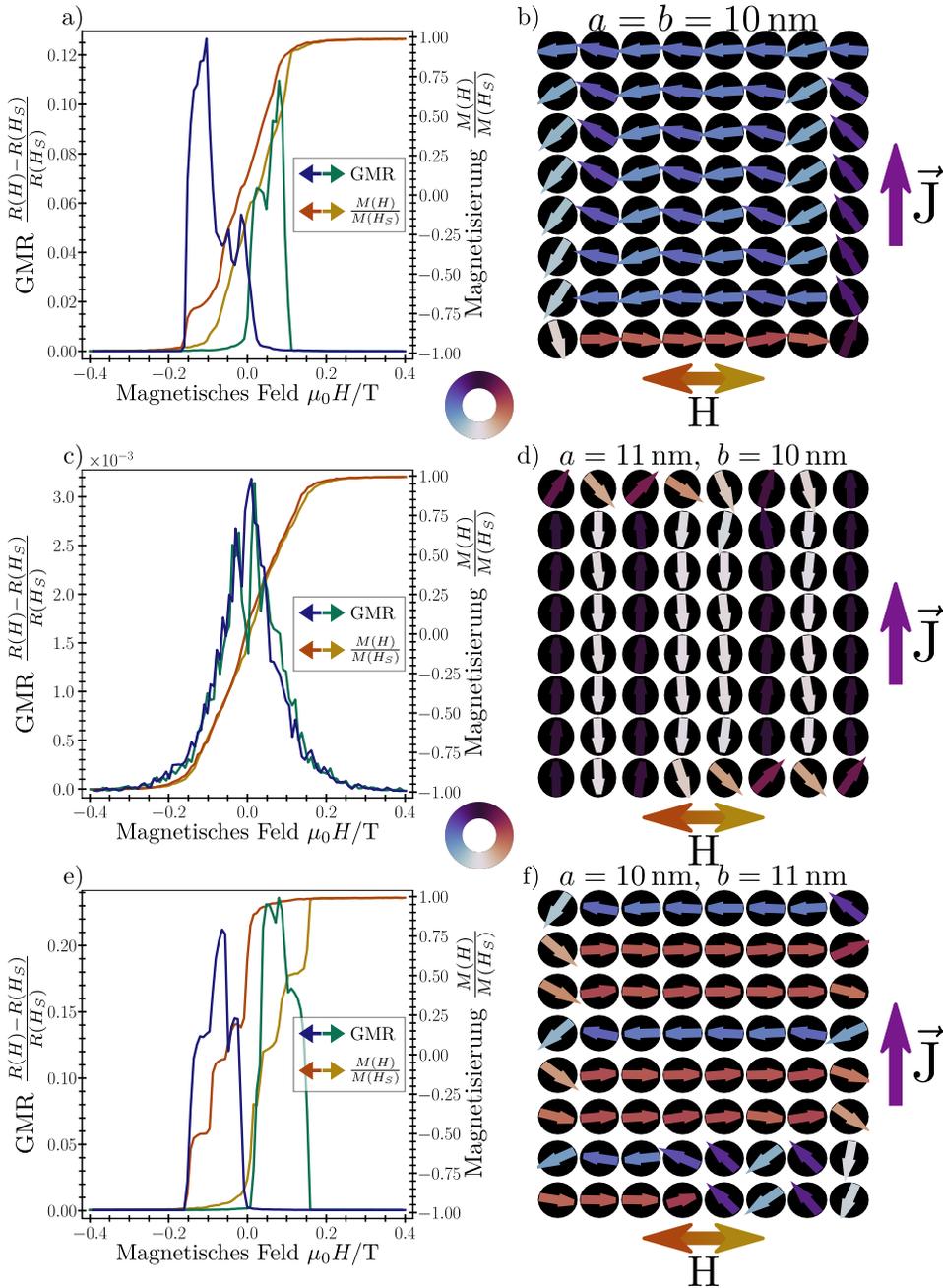
Im Fall aus Bildung 3.16 (c/d) fließt er entlang der  $y$ -Achse. In dieser Richtung gibt es keine ausgeprägten Übergänge zwischen den Partikeln. Entsprechend ist der *GMR* in dieser Konfiguration nur sehr schwach ausgeprägt.

Im umgekehrten Fall in Abbildung 3.16 (e/f) fallen in Stromrichtung mehrere Übergänge auf, an denen sich das magnetische Moment umkehrt. Daher ist hier der *GMR* Effekt um ein vielfaches größer, obwohl ein vergleichbares System mit denselben Parametern verwendet wurde.

Nähern sich die beiden Gitterparameter einander an, verschwindet die Vorzugsrichtung für die magnetischen Momente und es bildet sich ein komplett anderes, an einen Wirbel erinnerndes Muster aus (siehe Abb. 3.16 (a/b)). Dadurch geht auch die Anisotropie der Leitfähigkeit verloren und es lässt sich richtungsunabhängig ein *GMR* messen.

Das verwendete Modell berücksichtigt, im Gegensatz zu den erwähnten theoretischen Modellen (Kap. 3.1.3), den magnetischen Zustand des granularen Systems. Das ermöglicht die Untersuchung von unterschiedlichen Geometrien, wie tetragonalen, hexagonalen und freien Partikelanordnungen. Der Einfluss von Fehlstellen kann ebenso untersucht werden, wie der von Gitterverzerrungen und Partikelgrößenverteilungen.

Im Hinblick auf die Anwendung als Partikelsensor ist anzumerken, dass auch der Einfluss von magnetischen Partikeln untersucht werden kann, die nicht Teil des Sensors sind. Dafür muss das Partikel nur Teil der Makrospin-Dynamik Simulation sein und nicht des Widerstandnetzwerks.



