

Dynamik und thermische Diffusion von Solitonen in anisotropen ein- und zweidimensionalen Heisenbergmagneten

**Ein Zugang über kollektive Variablen in
adiabatischer Approximation**

Eine an der Universität Bayreuth
zur Erlangung des Grades eines Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
genehmigte Abhandlung

verfasst von

Christian Joachim Schuster

geboren in Hof, Bayern

1. Gutachter: Prof. Dr. F. G. Mertens
2. Gutachter: Prof. Dr. H. Schamel

Tag der Einreichung: 09.03.2005

Tag des Kolloquiums: 18.05.2005

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Das Modell	13
2.1	Die diskreten Bewegungsgleichungen	14
2.2	Die kontinuierlichen Bewegungsgleichungen	16
3	Die Heisenbergkette	21
3.1	Das Modell der Heisenbergkette	21
3.2	Die Lösung der kontinuierlichen Landau-Lifshitz-Gleichung	23
3.2.1	Diskussion der Lösung	24
3.2.2	Einfluss der Anisotropie auf die Konfiguration	25
3.3	Die Heisenbergkette unter Dämpfung und thermischem Rauschen	26
3.3.1	Störterme zur Landau-Lifshitz-Gleichung	26
3.3.2	Das Dissipations-Fluktuations-Theorem für die Heisenbergkette	30
3.3.3	Abhängigkeit der Solitonstruktur von Temperatur und Anisotropie	35
3.4	Mögliche Definitionen des Solitonortes	36
3.4.1	Kollektive Ortsvariable 1	37
3.4.2	Kollektive Ortsvariable 2	42
3.4.3	Implizite kollektive Variable	45
3.4.4	Abschließende Diskussion und Vergleich mit den Simulationen	48
3.5	Fluktuationen der Struktur	53
3.5.1	Mittlere Zeiten	53
3.5.2	Lange Zeiten	58
3.5.3	Numerische Ergebnisse	64
3.5.4	Zusammenfassung	68
4	Das zweidimensionale Heisenbergssystem	71
4.1	Das Modell auf dem quadratischen Gitter und Erhaltungsgrößen	71
4.2	Das Belavin-Polyakov-Soliton und die Solitonstabilität	74
4.3	Dynamische Stabilisierung des Solitons	76
4.4	Das einparametrische Soliton	77

4.4.1	Asymptotisches Verhalten der Solitonlösung	79
4.4.2	Zweidimensionale topologische Solitonen im Grenzfall großer und kleiner Radien	80
4.4.3	Versuchsfunktionen für beliebige Solitonengrößen	81
4.5	Solitondynamik	81
4.5.1	Anregung eines Solitons zur Bewegung im Spinraum	81
4.5.2	Beziehungen zwischen der Präzessions- und der lokalen Moden- frequenz	85
4.5.3	Charakterisierung durch nichtverschwindenden Gesamtbahndrehim- puls	85
4.6	Spindynamik-Simulationen	87
4.6.1	Simulationen für ein einparametrisches Soliton	87
4.6.2	Simulationen für zweiparametrische Solitonen	93
4.6.3	Konsequenzen der Kreisbewegung	96
4.7	Zusammenfassung	98
A	Die exakte Lösung der anisotropen Landau-Lifshitz-Gleichung	101
B	Störterme in der Landau-Lifshitz-Gleichung	105
B.1	Geometrische Betrachtungen	105
B.2	Stochastische Zeitentwicklung der Energie im Ito-Kalkül	107
C	Störungstheorie für schwaches Rauschen	109
D	Die Solitongeschwindigkeit	113
E	Parallele Programmierung	117
E.1	Vorteile eines Linuxclusters bzw. einer Shared-Memory-Maschine . . .	117
E.2	Parallelisierung des Programmcodes	118
E.2.1	MPI	118
E.2.2	OPEN MP	119

Kapitel 1

Einleitung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit nichtlinearen Anregungen in Spinsystemen. Für Spinsysteme gibt es verschiedene Modelle, welche diese anschaulich, praktikabel, aber auch sehr vereinfacht darstellen. Beispielsweise stellt das Ising-Modell ein sehr vereinfachtes Modell dar, bei dem nur die z -Komponenten der Spins betrachtet werden und diese wiederum nur genau zwei Werte annehmen können, nämlich $+1$ und -1 . Ising griff dabei die Idee seines Lehrers Lenz auf, dass die magnetischen Momente der Atome nur zwei entgegengesetzte Einstellungen haben können und eine potentielle Energie zwischen Nachbarn existiert, die eine Parallelstellung begünstigt [27]. Das Ising-Modell hat seine Stärken in der qualitativen Beschreibung von Phasenübergängen im zweidimensionalen (2D-) System. Ebenso wurde es vielfach auf Fragestellungen in der Biologie und sogar in den Sozialwissenschaften angewendet, wobei hier ein zentraler Aspekt das Ausrichten des Verhaltens eines Individuums an seinen Nachbarn ist. Für eine detailliertere Beschreibung von Wechselwirkungen zwischen den Spins benötigt man ein System, das auch deren x - und y -Komponenten mit einbezieht.

Dafür ist das Heisenbergmodell sehr nützlich. Dies ist ein quantenmechanisches Modell, d.h. hier werden Hamilton- und Spinoperatoren betrachtet. Die Heisenbergschen Bewegungsgleichungen für die lokalen Spinoperatoren $d/dt \hat{S}_n = -i/\hbar [\hat{S}_n, \mathcal{H}]$ werden wir in dieser Arbeit im klassischen Limes, d.h. $S \rightarrow \infty$, $\hbar \rightarrow 0$, $\hbar S = \text{const}$ betrachten. Die Größe $\hbar S$ legt die globale Energieskala des Systems fest, hat darüber hinaus aber keine Bedeutung und wird einfach als eine Konstante betrachtet. In Zusammenhang mit semiklassischen Näherungen erlauben kohärente Zustände eine direkte Beziehung zum klassischen Grenzfall herzustellen. Generell ist es aber nicht selbstverständlich, dass nichtlineare Anregungen in quantenmechanischen Systemen mit jenen in klassischen Systemen korrespondieren. Schliemann verwendet in [26] Spin-kohärente Zustände als Basis, um nichtlineare Anregungen in Quantenspinsystemen zu beschreiben. Er zeigte insbesondere, dass kohärente Zustände als zeitabhängiger Variationsansatz Quantenkorrekturen in den klassischen Bewegungsgleichungen reproduzieren und damit den klassischen Grenzfall gut be-

schreiben. Anhand dieser Quantenkorrekturen wird die Güte dieses Näherungsverfahrens beschrieben. Bei kleinen Energien konnte aber gezeigt werden, dass diese Korrekturen vernachlässigbar klein sind, und Quantenfluktuationen sowohl mit wachsender Spinlänge als auch mit der Systemgröße abnehmen, sodass die gemachten Näherungen gerechtfertigt und physikalisch plausibel sind.

In dieser Arbeit verwenden wir das klassische Heisenbergmodell, das in einer Dimension einer linearen Kette von Spins und zweidimensional einem planaren, quadratischen Gitter mit Spins an den Kreuzungspunkten entspricht. Da wir mit dem klassischen Heisenbergmodell ein magnetisches System betrachten, sind für uns Aspekte wie einerseits die Eigenschaften des magnetischen Systems an sich (Materialeigenschaften, insbesondere Anisotropien) und andererseits damit verbundene Anregungen interessant. Lineare Anregungen in diesem System sind Spinwellen, bzw. Magnonen und die nichtlinearen Anregungen Solitonen bzw. Wirbel.

Im Allgemeinen dispergieren in einem linearen System propagierende (fortschreitende) Wellen, wenn man vom vereinfachten Fall wie Licht im Vakuum, wo Gruppen- und Phasengeschwindigkeit zusammenfallen, absieht. Die unterschiedlichen Phasengeschwindigkeiten der Fourierkomponenten eines solchen Wellenpaketes bewirken dessen Auseinanderlaufen. Addiert man jedoch in den zugehörigen Bewegungsgleichungen einen nichtlinearen Term, so kann es spezielle Lösungen geben, bei denen das Auseinanderlaufen durch die Nichtlinearität verhindert wird. Folglich propagieren diese Lösungen ohne ihre Gestalt zu verändern. Anregungen dieser Art bezeichnet man als *kohärent*. Eine kohärente Anregung ist also von der Art, dass alle Teilnehmer des Systems (je nach System: Spins, Atome... - die *Systemkonstituenten*) daran beteiligt sind, d.h. die Anregung ist *kollektiv* und *zusammenhängend* (das heißt wörtlich kohärent). Solche Anregungen können räumlich ausgedehnt (z.B. Wirbel in Spinsystemen), oder stark lokalisiert sein. Im Falle von stark lokalisierten Anregungen spricht man von solitären Wellen.

Sie treten in verschiedensten Bereichen der Physik auf [10], wie der Fluidodynamik, der Festkörper- und Plasmaphysik, aber auch in biologischen und geologischen Systemen. Da solitäre Wellen Lösungen von jeweils verallgemeinerten, nichtlinearen Wellengleichungen sind, unterscheiden sie sich gegenüber linearen Anregungen (wie Phononen oder Magnonen) dadurch, dass für sie das Superpositionsprinzip nicht gilt und Geschwindigkeit, Amplitude sowie Breite nicht unabhängig voneinander wählbar sind. Formstabilität, unendliche Lebensdauer und Stabilität bei Streuung an linearen Wellen verleihen solitären Wellen teilchenartigen Charakter. Diejenigen solitären Wellen, die exakte Lösungen integrierbarer Bewegungsgleichungen darstellen, nennt man Solitonen. Beispiele für solche Gleichungen sind die Sine-Gordon-Gleichung [1, 2], die nichtlineare Schrödinger-Gleichung, die Boussinesq- oder die Korteweg-de-Vries-Gleichung [3, 14], wohingegen z.B. die Verbesserte Boussinesq-Gleichung oder die Φ^4 -Gleichung nicht integrierbar sind.

Solitonen haben gegenüber solitären Wellen noch zusätzlich die Eigenschaft, bei Zusammenstößen bis auf eine Phasenverschiebung ungestört auseinander hervor zu gehen. Jedoch werden solitäre Wellen und Solitonen oft synonym in der Literatur verwendet.

Da die meisten Bewegungsgleichungen physikalischer Modelle nicht integrabel sind, stellt Integrabilität eine starke Anforderung an ein System dar. Sehr oft führen kleine Störungen in nichtlinearen Gleichungen zu einem Verlust der Integrabilität, sodass etwaige Lösungen keine Solitonen mehr sind. Häufig stellen bei kleinen Störungen die Solitonlösungen des ungestörten Systems gute Näherungen für diese solitären Wellen dar und können als Ausgangspunkt der Untersuchung des gestörten Systems dienen [8, 9].