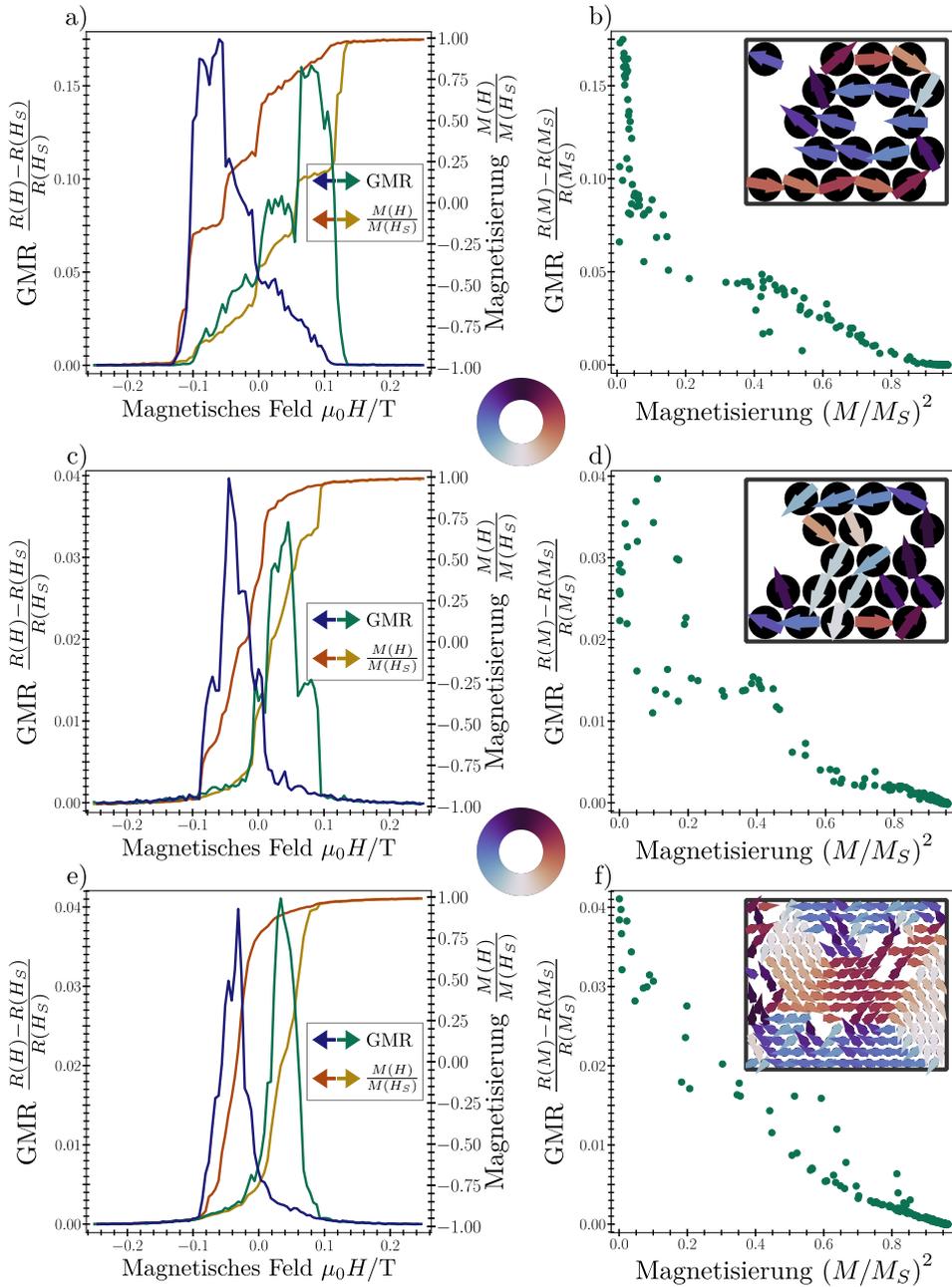
**Abbildung 3.16:** Simulation des Riesenmagnetowiderstand für ein tetragonales  $8 \times 8$  Gitter mit Gitterparametern  $a, b$ . (a), (c) und (e) Magnetisierungskurve und  $GMR$  als Funktion des magnetischen Feldes  $H$ . (b), (d) und (f) im Zustand des höchsten  $GMR$ s.

**Hexagonale Partikelgitter** Ein weiteres einfaches Gitter in der Ebene ist das hexagonale Gitter. Durch die Gittergeometrie bilden sich hierbei sehr prominente Wirbel aus, welche eine große Ausdehnung besitzen und dadurch zu geringen Änderungen zwischen angrenzenden magnetischen Momenten führen. Durch Fehlstellen können diese Wirbel gebrochen werden. Die Position einer Fehlstelle kann daher große Auswirkungen auf die Höhe des GMR-Effektes haben, was in Abbildung 3.17 (a/b) und (c/d) zu sehen ist. Die Verschiebung zweier Partikel lässt die GMR-Effektamplitude auf fast  $1/4$  sinken.

Für sehr kleine Partikelsysteme, wie in den beiden besprochenen, ist es daher sehr vorteilhaft die Partikel und Fehlstellen wohlüberlegt zu platzieren. Dadurch lässt das Magnetisierungsverhalten und damit auch der GMR beeinflussen.

Bei größeren Partikelsystemen, wie in Abbildung 3.17 (e/f) mit 210 Partikeln, bilden sich durch den Wirbel größere Bereiche mit fast ferromagnetischer Ausrichtung aus. Es zeigt sich hier zudem, wie sich die Magnetisierung um größeren und kleineren Fehlstellen legt. Eine gute Verteilung dieser kann daher den GMR-Effekt deutlich verbessern. Genauso kann eine ungünstige Anordnung jedoch den Effekt verschlechtern. Die ungünstigsten, untersuchten Systeme hatten große Domänen und einen auf knapp  $1/4$  reduzierten *GMR*.

Wird der *GMR* gegen die Magnetisierung (siehe Abb. 3.17) betrachtet fällt auf, dass unabhängig von der Systemgröße und dem magnetischen Zustand die Kurve immer unterhalb einer Geraden liegt. Dies wird in Kapitel 3.6.5 noch einmal aufgegriffen und genauer untersucht. Im Vergleich der hexagonalen Systeme unterschiedlicher Größe fällt auf, dass bei geringen Partikelzahlen die Krümmung des Verlaufs größer ist und die einzelnen Messpunkte stärker streuen. Die Streuung resultiert hauptsächlich aus der geringeren Partikelzahl, da sowohl die Magnetisierung als auch der Widerstand gemittelte Größe sind.



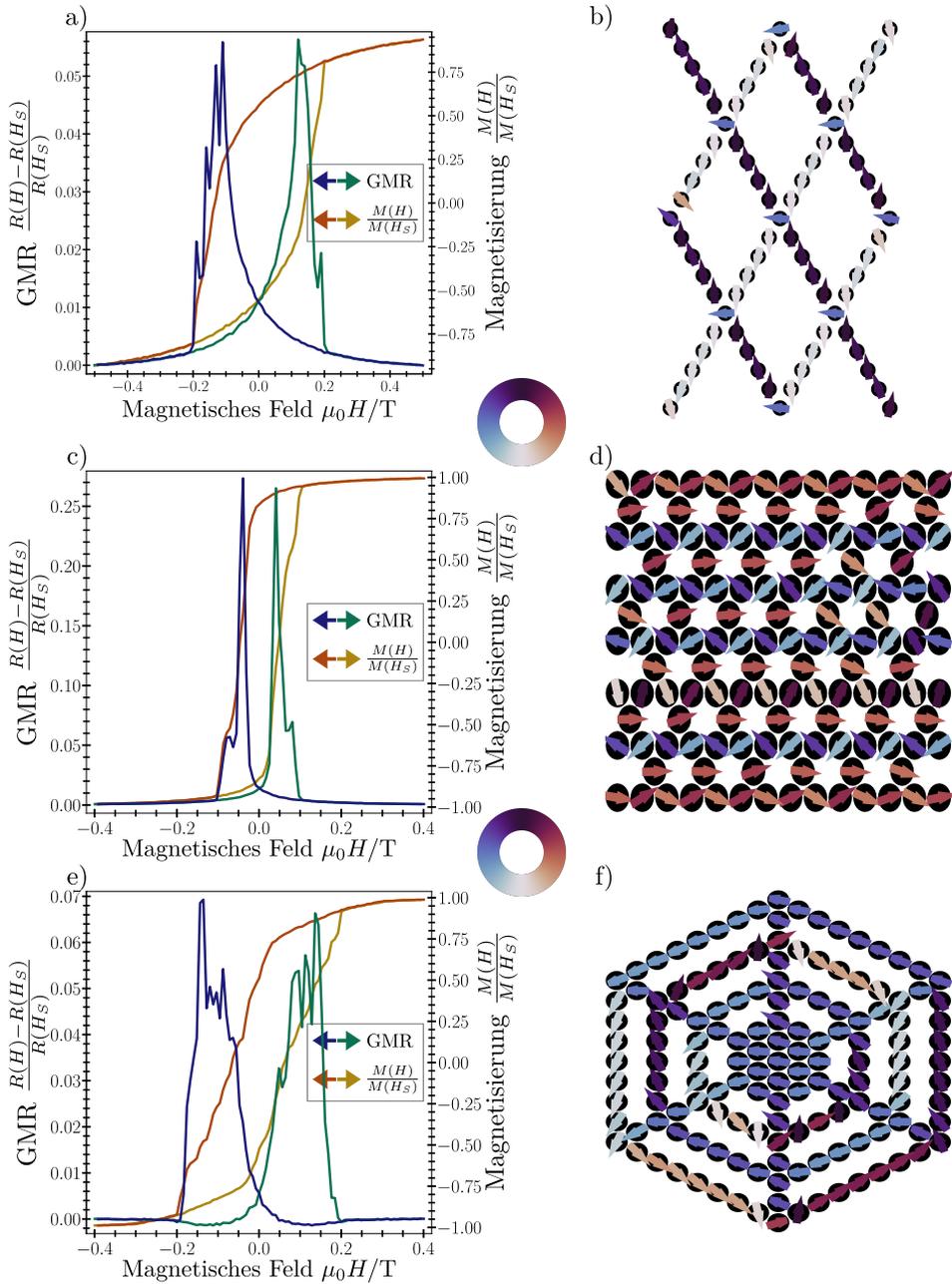
**Abbildung 3.17:** Simulation des Riesenmagnetowiderstand für ein hexagonales  $5 \times 5$  Gitter mit 5 Fehlstellen und einem Gitterparameter von  $a = 10$  nm. (a), (c) und (e) Magnetisierungskurve und  $GMR$  als Funktion des magnetischen Feldes  $H$ . (b), (d) und (f)  $GMR$  vs.  $(M/M_S)^2$ , mit der Ausrichtung der magnetischen Momente im Zustand des höchsten  $GMR$ s im Kasten. Der Gitterparameter beträgt  $a = 10$  nm