Da nichtlineare kohärente Anregungen wie beispielsweise solitäre Wellen robust gegenüber Störungen sind, besitzen sie Teilcheneigenschaften. Deswegen ist der Gebrauch von *kollektiven Variablen* sehr gebräuchlich. Ziel ist es, ein Modell mit vielen Freiheitsgraden auf ein System mit wenigen, überschaubaren Freiheitsgraden zu reduzieren. Man reduziert die Freiheitsgrade eines Systems, indem man dessen Dynamik durch die Dynamik weniger Variablen ausdrückt. Diese beschreiben im Falle von Solitonen deren Position, Amplitude, Breite und interne Phase. Dabei werden andere mögliche Veränderungen in der Konfiguration durch Phononen (Gitterschwingungen) und Magnonen (Spinwellen) nicht berücksichtigt. Diese Näherung, welche eine große Anzahl von Freiheitsgraden eines Systems auf eine kleine Anzahl kollektiver Variablen reduziert, um kohärente Anregungen zu beschreiben, nennt man eine *adiabatische Approximation*. Dabei unterscheidet man explizite von impliziten kollektiven Variablen, wobei letztere dazu verwendet werden, solitäre Wellen zu parametrisieren. Um die Dynamik kollektiver Variablen zu beschreiben, müssen sie (z.B. mittels der Projektionsmethode) direkt als Funktionale der Systemkonfiguration angegeben werden. Die Verwendung kollektiver Variablen kann als physikalisch intuitives Vorgehen bezeichnet werden, da es keine bestimmte, festgefahrene Vorgehensweise gibt, bestimmte Anregungen in vorgegebenen Systemen mit diesen geeignet zu beschreiben. Trotzdem haben sich die kollektiven Variablen als sehr nützlich erwiesen. Die Methode der kollektiven Variablen wird auch auf die Beschreibung von kohärenten Anregungen in zweidimensionalen Magneten, das sind insbesondere Wirbel und zweidimensionale Solitonen, angewendet.

Abhängig von der Gitterstruktur des verwendeten Materials findet man unterschiedliche Arten von Anisotropien verschiedener Stärke. Bei einer *xy-Anisotropie* (*Easy-Plane-Anisotropie*) richten sich die freien Spins, die für das magnetische Verhalten verantwortlich sind, bevorzugt parallel zur *xy*-Ebene aus, während in *Easy-Axis*-Systemen die Vorzugsrichtung der Spins die *z* – *Achse* ist. Art und Stärke der Anisotropie sind entscheidend für die Gestalt der kohärenten Anregung: Beispielsweise

können in Magneten mit *Easy-Axis-Anisotropie* keine Wirbellösungen auftreten und in *Easy-Plane*-Magneten beobachtet man bei starker Anisotropie nur planare Wirbel, während man bei Anisotropien unterhalb eines kritischen Wertes K_c einen nicht-planaren Wirbel beobachtet [48], bei welchem sich eine glockenförmige S^z Struktur am Wirbelkern ausbildet.

Da alle physikalischen Prozesse bei nichtverschwindender Temperatur ablaufen, sind Störungen eines Systems mittels thermischer Fluktuationen von besonderem Interesse. Dabei erweitert man die dynamischen Gleichungen um einen Rausch- und Dämpfungsterm, welche die Ankopplung des betrachteten Systems an die thermisch fluktuierenden Freiheitsgrade eines umgebenden Wärmebads darstellen. Dämpfung und Rauschen sind vermöge einer Fluktuations-Dissipations-Relation derart verknüpft, dass das System letztlich thermisches Gleichgewicht mit der Umgebung erreicht [4]. Die mikroskopischen, stochastischen Bewegungen der Systemkonstituenten, also der Spins, führen zu makroskopischen, stochastischen Bewegungen der gesamten kollektiven Anregung. Letztere kann man in der stochastischen Dynamik der kollektiven Variablen beschreiben. Dies entspricht Langevins Zugang zur Diffusion von Teilchen. In der Beschreibung kohärenter Anregungen durch kollektive Variablen äußert sich die Temperatur des Systems in Form stochastischer Fluktuationen in Ort und Struktur (d.h. Amplitude, Breite, Phase).

Die Einflüsse des Rauschens auf die Struktur und die Dynamik eines Solitons in der *isotropen* Heisenbergkette wurden in [4, 5] untersucht und eindrucksvoll mit Simulationen modelliert. Ein Teilziel dieser Arbeit ist es, die Soliton-Dynamik unter dem Einfluss von weißem Rauschen zu untersuchen, jedoch in der anisotropen Heisenbergkette. Es werden die Ergebnisse mit denen des isotropen Systems verglichen, gleichzeitig stellen wir noch wichtige Eigenschaften und Einflüsse der Anisotropie auf die Soliton-Dynamik heraus.

In Kapitel 2 führen wir das klassische zweidimensionale Heisenbergssystem sowohl in diskreter als auch in kontinuierlicher Fassung ein. Dabei werden dann die Landau-Lifshitz-Gleichung und die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen hergeleitet. Wir betrachten hier ausschließlich jene Art von Anisotropien, welche eine erhöhte Wechselwirkung zwischen den z -Komponenten der Spins beschreiben. Dagegen sind die Wechselwirkungen zwischen den Spins in der x - und y -Komponente isotrop. Insgesamt wechselwirken Spins jeweils nur mit ihren nächsten Nachbarn. Die in Kapitel 2 hergeleiteten Hamiltonschen Bewegungsgleichungen werden dann in Kapitel 3 für die anisotrope Heisenbergkette auf eine Dimension reduziert.

In Kapitel 3.2 stellen wir die 1-Soliton-Lösung der kontinuierlichen, anisotropen Landau-Lifshitz-Gleichung vor. Die erhaltene 1-Solitonlösung schreiben wir in Abhängigkeit von kollektiven Variablen (Amplitude, Breite usw.), diskutieren sie für bestimmte Grenzfälle und treffen Aussagen über den Einfluss der Anisotropie auf die Struktur eines Solitons. Wenn wir im Folgenden dieser Arbeit von Solitonen

sprechen, so meinen wir stets nur die 1-Soliton-Lösung, deren kollektive Variablen aber beliebig vorgegebene Werte haben können, sodass wir mathematisch von einer Schar von Solitonen reden.

Im nächsten Unterkapitel erweitern wir die dynamischen Gleichungen um Gilbert-Dämpfung und um weißes Rauschen, weil wir die Ankopplung an ein äußeres Wärmebad modellieren wollen. Ziel dieses Kapitels ist die Bestätigung des Dissipations-Fluktuations-Theorems für unser eindimensionales, anisotropes Spinsystem. Dieses Theorem besagt, dass sich nach gewisser Zeit ein Gleichgewicht im System zwischen dem Energietransfer, welcher durch das Wärmebad in Form von Fluktuationen in das System hinein erfolgt, und dem in Form von Dämpfungseffekten zustande kommenden Energieverlust einstellt. Genau wie in [4,5] vernachlässigen wir durch Wechselwirkung mit Magnonen bedingte Effekte, da wir in adiabatischer Approximation arbeiten.

Dann versuchen wir mit Hilfe verschiedener Definitionen des Ortes Aussagen abzuleiten, welche Ortsdefinition die zweckmäßigste ist. Dabei betrachten wir stochastische Fluktuationen ausschließlich des Solitonortes, jedoch nur für kurze Zeit. Das können wir damit rechtfertigen, dass sich das Soliton innerhalb kurzer Zeitskalen in seiner Struktur (bzgl. Breit und Amplitude) kaum ändert. Die stochastische Dynamik des Ortes beschreiben wir mit Hilfe eines Wiener-Prozesses analytisch und vergleichen die theoretisch bestimmten Diffusionskonstanten, das sind die Koeffizienten, welche mit der Zeit t in den jeweiligen Ortsvarianzen linear verknüpft sind, mit Ergebnissen aus der Spindynamik-Simulation. In den Simulationen verwenden wir die kontinuierliche 1-Solitonlösung als Anfangskonfiguration und lösen die Landau-Lifshitz-Gleichung mit Gilbert-Dämpfung und weißem Rauschen diskret. Wir können insbesondere feststellen, dass die diskrete 1-Solitonlösung gut durch die kontinuierliche Lösung approximiert wird, wenn das Soliton nicht zu schmal ist.

Im nächsten Unterkapitel betrachten wir mittlere Zeitskalen und berücksichtigen Effekte, die durch das Rauschen, aber nicht durch die Dämpfung hervorgerufen werden. Durch Fluktuationen der Struktur betrachten wir nun neben der Ortsvarianz auch die Varianzen in Breite und Amplitude des Solitons. Dadurch kommt es in der Ortsvarianz zu einem zusätzlichen diffusiven Beitrag, den wir *superdiffusiv* nennen. Alle diffusiven Effekte werden entscheidend von der Größe der Anisotropie beeinflusst. Dieser Zusammenhang wird genauer untersucht.

Schließlich können wir bei Betrachtung großer Zeitskalen Effekte der Dämpfung nicht mehr vernachlässigen, sodass wir diese in unseren theoretischen Berechnungen mit berücksichtigen müssen. Die Ergebnisse des Abschnittes 3.5 werden mit Ergebnissen der Spindynamik-Simulationen verglichen. Dieser Vergleich dient auch der Überprüfung der Validität unser theoretischer Vorhersagen und der dabei gemachten Näherungen. Die Ergebnisse werden im Anschluss diskutiert und zusammengefasst. Die bisher betrachteten eindimensionalen Solitonen sind Pulssolitonen und damit nichttopologisch. Ein weiteres Beispiel für nichttopologische Solitonen sind die in [49]

behandelten *mobilen Solitonen von kleiner Amplitude* im zweidimensionalen *Easy-Axis*-Heisenbergmodell. Solitonen kann man als topologisch oder nicht-topologisch klassifizieren. Topologische Anregungen zeichnen sich dadurch aus, dass sie nicht durch endliche Deformation in den Grundzustand übergeführt werden können und eine Energielücke im Anregungsspektrum haben. Weiterhin besitzt jedes topologische Soliton (mindestens) eine Ladung Q . Standardbeispiele für topologische Anregungen sind die Kink-Solitonen im Sine-Gordon-Modell oder im Φ^4 -Modell [28, 29], das Belavin-Polyakov Soliton im isotropen zweidimensionalen Heisenbergmodell [15] und Wirbel im zweidimensionalen *Easy-Plane*-Spinsystem [15]. Eine Übersicht über topologische und nicht-topologische Anregungen in magnetischen Systemen ist in [6] enthalten.

Solitonen in isotropen Magneten sind aber eher ein rein akademisches Problem, da alle wirklich existierenden Magnete eine Anisotropie aufweisen. Obendrein ist die Energie des Belavin-Polyakov-Solitons unabhängig von dessen Radius, sodass bei gegebener Energie diesem Soliton ein beliebiger Radius zugeordnet werden kann. Weiterhin konnte dieses Soliton in Simulationen nie beobachtet werden. Daher liegt die Motivation nahe, im zweidimensionalen Heisenbergmodell mit Anisotropie sich mit Solitonen zu beschäftigen, die sowohl in der Kontinuumsnäherung stabil sind als auch in Spindynamik-Simulationen beobachtet werden können.

In dieser Arbeit untersuchen wir topologische Solitonen im zweidimensionalen *Easy-Axis*-Heisenbergmodell, welches wir in Kapitel 2 vorstellen. Bisher wurden diese Solitonen mit Simulationen nur in [35] untersucht, jedoch nur solche mit großen Radien. Wir betrachten neben diesen großen Solitonen auch kleine. Diese haben Ähnlichkeiten mit *Skyrmionen* und erlangen eine große Bedeutung wegen ihrer Anwendung sowohl in der Hochenergiephysik [46] als auch dem Quanten Hall Effekt [47]. Speziell in zweidimensionalen Magneten sind kleine zweidimensionale Solitonen bedeutsam, da sie im Gegensatz zu großen Solitonen aufgrund einer kleineren Masse beweglicher sind.

Das zweidimensionale *Easy-Axis*-Heisenbergmodell wird in Kapitel 4.1 zusammen mit den zugehörigen Erhaltungsgrößen, den z -Komponenten des Bahndrehimpulses L_z und der Gesamtmagnetisierung S_z , vorgestellt. Beide Erhaltungsgrößen fallen zu einer zusammen, d.h. für die z -Komponente des Gesamtbahndrehimpulses J gilt $J_z = S_z - L_z = 0$, wenn das Soliton zentralsymmetrisch ist. In dem Fall bewegt sich dieses *einparametrische* Soliton nicht und seine Dynamik ist allein durch die Präzession der Spins bestimmt. Ist die Symmetrie des Solitons gebrochen, dann ist $J \neq 0$ und das Soliton kann sich nach Vorhersagen gemäß [30] als Ganzes bewegen. Diese Bewegung und die Präzession der Spins bestimmen also die Dynamik dieses *zwei-parametrischen* Solitons.