**Verschiedene Partikelstrukturen** Abgesehen von den einfachen Strukturen aus den vergangenen Abschnitten, lassen sich auch komplexere Systeme kreieren. Allgemein lässt sich jede dreidimensionale Struktur realisieren. Diese Arbeit beschränkt sich jedoch auf regelmäßige, ebene Systeme.

Die erste Struktur ist eine Anordnung von Partikeln in gekreuzten Reihen, (siehe Abb. 3.18 (a/b)). Hier fällt im Schaltverhalten die sehr glatte und langgezogene Flanke auf, die nach dem Maximum sehr schnell abfällt. Jede der Kettenabschnitte zwischen den Knotenpunkten verhält sich beim Schalten wie eine Einheit. Mit sinkendem Feld richten sich die einzelnen Kettensegmente langsam aus und schlagen dann bei steigendem Feld in die entgegengesetzte Richtung schlagartig um. Da die Kettenabschnitte ein einheitliches, magnetisches Moment aufweisen, fällt der GMR in diesem Fall recht gering aus.

Die zweite Struktur ist das Kagome Gitter in Abbildung 3.18 (c/d). Dessen Magnetisierungsverhalten wurde bereits in Kapitel 3.6.2 besprochen und in Abbildung 3.13 visualisiert. Da in hier in jeder Reihe die benachbarten magnetischen Momente stark gegeneinander verdreht sind, ist eine hohe GMR-Effektamplitude zu erwarten. Sie ist bei gleichen Parametern sogar höher als die des tetragonalen Gitters in Abbildung 3.16 (e/f). Damit ist sie eine vielversprechende Struktur für weitere Untersuchungen.

Die letzte hier vorgestellte Struktur (siehe Abb. 3.18 (e/f)) besteht aus ineinander verschachtelten Hexagons, deren Ecken durch Partikel verbunden sind, um einen Stromfluss zu ermöglichen. Auch hier verhalten sich die Kettensegmente, wie zuvor in Abbildung 3.18 (a/b) gesehen, wie eine Einheit. Dabei reagieren zuerst jene Segmente langsam auf das äußere Feld, die rechtwinklig zu diesem stehen. Anschließend springt der Rest schnell um und die rechtwinkligen Segmente folgen langsam nach. Der GMR Effekt ist hier wie auch zuvor bei den gekreuzten Ketten nicht sehr ausgeprägt, allerdings zeigt dieses Beispiel, wie unterschiedlich das Schaltverhalten durch die Anordnung der Partikel beeinflusst werden kann.



**Abbildung 3.18:** Simulation des *GMR* für verschiedene Partikelstrukturen mit einem Gitterparameter von  $a = 10$  nm. (a), (c) und (e) Magnetisierungskurve und *GMR* als Funktion des magnetischen Feldes  $H$ . (b), (d) und (f) zeigen die Struktur und die Ausrichtung der magnetischen Momente im Zustand des höchsten *GMRs*.

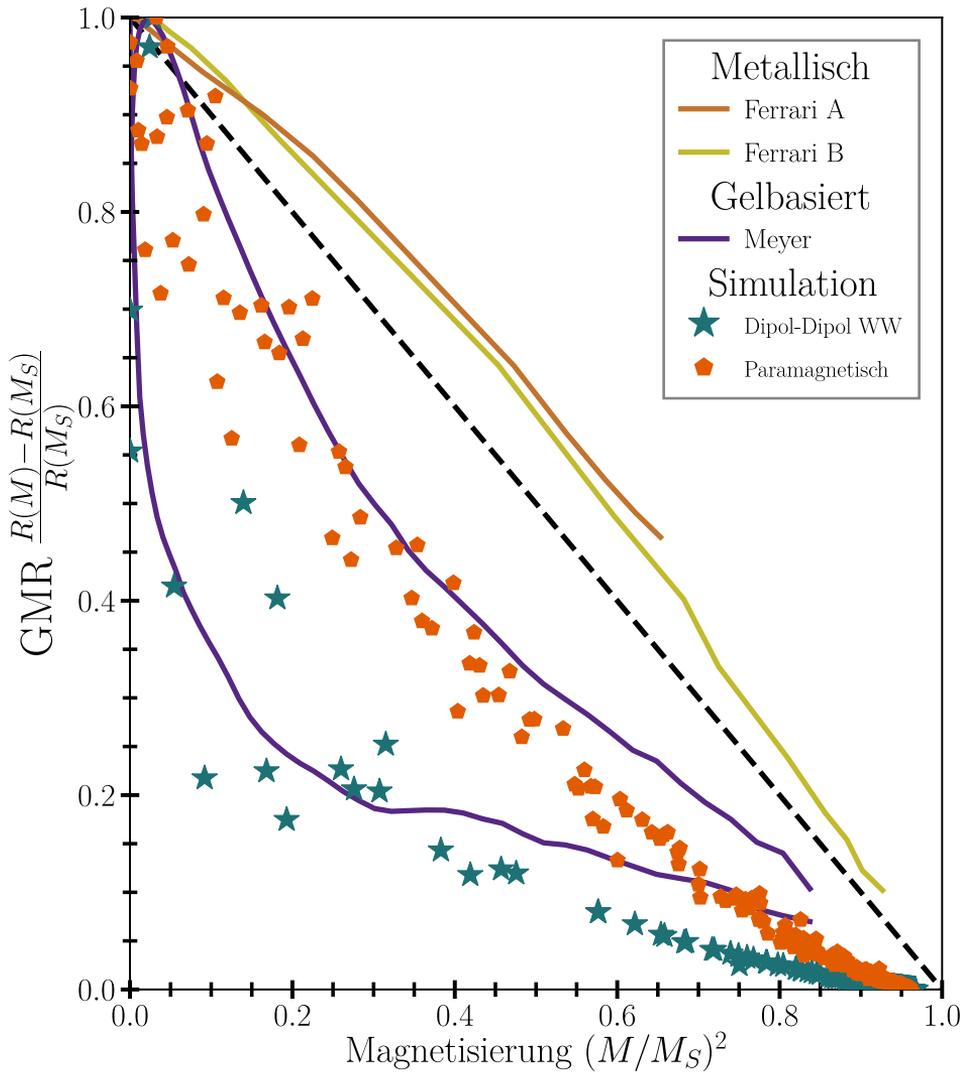
### 3.6.5 Untersuchung der Magnetisierungs–GMR Kurve

Im vorangegangenen Kapitel wurde bei den hexagonalen Gittern bereits die GMR Kurve in Abhängigkeit des Magnetisierungsquadrats  $(M/M_S)^2$  angesprochen. Da der GMR alleine durch die Änderung des magnetischen Moments von benachbarten Partikeln entsteht, ist diese Kurve ein Indikator dafür, ob der Ansatz des verwendeten Modells reale Prozesse abbilden kann.