In Kapitel 4.2 gehen wir auf das Hobart-Derrick-Theorem zusammen mit den Eigenschaften des Belavin-Polyakov-Solitons ein und schließen daraus auf die Notwendigkeit einer dynamischen Stabilisierung des Solitons. Da nach dem Hobart-Derrick-

Theorem [42, 43] in der Feldtheorie mehrdimensionale, statische, stabile Solitonen mit endlicher Energie und endlichem Radius in den Standardmodellen, das sind solche mit Feldgradienten von einem Grad kleiner oder gleich zwei, nicht existieren, muss nach weiteren Stabilisierungsmöglichkeiten gesucht werden. Was die präzidierenden Solitonen angeht, mit welchen man sich bisher am meisten beschäftigt hat, gibt es ein Problem bei wirklichen Ferromagneten. Das Standardmodell [6] eines *Easy-Axis*-Ferromagneten ist eine Idealisierung: Es tritt immer eine *Easy-Plane-Anisotropie* auf, was aber die Erhaltung von S_z zerstört. In [38] wird betont, dass mindestens eine Erhaltungsgröße S_z , L_z oder J_z in dem jeweiligen Modell existieren muss, damit ein dynamisches, stabiles Soliton existieren kann.

Für unser System zeigen wir in Abschnitt 4.3, dass ein einparametrisches Soliton tatsächlich aufgrund seiner präzidierenden Bewegung asymptotisch stabil ist. Anschließend beschreiben wir die Struktur eines Solitons, welche allein durch die Präzessionsfrequenz der Spins charakterisiert, also einparametrisch ist. Seine Gestalt wurde in [35] für Entfernungen weit entfernt vom Solitonzentrum bzw. ganz in dessen Nähe analytisch beschrieben. Ebenso wurde die Asymptotik des Solitons für die Grenzfälle großer bzw. kleiner Solitonradien diskutiert [30, 31, 35]. Weiterhin konnten Näherungsfunktionen konstruiert werden, die sich mittels eines Fitparameters ziemlich genau an die numerische Lösung der Bewegungsgleichungen annähern lassen [30].

Um die Dynamik eines topologischen Solitons in Kapitel 4.5.1 zu beschreiben bedarf es auch der Analyse von Magnonen. Interne Magnonen sind im Soliton gebunden und verantwortlich für dessen Dynamik. In [30] wurden diese internen Moden analytisch behandelt. Die Autoren sagten vorher, dass der Einfluss der internen Moden auf die Solitondynamik eine Kreisbewegung des Solitons verursacht. Aufgrund der bereits erwähnten Teilcheneigenschaft eines Solitons definieren wir die Solitonposition analog zum eindimensionalen Fall in Abschnitt 3.4.1 als Schwerpunktsvariable. Daraus bestimmen wir die Solitongeschwindigkeit, wobei wir die Störungen durch die internen Magnonen mit einbeziehen. Damit verbunden, treffen wir Aussagen, welche der Magnonenmoden zur Bewegung des Solitons als Ganzes beitragen. Die Kreisbewegung eines Solitons korrespondiert mit einer nichtverschwindenden z -Komponente des Gesamtbahndrehimpulses $J_z = L_z + S_z$.

Im vorletzten Abschnitt 4.6 beschreiben wir Spindynamik-Simulationen, in welchen wir die diskrete zweidimensionale Landau-Lifshitz-Gleichung numerisch lösen, und treffen Aussagen über die Dynamik von ein- und zweiparametrischen Solitonen im diskreten Fall. Es sei noch betont, dass alle Aussagen über Eigenschaften der topologischen Solitonen in bisher zitierten Veröffentlichungen nur aus der Kontinuumsnäherung gewonnen wurden. Daher besteht eine dringende Notwendigkeit, die Vorhersagen für das diskrete System zu überprüfen. Anhand der Simulationsergebnisse für das *einparametrische* Soliton können Abhängigkeiten der im Soliton gebundenen Magnonen von Solitonradius und Präzessionsfrequenz gefunden werden. Die Simulationsergebnisse werden dabei mit Ergebnissen aus der Kontinuumstheorie ver-

glichen. Anschließend regen wir das Soliton mittels interner Moden zur Bewegung als Ganzes an. Soweit wir wissen, wurden Spindynamik-Simulationen für zweidimensionale topologische Solitonen nur in [35] verwendet. Jedoch wurden da nur Solitonen mit großen Radien behandelt und es konnte *keine* Bewegung des Solitons als Ganzes festgestellt werden. Wir konnten aber anhand einer geeigneten Deformation des Solitons eine schöne Kreisbewegung erzeugen. Wir können demnach die Vorhersagen einer gyroskopischen Bewegung gemäß [30] bestätigen. Aus diesen Ergebnissen erschließt sich die Möglichkeit, dem Soliton eine endliche Masse zuzuordnen, was wir in Abschnitt 4.6.3 diskutieren. In *Easy-Plane*-Magnetten kann man dagegen den Wirbeln keine endliche Masse zuordnen, weil sie von nichtlokaler Struktur und Energiedichte sind. Damit verbunden ist ein lückenloses Magnonenspektrum, was sich auf die Kopplung eines Wirbels mit einer Magnonenwolke auswirkt, sodass Randeffekte in einem endlichem System zu beobachten sind. Daher wird die Wirbeldynamik durch eine nicht-Newtonsche Bewegungsgleichung mit einem nichtlokalen Term [50] ausgedrückt.

In unserem Fall erhalten wir eine endliche Solitonmasse, die nur im Falle verschwindender bzw. unendlich großer Solitonenradien divergiert. Zuletzt fassen wir die Ergebnisse in Kapitel 4.7 zusammen.

Kapitel 2

Das Modell

Das dieser Arbeit zugrunde liegende System ist das klassische, anisotrope Heisenbergmodell des Ferromagnetismus. Dieses beschreibt eindimensional eine Spinkette und zweidimensional ein System aus Spins, die auf den Kreuzungspunkten eines zweidimensionalen Gitters sitzen. In beiden Systemen sind benachbarte Spins über die ferromagnetische Austauschwechselwirkung verknüpft. Wir beschränken unsere Betrachtung auf ein Hamiltonsches System mit nächster Nachbarwechselwirkung. Daraus leiten wir die entsprechenden Bewegungsgleichungen her, welche wir diskret und kontinuierlich vorstellen. Unter den Lösungen der kontinuierlichen Bewegungsgleichungen befinden sich Solitonen, deren Gestalt entscheidend von der Größe der Anisotropie abhängt. Zunächst betrachten wir allgemein das klassische zweidimensionale Heisenbergmodell:

$$H = -J \sum_{n,m} \vec{S}_n \cdot \vec{S}_m + K \vec{S}_n^z \cdot \vec{S}_m^z - Jd \sum_n (\vec{S}_n^z)^2, \quad (2.1)$$

wobei n, m die Gitterplätze bezeichnen und $\vec{S}_n^z = (\vec{S}_n \hat{e}_z)$ darstellt. Alle Spins weisen die gleiche Länge in Einheiten von \hbar auf. Die dimensionslose Größe J bezeichnet die Austauschwechselwirkung in Einheiten einer beliebig gewählten Konstante J_0 , und S ist die Spinlänge, die ebenfalls in Einheiten einer beliebig gewählten Konstante S_0 gemessen wird. Dann ist die Einheit der Energie $J_0 \hbar^2$ und die der Zeit $\frac{1}{J_0 \hbar}$. Weiterhin stellen K die *Austauschanisotropie* und d die *on-site (single-ion) Anisotropie* dar. Die Festlegung der kartesischen Koordinatenachsen erfolgt so, dass die z-Achse mit der Anisotropieachse zusammenfällt. Abhängig von den Werten, die K und d annehmen können, beschreibt (2.1) ein

$$\begin{array}{ll} d = 0, K \in] - 1; 0[& \text{Easy-Plane-Modell} \\ d = 0, K = 0 & \text{Isotropes Modell} \\ d > 0, K > 0 & \text{Easy-Axis-Modell, mit on-site- und Austauschanisotropie} \\ d > 0, K = 0 & \text{Easy-Axis-Modell, mit on-site Anisotropie.} \end{array} \quad (2.2)$$

Wie im Kapitel „Einführung“ bereits erwähnt, existiert im Falle des *Easy-Plane-Modells* ein kritischer Anisotropiewert K_c , unterhalb dessen sich eine *Out of Plane-*

Komponente ausbildet, während im Grenzübergang $K \rightarrow 0$ sich dieser Wirbel dem *Belavin-Polyakov-Soliton* annähert [6]. Im Falle eines *Easy-Axis-Modell*, bei welchem die Ausrichtung der Spins in z -Richtung bevorzugt ist, erhält man nichtlineare, kohärente Anregungen, die wir zweidimensionale, topologische solitäre Wellen nennen oder, wenn sie klein genug sind, als *Skyrmionen* [37] bezeichnen.

In der vorliegenden Arbeit beschäftigen wir uns ausschließlich mit dem *Easy-Axis-Modell*, d.h. $K \geq 0$ und $d > 0$.

Die Länge der Spins ist fixiert und sie können sich in allen drei Raumrichtungen bewegen. Deswegen ist es sinnvoll, Kugelkoordinaten einzuführen. Dabei bezeichnet Φ den Winkel, den die Projektion eines Spins auf die xy -Ebene mit der positiven x -Achse bildet, und Θ den Neigungswinkel relativ zur positiven z -Achse.

$$\vec{S} = S (\sin \Theta \cos \Phi, \sin \Theta \sin \Phi, \cos \Theta). \quad (2.3)$$

Definiert man noch $\Psi = \frac{S^z}{S} = \cos \Theta$ so können wir \vec{S} wie folgt schreiben:

$$\vec{S} = S \left(\sqrt{1 - \Psi^2} \cos \Phi, \sqrt{1 - \Psi^2} \sin \Phi, \Psi \right). \quad (2.4)$$

Die Poissonklammer zweier Funktionen A und B dieser Variablen ist definiert durch

$$\{A, B\} := \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial A}{\partial \Phi_n} \frac{\partial B}{\partial S_n^z} - \frac{\partial A}{\partial S_n^z} \frac{\partial B}{\partial \Phi_n} \right). \quad (2.5)$$

Hieraus folgt unmittelbar die fundamentale Relation

$$\{\Phi_m, \Psi_n\} = \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial \Phi_m}{\partial \Phi_n} \frac{\partial \Psi_n}{\partial \Psi_n} - \frac{\partial \Phi_m}{\partial \Psi_n} \frac{\partial \Psi_n}{\partial \Phi_n} \right) = \delta_{nm}. \quad (2.6)$$

Diese Identität ist äquivalent mit der Kanonizität von Φ und Ψ , was bedeutet, dass sich die Bewegungsgleichungen dieser Variablen aus der Hamiltonfunktion herleiten lassen. Die Hamiltonfunktion (2.1) lässt sich damit folgendermaßen darstellen

$$H = -JS^2 \sum_{n,m} \left[\sqrt{(1 - \Psi_m^2)(1 - \Psi_n^2)} \cos(\Phi_m - \Phi_n) + (1 + K) \Psi_m \Psi_n \right] - JS^2 \sum_n d\Psi_n^2, \quad (2.7)$$

wobei

$$\cos \Phi_n \cos \Phi_m + \sin \Phi_n \sin \Phi_m = \cos(\Phi_m - \Phi_n)$$

2.1 Die diskreten Bewegungsgleichungen

Die Bewegungsgleichungen die wir hier herleiten werden, hängen diskret vom Ort ab, d.h. n bzw. m beschreiben jeweils die Position im quadratischen, klassischen Gitter. Mit der Relation

$$\{S_m^a, S_n^b\} = \delta_{nm} \varepsilon_{abc} S_n^c, \quad (2.8)$$

erhält man eine analoge Form zur Drehimpulsvertauschungsrelation der Quantenmechanik, wenn wir (2.8) mit der imaginären Einheit i multiplizieren und die klassischen Spinkomponenten durch die entsprechenden quantenmechanischen Operatoren und $i\{ , \}$ durch den Kommutator ersetzen. Dadurch, dass man Φ_n und S_n^z als konjugiertes Variablenpaar erhält, führt das zu einem konsistenten Anschluss an die Quantenmechanik und erfährt dadurch eine physikalische Rechtfertigung.