Verglichen wurden dafür die Messungen von Ferrari u. a. (1997) an dem granularen metallischen System  $\text{Cu}_{90}\text{Co}_{10}$ . Die Proben A und B unterscheiden sich dabei nur in der Annealingtemperatur. Für die gelbasierten granularen Systeme wurden die Daten von Meyer u. a. (2013) verwendet. Das Matrixmaterial war auf Siliziumbasis mit einer Leitfähigkeit von  $0.2 \text{ S m}^{-1} - 1.2 \text{ S m}^{-1}$  und mit Kobalt Nanopartikeln versetzt. Das System wurde zu vier verschiedenen Zeitpunkten gemessen, um die Übersicht zu gewährleisten wurde in Abbildung 3.19 der Mittelwert aller vier Kurven verwendet. In der Veröffentlichung wurde die Probe nicht komplett gesättigt magnetisiert, in der zugehörigen Dissertation (Meyer 2013) findet sich jedoch die komplette Hysteresekurve, womit die Daten korrekt normiert wurden. Die vergleichende Simulation wurden bereits im vorangegangenen Kapitel besprochen, zusätzlich wurde dasselbe System ohne Dipol-Dipol Wechselwirkung durchgerechnet.

Die metallischen, granularen Systeme haben einen leicht ausgeprägten konkaven Verlauf. Die Systeme auf Gelbasis haben, ebenso wie die Simulationen, einen konvexen Verlauf. Eine starke Dipol-Dipol Wechselwirkung verstärkt die Krümmung, ein rein paramagnetisches System zeigt zwar ebenfalls die Krümmung, diese ist jedoch schwächer ausgeprägt. Dieser Effekt wurde bereits von Altbir u. a. (1996) für die metallischen, granularen Systeme berichtet und untersucht.

Metall- und Gelbasis unterscheiden sich in dieser Darstellung deutlich durch ihre Krümmung. Eine mögliche Erklärung ist, dass die metallischen Systeme sich eher wie *CIP* und die Gelsysteme wie *CPP* Schichten verhalten. Vergleichende Experimente könnten hier Klarheit schaffen.



**Abbildung 3.19:** Vergleich der GMR Kurven als Funktion der quadratischen Magnetisierung. Die metallische Matrizen stammen aus der Veröffentlichung von Ferrari u. a. (1997) Abbildungen 5 (b) und 6(b). Die gelbasierte Matrizen stammen aus der Veröffentlichung von Meyer u. a. (2013) Abbildung 2, hier wird jedoch eine Mittlung aus allen Messreihen verwendet. Die Simulationsdaten stammen aus der Abbildungen 3.18 (c/d) die paramagnetische Simulation verwendet dieselben Parameter, jedoch ohne Dipol-Dipol Wechselwirkung.

### 3.7 Zusammenfassung, Diskussion und Ausblick

Es wurde gezeigt, dass der granulare GMR in Systemen mit geringer Matrixleitfähigkeit durch ein an den CPP Schicht-GMR angelehntes Widerstandsnetzwerk beschrieben werden kann. Dabei wurde gezeigt, dass die Elektronen in diesen granularen Systemen sich auf kleinen Pfaden von Partikel zu Partikel bewegen. Diese Pfade und ihre Richtung wurden daraufhin mit einem Wegfindungsalgorithmus evaluiert und ein Widerstandsnetzwerk erzeugt. In dieses Netzwerk fließen nicht nur Partikelpositionen, sondern auch deren magnetische Momente ein. Dadurch kann das Modell Effekte wie Domänenbildung und ähnliches berücksichtigen. Wo bisher in der Theorie nur das gemittelte magnetische Moment eines granularen Systems von Bedeutung war, können jetzt magnetische Zustände mit gleichem, gemitteltem magnetischen Moment unterschiedliche Effekthöhen und -verläufe zeigen.

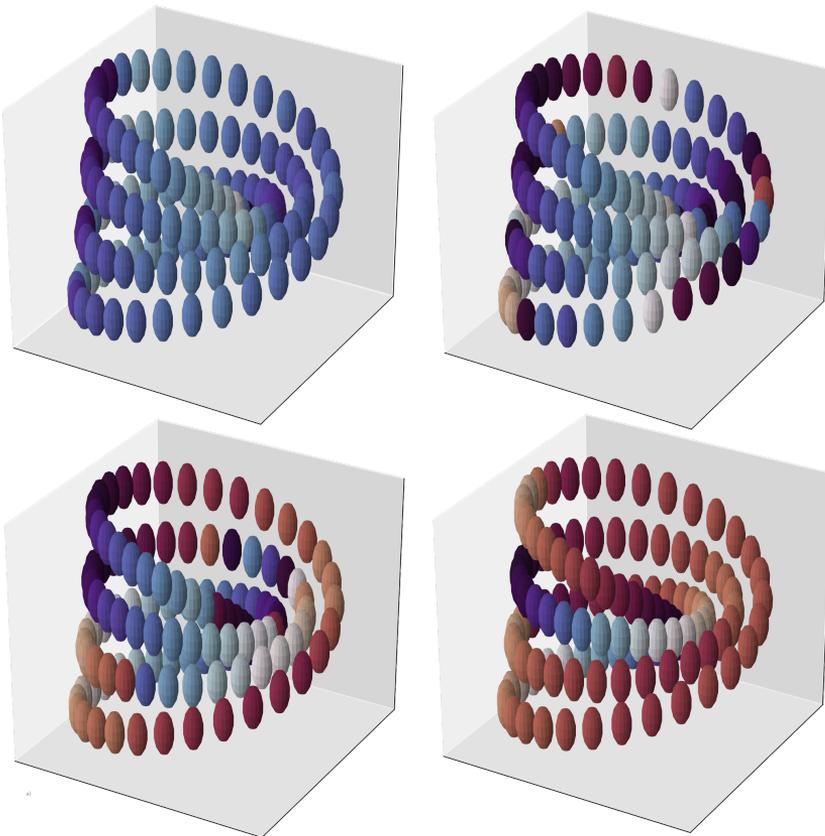
Zuletzt wurde die Simulation mit experimentellen Daten sowohl für metallische wie auch gelbasierte granulare Systeme verglichen. Dabei zeigte sich ein deutlicher Unterschied der beiden experimentellen Aufbauten. Qualitativ liegen die mit dem Modell berechneten Verläufe in guter Übereinstimmung mit dem Experiment von Meyer u. a. (2013).

**Ausblick** Das vorgestellte Modell und das Simulationstool bieten eine große Zahl an neuen Möglichkeiten, den *GMR* in granularen Systemen mit geringer Matrixleitfähigkeit zu untersuchen. Folgende weiterführende Schritte bieten sich an:

- In Verbindung mit Experimenten können die Simulationsparameter, wie die Leitfähigkeiten bestimmt werden. Dadurch wird es möglich, die theoretischen Vorhersagen des Modells quantitativ mit Experimenten zu vergleichen und im Erfolgsfall neue Anordnungen mit maßgeschneiderten Eigenschaften zu kreieren.
- Die Einführung von nicht-kugelförmigen Partikeln. Hier sind besonders solche mit höher Formanisotropie interessant, etwa Stäbchen, deren magnetisches Moment nur entlang ihrer Rotationsachse orientiert werden kann. Damit wird der magnetische Zustand des Systems voraussichtlich stärker beeinflusst werden als durch die Anordnung der Partikel allein.
- Die Untersuchung von Größenverteilungen. Die nötige Funktio-

nalität ist bereits implementiert, wurde jedoch noch nicht näher untersucht. Auch hier können spannende Einflüsse auf den magnetischen Zustand entstehen.

- Eine Erweiterung auf dreidimensionale Strukturen ist ebenfalls möglich. Die Simulation kann bereits jetzt mit solchen Anordnungen umgehen, wie etwa dem Möbiusband in Abbildung 3.20. Für die Anwendung wäre hier besonders interessant zu untersuchen, wie ein zweidimensionaler Sensor aus Partikeln auf ein magnetisches Partikel auf dessen Oberfläche reagiert. Mit diesen Ergebnissen könnten effektive Designs für neue Sensoren untersucht werden.



**Abbildung 3.20:** Magnetischer Zustand eines Möbiusbands aus magnetischen Nanopartikeln.

## 4 Fazit

Das Ziel der präsentierten Arbeit ist die Simulation der Mikrostruktur nanopartikulärer Systeme unter dem Einfluss magnetischer Felder. Die in diesem Rahmen entwickelten Softwarepakete ermöglichen es, experimentell realisierbare Systeme hinsichtlich verwendeter Materialien und ihrer Geometrien zu optimieren. Damit können zum einen komplexe Aufbauten getestet werden, bevor sie umgesetzt werden. Zum anderen können durch Parameterstudien und Optimierungsverfahren gewünschte Eigenschaften verstärkt und unerwünschte unterdrückt werden.

Die Erkenntnisse der Arbeit, welche aus den einzelnen Paketen entstanden sind, werden im Folgenden kurz zusammengefasst.

**Die Simulation magnetischer Ratschen mit *ParDy*** ermöglicht die theoretische Untersuchung von Partikeln in Flüssigkeiten, welche einem äußeren zeit- und ortsabhängigen Kraftfeld unterliegen. Ein besonderer Augenmerk lag hier auf der Abbildung der magnetischen On-Off Ratsche. Dafür wurden neben der Partikeldynamik auch die Berechnung von magnetischen Feldern aus Leiterbahnen und magnetischen Schichten implementiert.

Die korrekte Funktionsweise des Programms wurde an einfachen, analytisch lösbaren Prozessen überprüft. Sowohl die Diffusion, wie auch die Einwirkung eines Kraftfeldes wird von dem Modell zuverlässig umgesetzt. Ein weiteres Testszenario war die gekippte, pulsierende Temperaturratsche. Hier konnten wichtige Merkmale, wie etwa die Umkehr des Partikelstroms, reproduziert werden. Qualitativ sind die Ergebnisse der Simulation in Übereinstimmung mit den in der Literatur zu findenden Berechnungen.

Anschließend wurde die magnetische On-Off Ratsche näher untersucht. Es wurde der Einfluss der Partikelgröße auf den Transport in dieser Ratsche betrachtet. Dabei zeigt sich ein deutliches Maximum, dessen Flanken jeweils durch eine einfache logarithmische Funktion angenähert werden können. Somit können für eine bestimmte Ratsche Bereiche in der Partikelgrößenverteilung festgelegt werden, die hohe gerichtete Transportraten besitzen und solche in denen kein oder nur diffusiver Transport stattfinden.

In einer weiteren größeren Studie wurden die Schaltzeiten  $\tau_m$  und

$\tau_d$  untersucht. Dabei zeigt sich ein klarer Korridor, in dem eine hohe Transportrate erreicht wird, mit einem schwach ausgeprägten Maximum. Eine Auswertung der mittleren Diffusionskonstante ergibt ein ähnliches Bild, der Korridor nimmt jedoch einen leicht anderen Verlauf. Dies lässt darauf schließen, dass sich hohe Transportraten teilweise von hoher Diffusivität trennen lassen.

**Die Simulation granularer GMR Systeme mit GranMR** erlaubt die Berechnung des GMR eines granularen Partikelsystems. Im Gegensatz zu den bisher verwendeten Modellen werden dabei jedoch die magnetischen Momente der einzelnen Nanopartikel einbezogen. Erreicht wird dies über eine Schnittstelle zu dem Programm *CINOLA* von Schröder (2000), welches die Momente im Durchlauf einer kompletten Hystereseschleife berechnet. Ein Wegfindungsalgorithmus wird anschließend verwendet, um aus den Eingaben ein Widerstandsnetzwerk aufzustellen. Aus der mehrfachen Lösung dieses Netzwerkes für jede magnetische Konfiguration ergibt sich letztendlich die Widerstandskurve des Systems.

Vor den Untersuchungen dieses Widerstandsmodells wurde dessen Verwendung mithilfe einer Finite-Elemente Simulation motiviert. Dabei zeigt sich der ausgeprägte Netzwerkcharakter in den granularen Systemen. Es folgten die Ergebnisse aus *CINOLA* Simulationen, welche die zeitliche Entwicklung der magnetischen Momente für drei kleine, ausgewählte Systeme zeigen. Dabei wird deutlich, dass für tetragonale Gitter ein stark richtungsabhängiger Widerstand zu erwarten ist. Die üblichen Modelle für granularen GMR können diesen Umstand jedoch nicht abbilden. Die Auswertung der Vernetzung durch den Wegfindungsalgorithmus zeigt daraufhin Limitationen auf, da hochsymmetrische Systeme nicht eindeutig, gerichtet vernetzbar sind.

Nach den Betrachtungen einzelner Aspekte wurde das Modell an schichtähnlichen Systemen getestet. Dieses liefert qualitative und quantitativ übereinstimmende Ergebnisse zu früheren theoretischen und experimentellen Beobachtungen, was die Gültigkeit des Modells und Korrektheit des Lösers für einfache Systeme zeigt.

Daraufhin wurden verschiedene Gitter und Anordnungen auf ihre Effektgrößen und Leitungseigenschaften untersucht. Dabei zeigt sich die erwartete Abhängigkeit des Widerstands vom magnetischem Zustand des untersuchten Systems. Zudem konnte für das bereits er-

wähnte tetragonale System eine starke Richtungsabhängigkeit gezeigt werden. Abschließend wurden die Ergebnisse der Simulation mit verschiedenen experimentellen Systemen verglichen. Zum einen gibt es hier eine qualitative Übereinstimmung mit dem Experiment, zum anderen fällt ein klares Unterscheidungskriterium zwischen metallischen und gelbasierten *GMR* Systemen auf.

## 4.1 Ausblick

Die hier vorgestellten Programme bieten eine Reihe an Anknüpfungspunkten für künftige Forschung. Die bisherigen Ergebnisse zeigen bereits ein spannendes Bild an neuen Möglichkeiten.

Im Bereich der Ratsche bietet sich die Erweiterung auf neue Ratschenkonzepte an, ein interessanter Kandidat hierfür ist die bidirektional sortierende Ratsche von Martinez-Pedrero u. a. (2016). Des Weiteren ist die Verknüpfung des Programmes mit einer Parameteroptimierung erstrebenswert. Dadurch wäre die gezielte Anpassung der Eigenschaften von Ratschen an ihren jeweiligen Einsatzzweck möglich. Rein technisch ist letztlich eine Verkürzung der Programmlaufzeit wünschenswert. Dabei sind sowohl die Berechnung der Kraftfelder, als auch der Iterationsprozess, von Interesse.

Bei den Simulationen der granularen *GMR* Systeme bietet sich die Einführung unterschiedlicher Partikelarten an, etwa zylindrischer Partikel oder Mischungen verschiedener Größen. Dadurch lassen sich magnetische Zustände des Systems gezielt manipulieren und damit auch das elektrische Verhalten. Da sich das wichtigste Anwendungsfeld des *GMR* in der Sensorik befindet, ist die Erforschung von Sensorantworten auf magnetische Streufelder, mit dem vorgestellten Modell, ein lohnendes Unterfangen. Zuletzt lassen sich auch dreidimensionale Strukturen untersuchen, die gänzlich neue Schaltzustände erlauben.