Ein allgemeiner Ausdruck für die Poissonklammer zweier Funktionen A und B der kartesischen Spinkomponenten, welcher seinerseits wieder von kanonischen Variablen abhängt, ergibt sich dann mit (2.8)

$$\{A, B\} = \sum_{n=1}^N \varepsilon_{abc} \frac{\partial A}{\partial S_n^a} \frac{\partial B}{\partial S_n^b} S_n^c. \quad (2.9)$$

Dabei wurde die Kettenregel für Poissonklammern verwendet, die hier insbesondere

$$\{A, B\} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \sum_{a=x,y,z} \sum_{b=x,y,z} \frac{\partial A}{\partial S_m^a} \frac{\partial B}{\partial S_n^b} \{S_m^a, S_n^b\} \quad (2.10)$$

liefert. Um eine Bewegungsgleichung für die Spins abzuleiten, betrachten wir zunächst die allgemeine Form, die eine zeitliche Änderung von A beschreibt:

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (2.11)$$

mit der Hamilton-Funktion $H(p, q, t) = \sum_i \dot{q}_i p_i - L(q_i, \dot{q}_i, t)$. Nun können wir die zeitliche Änderung einer Spinkomponente herleiten:

$$\frac{d}{dt} S_k^j = \underbrace{\{S_k^j, H\}}_0 + \frac{\partial S_k^j}{\partial t} \stackrel{(6)}{=} \sum_{n=1}^N \varepsilon_{abc} \underbrace{\frac{\partial S_k^j}{\partial S_n^a}}_{\delta_{aj}\delta_{kn}} \frac{\partial H}{\partial S_n^b} S_n^c = \varepsilon_{abc} \delta_{kn} \delta_{aj} \frac{\partial H}{\partial S_n^b} S_n^c = -\varepsilon_{jcb} S_k^c \frac{\partial H}{\partial S_k^b}, \quad (2.12)$$

was wir folgendermaßen schreiben können:

$$\frac{d}{dt} \vec{S}_n = -\vec{S}_n \times \underbrace{\frac{\partial H}{\partial \vec{S}_n}}_{\vec{B}_n}. \quad (2.13)$$

Das ist die Landau-Lifshitz-Gleichung in dimensionsloser Form. Sie beschreibt die Präzession eines Spins in dem lokalen, „effektiven Magnetfeld“ $(\vec{B}_n)^a := \partial H / \partial S_n^a$. Dieses Feld wird durch die magnetische Wechselwirkung der Spins verursacht. Anhand der Herleitung der Landau-Lifshitz-Gleichung sieht man, dass diese nicht von der Form von H abhängt. Setzen wir für H (2.1) so folgt für diese Gleichung insbesondere:

$$\frac{d}{dt} \vec{S}_n = J \vec{S}_n \times \left[2d \vec{S}_n^z + \sum_m \vec{S}_m + K \vec{S}_m^z \right]. \quad (2.14)$$

Wir betrachten jedoch in dieser Arbeit nur die *nächste Nachbar Wechselwirkung*, sodass jeder Vektor \vec{S}_m in (2.14) im Gitter ein Nachbarvektor von \vec{S}_n ist. Um die Position eines Spins im Gitter zu kennzeichnen schreiben wir (2.14) wie folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \vec{S}_{n,n} = JS \vec{S}_{n,n} \times & \left[\vec{S}_{n,n-1} + \vec{S}_{n,n+1} + \vec{S}_{n-1,n} + \vec{S}_{n+1,n} + 2d \vec{S}_n^z \right. \\ & \left. + K \left(\vec{S}_{n,n-1}^z + \vec{S}_{n,n+1}^z + \vec{S}_{n-1,n}^z + \vec{S}_{n+1,n}^z \right) \right] \end{aligned} \quad (2.15)$$

Nun wollen wir die Bewegungsgleichungen für Ψ und Φ

$$\dot{\Psi}_n = -\frac{1}{S} \frac{\partial H}{\partial \Phi_n} \quad \text{und} \quad \dot{\Phi}_n = \frac{1}{S} \frac{\partial H}{\partial \Psi_n} \quad (2.16)$$

direkt aus der Hamilton-Funktion (2.7) ableiten:

$$\dot{\Psi}_n = -JS \sum_{m,n} \left[\sqrt{(1 - \Psi_m^2)(1 - \Psi_n^2)} \sin(\Phi_n - \Phi_m) \right] \quad (2.17a)$$

$$\dot{\Phi}_n = JS \sum_{m,n} \left[\Psi_n \sqrt{\frac{1 - \Psi_m^2}{1 - \Psi_n^2}} \cos(\Phi_n - \Phi_m) - (1 + K) \Psi_m - 2\Psi_n d \right]. \quad (2.17b)$$

Da hier Summanden sowohl mit $m > n$ als auch mit $m < n$ auftreten, erhalten wir in der Summation (2.17a) Beiträge, die $\sin(\Phi_m - \Phi_n)$ und $-\sin(\Phi_m - \Phi_n)$ enthalten. Damit ist $d\Psi_n/dt = 0$ und es gilt:

$$\frac{d}{dt} \sum_n (1 - \Psi_n) = 0 \quad (2.18)$$

Das liefert einer Konstante der Bewegung,

$$S_z = \sum_n S (1 - \Psi_n) := N, \quad (2.19)$$

die wir als die z -Komponente der Gesamtmagnetisierung bezeichnen. Stellt man sich den Grundzustand eines klassischen Spingitters so vor, dass alle Spins vollständig in z -Richtung geklappt sind, so ist klar, dass ein angeregter Zustand sich durch beispielsweise einen in z -Richtung umgeklappten Spin auszeichnet, was ein Magnon anregen würde. Deshalb bezeichnet man mit N die Anzahl der gebundenen Magnonen gleichbedeutend mit der Anzahl der Spins, die vom Grundzustand abweichen. Auf diese Erhaltungsgröße werden wir noch in Kapitel 4.3 zu sprechen kommen.