## Danksagung

Hier soll nun jenen gedankt werden, die diese Arbeit ermöglicht haben.

Zuerst möchte ich *Andreas Hütten* danken, dass er als Betreuer dies alles ermöglicht hat. Schon früh im Studium gab er mir die Möglichkeit mich mit dem Experiment nahen Simulationen zu beschäftigen. Vielen Dank für die Unterstützung, Betreuung und den Zuspruch.

Mein Dank gilt *Christian Schröder*, der ebenso diese Promotion unterstützt und begleitet hat. Die fast regelmäßigen Arbeitsgruppentreffen haben direkt und indirekt den Erfolg der Arbeit ermöglicht. Vielen Dank für die Diskussionen, Ideen und Unterstützung.

Allen aktuellen und ehemaligen Kollegen von D2 gebührt Dank für schöne Zeiten im Kafferaum, auf den Konferenzen, bei Treffen im Brauhaus, beim Arbeitsgruppengrillen und auf den Weihnachtsfeiern. Insbesondere danke an alle Bürokollegen *Andreas „Manni“ Becker*, *Fabian Schmidt-Michels*, *Thomas Rempel*, *Bernhard Eickenberg*, *Annalena Wolff* und *Dieter Akemeier* danken. Außerdem vielen Dank an *Lars Helmich* für zwei legendäre COMSOL Konferenzen.

Die Arbeitsgruppe *CMSE* von der Fachhochschule Bielefeld darf ebenfalls nicht fehlen. Wie bereits erwähnt waren die Treffen ein schöner Rahmen für den Austausch, sowohl für die Arbeit als auch darüber hinaus. Zudem wäre diese Arbeit ohne die Berechnungen auf dem Cluster der Arbeitsgruppe bis heute sicher nicht vollendet.

Ein herzlicher Dank geht an viele aktuelle und ehemalige Mitglieder der *English Drama Group* die mich herzlich aufgenommen und in die Welt des Theaters entführt haben.

Für sprachliche, grammatikalische und inhaltliche Anmerkungen zur Arbeit danke ich *Björn Bükler*, *Fabian Schmidt-Michels*, *Lennart Schwan*, *Sandra Rott*, *Simon Bekemeier* und *Thomas Rempel*.

Besonders möchte ich meiner Familie danken. Meinen Eltern *Petra* und *Frank Kappe*, meiner Schwester *Svenja Vennemeier*, meinem Schwager *David Vennemeier*, meinen Großeltern *Günther* und *Marlene Kappe*, meiner Großmutter *Elisabeth Wegener* und meinem lieben verstorbenen Großvater *Josef Wegener*. Vielen Dank für eure Liebe, Unterstützung, Nachsicht und Verständnis.

Zuletzt möchte ich meiner Freundin *Sandra Rott* danken, die mich fast die gesamte Promotionszeit begleitet hat, zuerst als Gefährtin auf der Bühne und später im Leben. Vielen Dank für Liebe, Geduld, Verständnis, Ablenkung, Zuspruch und so vieles mehr.

## Literatur

### Allen u. Tildesley 2001

ALLEN, M. P. ; TILDESLEY, D. J.: *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, 2001

### Altbir u. a. 1996

ALTBIR, D ; CASTRO, J d. ; VARGAS, P: Magnetic coupling in metallic granular systems. In: *Physical Review B* 54 (1996), Nr. 10, S. R6823

### Andersen u. Oppenheim 1963

ANDERSEN, Hans C. ; OPPENHEIM, Irwin: Modified Langevin Equation for the Description of Brownian Motion. In: *Journal of Mathematical Physics* 4 (1963), Nr. 11, S. 1367–1372

### Auge u. a. 2009

AUGE, A. ; WEDDEMANN, A. ; WITTBRAUCHT, F. ; HÜTTEN, A.: Magnetic ratchet for biotechnological applications. In: *Applied Physics Letters* 94 (2009), Nr. 18, S. 183507

### Auge 2008

AUGE, Alexander: *Magnetic Ratchet*, Universität Bielefeld, Masterarbeit, Oktober 2008

### Baibich u. a. 1988

BAIBICH, M. N. ; BROTO, J. M. ; FERT, A. ; VAN DAU, F. N. ; PETROFF, F. ; ETIENNE, P. ; CREUZET, G. ; FRIEDERICH, A. ; CHAZELAS, J.: Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices. In: *Phys. Rev. Lett.* 61 (1988), Nov, 2472–2475. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2472>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.61.2472

### Bellman 1952

BELLMAN, Richard: On the theory of dynamic programming. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 38 (1952), Nr. 8, S. 716

### Berkowitz u. a. 1992

BERKOWITZ, A. E. ; MITCHELL, J. R. ; CAREY, M. J. ; YOUNG,

A. P. ; ZHANG, S. ; SPADA, F. E. ; PARKER, F. T. ; HUTTEN, A. ; THOMAS, G.: Giant magnetoresistance in heterogeneous Cu-Co alloys. In: *Phys. Rev. Lett.* 68 (1992), Jun, 3745–3748. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.68.3745>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.68.3745

**Binasch u. a. 1989**

BINASCH, G. ; GRÜNBERG, P. ; SAURENBACH, F. ; ZINN, W.: Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. In: *Phys. Rev. B* 39 (1989), Mar, 4828–4830. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.39.4828>. – DOI 10.1103/PhysRevB.39.4828

**Brandt u. Dahmen 2005**

BRANDT, Siegmund ; DAHMEN, Hans D.: *Elektrodynamik*. Vierte, völlig neubearbeitete Auflage. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005 (Springer-Lehrbuch). <http://dx.doi.org/10.1007/b138039>Internat:Resolving-System. – ISBN 978-3-540-26766-9

**Camblong u. a. 1993**

CAMBLONG, Horacio E. ; ZHANG, Shufeng ; LEVY, Peter M.: Magnetoresistance of multilayered structures for currents perpendicular to the plane of the layers. In: *Physical review B* 47 (1993), Nr. 8, S. 4735

**Camley u. Barnaś 1989**

CAMLEY, Robert E. ; BARNAS, J.: Theory of giant magnetoresistance effects in magnetic layered structures with antiferromagnetic coupling. In: *Physical review letters* 63 (1989), Nr. 6, S. 664

**Chandrasekhar 1943**

CHANDRASEKHAR, S.: Stochastic Problems in Physics and Astronomy. In: *Rev. Mod. Phys.* 15 (1943), Jan, 1–89. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.15.1>. – DOI 10.1103/RevModPhys.15.1

**Dupuis u. a. 1997**

DUPUIS, V. ; TUAILLON, J. ; PREVEL, B. ; PEREZ, A. ; MELINON, P. ; GUIRAUD, G. ; PARENT, F. ; STEREN, L. B. ; MOREL,

R. ; BARTHELEMY, A. ; FERT, A. ; MANGIN, S. ; THOMAS, L. ; WERNSDORFER, W. ; BARBARA, B.: From the superparamagnetic to the magnetically ordered state in systems of transition metal clusters embedded in matrices. In: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 165 (1997), Nr. 1, 42 - 45. [http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(96\)00469-6](http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/S0304-8853(96)00469-6). – DOI [https://doi.org/10.1016/S0304-8853\(96\)00469-6](https://doi.org/10.1016/S0304-8853(96)00469-6). – ISSN 0304-8853. – Symposium E: Magnetic Ultrathin Films, Multilayers and Surfaces

### **Eickenberg u. a. 2013**

EICKENBERG, Bernhard ; MEYER, Judith ; HELMICH, Lars ; KAPPE, Daniel ; AUGÉ, Alexander ; WEDDEMANN, Alexander ; WITTBRAUCHT, Frank ; HÜTTEN, Andreas: Lab-on-a-chip magneto-immunoassays: how to ensure contact between superparamagnetic beads and the sensor surface. In: *Biosensors* 3 (2013), Nr. 3, S. 327–340

### **Einstein 1905**

EINSTEIN, A.: Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. In: *Annalen der Physik* 322 (1905), Nr. 8, 549-560. <http://dx.doi.org/10.1002/andp.19053220806>. – DOI 10.1002/andp.19053220806

### **Engelhardt u. Schröder 2011**

ENGELHARDT, Larry ; SCHRÖDER, Christian: Simulating Computationally Complex Magnetic Molecules. In: RICHARD, Winpenny (Hrsg.): *Molecular Cluster Magnets*. World Scientific, 2011, Kapitel 6, S. 241–296

### **Ennen u. a. 2016**

ENNEN, Inga ; KAPPE, Daniel ; REMPEL, Thomas ; GLENSKE, Claudia ; HÜTTEN, Andreas: Giant Magnetoresistance: Basic Concepts, Microstructure, Magnetic Interactions and Applications. In: *Sensors* 16 (2016), Nr. 6. <http://dx.doi.org/10.3390/s16060904>. – DOI 10.3390/s16060904. – ISSN 1424-8220

### **Ferrari u. a. 1997**

FERRARI, EF ; DA SILVA, FCS ; KNOBEL, M: Influence of the distribution of magnetic moments on the magnetization and magne-

toresistance in granular alloys. In: *Physical Review B* 56 (1997), Nr. 10, S. 6086

**Fert u. a. 1995**

FERT, Albert ; DUVAIL, Jean-Luc ; VALET, Thierry: Spin relaxation effects in the perpendicular magnetoresistance of magnetic multilayers. In: *Physical Review B* 52 (1995), Nr. 9, S. 6513

**Feynman u. a. 2011**

FEYNMAN, Richard P. ; LEIGHTON, Robert B. ; SANDS, Matthew: *The Feynman lectures on physics, Vol. I: The new millennium edition: mainly mechanics, radiation, and heat*. Bd. 1. Basic books, 2011

**Fredkin u. Koehler 1990**

FREDKIN, D. R. ; KOEHLER, T. R.: Hybrid method for computing demagnetizing fields. In: *IEEE Transactions on Magnetics* 26 (1990), Nr. 2, S. 415–417

**Frenkel u. Smit 2001**

FRENKEL, Daan ; SMIT, Berend: *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. Bd. 1. Elsevier, 2001

**Gilbert 2004**

GILBERT, Thomas L.: A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials. In: *IEEE transactions on magnetics* 40 (2004), Nr. 6, S. 3443–3449

**Gräßer 2017**

GRÄSSER, Andreas: *Analyse linearer und nichtlinearer elektrischer Schaltungen: Ein Kompendium*. Springer-Verlag, 2017

**Jackson 2006**

JACKSON, John D.: *Klassische Elektrodynamik*. 4th Edition. Walter de Gruyter, 2006

**Johnson u. Camley 1991**

JOHNSON, B. L. ; CAMLEY, R. E.: Theory of giant magnetoresistance effects in Fe/Cr multilayers: Spin-dependent scattering from impurities. In: *Physical Review B* 44 (1991), Nr. 18, S. 9997

### **Kappe 2019a**

KAPPE, Daniel: *GranMR Dokumentation*. Mai 2019. – Anfrage an Daniel Kappe, Christian Schröder oder Andreas Hütten

### **Kappe 2019b**

KAPPE, Daniel: *ParDy Dokumentation*. Mai 2019. – Anfrage an Daniel Kappe, Christian Schröder oder Andreas Hütten

### **Krumke u. Noltemeier 2009**

KRUMKE, Sven O. ; NOLTEMEIER, Hartmut: *Graphentheoretische Konzepte und Algorithmen*. Springer-Verlag, 2009

### **Landau u. Lifshitz 1992**

LANDAU, L. ; LIFSHITZ, E.: On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. In: PITAEVSKI, L.P. (Hrsg.): *Perspectives in Theoretical Physics*. Amsterdam : Pergamon, 1992, S. 51 – 65. – Nachdruck von Phys. Z. SU. 8, Part 2, 153, 1935.

### **Mahmoudi u. a. 2018**

MAHMOUDI, Keon ; BOURAS, Alexandros ; BOZEC, Dominique ; IVKOV, Robert ; HADJIPANAYIS, Constantinos: Magnetic hyperthermia therapy for the treatment of glioblastoma: a review of the therapy's history, efficacy and application in humans. In: *International Journal of Hyperthermia* 34 (2018), Nr. 8, 1316-1328. <http://dx.doi.org/10.1080/02656736.2018.1430867>. – DOI 10.1080/02656736.2018.1430867. – PMID: 29353516

### **Martinez-Pedrero u. a. 2016**

MARTINEZ-PEDRERO, Fernando ; MASSANA-CID, Helena ; ZIEGLER, Till ; JOHANSEN, Tom H. ; STRAUBE, Arthur V. ; TIerno, Pietro: Bidirectional particle transport and size selective sorting of Brownian particles in a flashing spatially periodic energy landscape. In: *Physical Chemistry Chemical Physics* 18 (2016), Nr. 38, S. 26353–26357

### **Meyer 2013**

MEYER, Judith: *Giant magnetoresistance effects in granular systems with gel matrices*, Universität Bielefeld, Diss., 2013

**Meyer u. a. 2013**

MEYER, Judith ; REMPEL, Thomas ; SCHÄFERS, Markus ; WITTBRACHT, Frank ; MÜLLER, Christiane ; PATEL, AV ; HÜTTEN, Andreas: Giant magnetoresistance effects in gel-like matrices. In: *Smart Materials and Structures* 22 (2013), Nr. 2, S. 025032

**Pratt 2014**

PRATT, Andrew: Environmental applications of magnetic nanoparticles. In: *Frontiers of Nanoscience* Bd. 6. Elsevier, 2014, S. 259–307

**Rader 2011**

RADER, Charles M.: Connected components and minimum paths. In: *Graph Algorithms in the Language of Linear Algebra*. SIAM, 2011, S. 19–27

**Reimann 2002**

REIMANN, Peter: Brownian motors: noisy transport far from equilibrium. In: *Physics Reports* 361 (2002), Nr. 2, 57 - 265. [http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(01\)00081-3](http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/S0370-1573(01)00081-3). – DOI [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(01\)00081-3](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(01)00081-3). – ISSN 0370–1573

**Reyes u. a. 2002**

REYES, Darwin R. ; IOSSIFIDIS, Dimitri ; AUROUX, Pierre-Alain ; MANZ, Andreas: Micro total analysis systems. 1. Introduction, theory, and technology. In: *Analytical chemistry* 74 (2002), Nr. 12, S. 2623–2636

**Risken 1996**

RISKEN, Hannes: *The Fokker-Planck Equation*. 2nd Edition. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996

**Rubinstein 1994**

RUBINSTEIN, Mark: Classical theory of giant magnetoresistance in granular metals. In: *Physical Review B* 50 (1994), Nr. 6, S. 3830

**Schröder 2000**

SCHRÖDER, Christian: *Numerische Simulationen zur Thermodynamik magnetischer Strukturen mittels deterministischer und stochastischer Wärmebadankopplung*, Universität Osnabrück, Diss.,

September 2000. <https://repositorium.ub.uni-osnabrueck.de/handle/urn:nbn:de:gbv:700-2000091555>

**Shin u. a. 2015**

SHIN, Tae-Hyun ; CHOI, Youngseon ; KIM, Soojin ; CHEON, Jinwoo: Recent advances in magnetic nanoparticle-based multimodal imaging. In: *Chemical Society Reviews* 44 (2015), Nr. 14, S. 4501–4516

**Tsymbal u. Zutic 2011**

TSYMBAL, Evgeny Y. ; ZUTIC, Igor: *Handbook of spin transport and magnetism*. CRC press, 2011

**Ulbrich u. a. 2016**

ULBRICH, Karel ; HOLA, Katerina ; SUBR, Vladimir ; BAKANDRITSOS, Aristides ; TUCEK, Jiri ; ZBORIL, Radek: Targeted drug delivery with polymers and magnetic nanoparticles: covalent and noncovalent approaches, release control, and clinical studies. In: *Chemical reviews* 116 (2016), Nr. 9, S. 5338–5431

**Ustinov u. Kravtsov 1995**

USTINOV, V. V. ; KRAVTSOV, E. A.: A unified semiclassical theory of parallel and perpendicular giant magnetoresistance in metallic superlattices. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 7 (1995), may, Nr. 18, 3471–3484. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/7/18/011>. – DOI 10.1088/0953-8984/7/18/011

**Vale u. Milligan 2000**

VALE, Ronald D. ; MILLIGAN, Ronald A.: The Way Things Move: Looking Under the Hood of Molecular Motor Proteins. In: *Science* 288 (2000), Nr. 5463, 88–95. <http://dx.doi.org/10.1126/science.288.5463.88>. – DOI 10.1126/science.288.5463.88. – ISSN 0036–8075

**Valet u. Fert 1993**

VALET, T ; FERT, A: Theory of the perpendicular magnetoresistance in magnetic multilayers. In: *Physical Review B* 48 (1993), Nr. 10, S. 7099

**Weddemann 2009**

WEDDEMANN, Alexander: *A finite element analysis of a microfluidic lab-on-a-chip system employing magnetic carriers for*

*biomedical applications*, Universität Bielefeld, Diss., Dezember 2009

**Wittbracht u. a. 2012**

WITTBRACHT, Frank ; WEDDEMANN, Alexander ; EICKENBERG, Bernhard ; ZAHN, M ; HÜTTEN, Andreas: Enhanced fluid mixing and separation of magnetic bead agglomerates based on dipolar interaction in rotating magnetic fields. In: *Applied Physics Letters* 100 (2012), Nr. 12, S. 123507

**Xiao u. a. 1992**

XIAO, John Q. ; JIANG, J. S. ; CHIEN, C. L.: Giant magnetoresistance in nonmultilayer magnetic systems. In: *Phys. Rev. Lett.* 68 (1992), Jun, 3749–3752. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.68.3749>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.68.3749

**Zhang u. a. 1992**

ZHANG, S. ; LEVY, P. M. ; FERT, A.: Conductivity and magnetoresistance of magnetic multilayered structures. In: *Physical Review B* 45 (1992), Nr. 15, S. 8689

**Zhang u. Levy 1991**

ZHANG, Shufeng ; LEVY, Peter M.: Conductivity perpendicular to the plane of multilayered structures. In: *Journal of Applied Physics* 69 (1991), Nr. 8, S. 4786–4788

## Veröffentlichungen

### Veröffentlichte Artikel

- **Eickenberg u. a. 2013**

EICKENBERG, Bernhard ; MEYER, Judith ; HELMICH, Lars ; KAPPE, Daniel ; AUGÉ, Alexander ; WEDDEMANN, Alexander ; WITTBACHT, Frank ; HÜTTEN, Andreas: Lab-on-a-chip magneto-immunoassays: how to ensure contact between superparamagnetic beads and the sensor surface. In: *Biosensors* 3 (2013), Nr. 3, S. 327–340

- **Ennen u. a. 2016**

ENNEN, Inga ; KAPPE, Daniel ; REMPEL, Thomas ; GLENSKE, Claudia ; HÜTTEN, Andreas: Giant Magnetoresistance: Basic Concepts, Microstructure, Magnetic Interactions and Applications. In: *Sensors* 16 (2016), Nr. 6, S. 904

- **Kappe u. Hütten 2012**

KAPPE, Daniel ; HÜTTEN, Andreas: Positioning System for Particles in Microfluidic Structures. In: *Proceedings of Comsol Conference, 2012*

- **Teich u. a. 2015**

TEICH, Lisa ; KAPPE, Daniel ; REMPEL, Thomas ; MEYER, Judith ; SCHRÖDER, Christian ; HÜTTEN, Andreas: Modeling of nanoparticulate magnetoresistive systems and the impact on molecular recognition. In: *Sensors* 15 (2015), Nr. 4, S. 9251–9264

- **Weddemann u. a. 2010**

WEDDEMANN, Alexander ; AUGÉ, Alexander ; KAPPE, Daniel ; WITTBACHT, Frank ; HÜTTEN, Andreas: Dynamic simulations of the dipolar driven demagnetization process of magnetic multi-core nanoparticles. In: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 322 (2010), Nr. 6, S. 643–646

- **Weddemann u. a. 2011**

WEDDEMANN, Alexander ; KAPPE, Daniel ; HÜTTEN, Andreas: Hybrid FEM-BEM approach for two- and three-dimensional open boundary magnetostatic problems. In: *Proc. COMSOL Conf., Boston, 2011*

## Konferenzbeiträge

- **Hainke u. a. 2014**

HAINKE, Phillip ; KAPPE, Daniel ; HÜTTEN, Andreas: Simulation of GMR in Granular C/Co Nanoparticles in Agarose. In: *2014 COMSOL Conference Cambridge*, 2014

- **Kappe u. Hütten 2012**

KAPPE, Daniel ; HÜTTEN, Andreas: Positioning System for Particles in Microfluidic Structures. In: *2012 COMSOL Conference Milan*, 2012

- **Kappe u. Hütten 2013**

KAPPE, Daniel ; HÜTTEN, Andreas: Modelling Partially Absorbing Biosensors. In: *2013 COMSOL Conference Rotterdam*, 2013

- **Kappe u. Hütten 2014**

KAPPE, Daniel ; HÜTTEN, Andreas: Formation of Particle Clusters from Rotating Particle Chains. In: *2014 COMSOL Conference Cambridge*, 2014

- **Kappe u. Hütten 2018**

KAPPE, Daniel ; HÜTTEN, Andreas: Analyzing Transport Properties of Nanoparticles in Magnetic Ratchets. In: *DPG-Frühjahrstagung 2018, Berlin*, 2018

- **Kappe u. a. 2015**

KAPPE, Daniel ; HÜTTEN, Andreas ; SCHRÖDER, Christian: Modelling surface binding and dissociation of biomolecules. In: *DPG-Frühjahrstagung 2015, Berlin*, 2015

- **Kappe u. a. 2017a**

KAPPE, Daniel ; SCHRÖDER, Christian ; HÜTTEN, Andreas: Calculating GMR in granular System using 3D resistor networks. In: *DPG-Frühjahrstagung 2017, Dresden*, 2017

- **Kappe u. a. 2016**

KAPPE, Daniel ; TEICH, Lisa ; SCHRÖDER, Christian ; HÜTTEN, Andreas: Calculation of GMR effects in granular Systems. In: *DPG-Frühjahrstagung 2016, Regensburg*, 2016

- **Kappe u. a. 2017b**

KAPPE, Daniel ; TEICH, Lisa ; SCHRÖDER, Christian ; HÜTTEN, Andreas: A Framework for Simulating Giant and Tunnel Magnetoresistance in Granular Systems. In: *MMM Conference 2017, Pittsburgh, 2017*

- **Weddemann u. a. 2011**

WEDDEMANN, Alexander ; KAPPE, Daniel ; HÜTTEN, Andreas: Hybrid FEM-BEM approach for two- and three-dimensional open boundary magnetostatic problems. In: *2011 COMSOL Conference Stuttgart, 2011*