2.2 Die kontinuierlichen Bewegungsgleichungen

Um analytische Lösungen für die Landau-Lifshitz-Gleichung zu finden, wollen wir nun die Kontinuumsversion des obigen Modells einführen. Deswegen hängen die

dynamischen Gleichungen kontinuierlich von der kontinuierlichen Ortsvariable \vec{r} ab. Dazu schreiben wir die Hamiltonfunktion (2.1) in einer anderen Form:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_m \sum_a \left[\vec{S}_m \cdot \vec{S}_{m+a} + \vec{S}_m \cdot \vec{S}_{m-a} + K \left(\vec{S}_m^z \cdot \vec{S}_{m+a}^z + \vec{S}_m^z \cdot \vec{S}_{m-a}^z \right) \right] - \frac{J}{2} \sum_m 2d \left(\vec{S}_m^z \right)^2. \quad (2.20)$$

Wir berücksichtigen bei der Summation, dass im quadratischen Gitter jeder Spin auf einem Gitterplatz (m_1, m_2) jeweils vier Nachbarn hat, nämlich $(m_1 \pm a, m_2)$ und $(m_1, m_2 \pm a)$, wobei a die Größe der Gitterkonstanten angibt. Um nun zu einem kontinuierlichem System zu gelangen, entwickeln wir den Vektor \vec{S}_{m+a} um \vec{S}_m :

$$\vec{S}_{m+a} = \vec{S}_m + (\vec{a} \cdot \nabla) \vec{S}_m + \frac{1}{2} (\vec{a} \cdot \nabla)^2 \vec{S}_m \dots \quad (2.21)$$

Alle in $\vec{a} \cdot \nabla$ linearen Terme heben sich aus (2.21) heraus. Dann schreibt sich (2.20) wie folgt:

$$\begin{aligned} H &\approx -\frac{J}{2} \sum_m \sum_a \left[4\vec{S}_m^2 + \vec{S}_m \cdot (\vec{a} \cdot \nabla)^2 \vec{S}_m + K \left(\vec{S}_m^z \cdot (\vec{a} \cdot \nabla)^2 \vec{S}_m^z + 4(\vec{S}_m^z)^2 \right) \right] - \\ &\quad - \frac{J}{2} \sum_m 2d \left(\vec{S}_m^z \right)^2 \\ &\stackrel{|a|=1}{\approx} -\frac{J}{2} \int_{Gitter} \left[4S^2 + \vec{S}(\vec{r}) \cdot \Delta \vec{S}(\vec{r}) + K \left(4 \left(\vec{S}^z(\vec{r}) \right)^2 + \vec{S}^z(\vec{r}) \cdot \Delta \vec{S}^z(\vec{r}) \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\vec{S}^z(\vec{r}) \right)^2 2d \right] d^2r \\ &= -\frac{J}{2} \int_{Gitter} \left[(4 + 4K + 2d) S^2 + \vec{S}(\vec{r}) \cdot \Delta \vec{S}(\vec{r}) + K \vec{S}^z(\vec{r}) \cdot \Delta \vec{S}^z(\vec{r}) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\left(\vec{S}^z(\vec{r}) \right)^2 - S^2 \right) (4K + 2d) \right] d^2r \end{aligned} \quad (2.22)$$

Der konstante Term $-(2 + 2K + d)JS^2$ steht für den ortsunabhängigen Beitrag der Grundzustandsenergiedichte, der für die Dynamik nicht weiter relevant ist und deswegen nicht mitberücksichtigt wird. Integriert man (2.22) partiell über den gesamten Raum, den wir in guter Näherung als unendlich ausgedehnt betrachten können, und benutzen wir noch die Eigenschaft einer konstanten Spinlänge

$$\vec{S} \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \vec{S} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \vec{S}^2 = 0, \quad (2.23)$$

so erhalten wir für H:

$$H = \frac{J}{2} \int \left[(\partial_x \vec{S})^2 + (\partial_y \vec{S})^2 + K \left((\partial_x \vec{S}^z)^2 + (\partial_y \vec{S}^z)^2 \right) - (4K + 2d) \left(\left(\vec{S}^z \right)^2 - S^2 \right) \right] d^2r. \quad (2.24)$$

Die kontinuierliche Form der Landau-Lifshitz-Gleichung kann man analog der Vorgehensweise in Abschnitt 2.1 herleiten, worauf wir hier verzichten und auf [4] verweisen. Die kontinuierliche Form der Landau-Lifshitz-Gleichung lautet:

$$\dot{\vec{S}} = -\vec{S} \times \vec{B}, \quad (2.25)$$

wobei $\vec{B} = -\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\vec{S}}$ ist. Nach klassischer Feldtheorie berechnet sich \vec{B} mit Gleichung (2.24) zu

$$\begin{aligned} \vec{B} &= -\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\vec{S}} \\ &= -J \left[\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\vec{S}} - \frac{d}{dx} \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial(\partial_x\vec{S})} - \frac{d}{dy} \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial(\partial_y\vec{S})} \right] \\ &= -J \left[\Delta\vec{S} + K\Delta\vec{S}^z + (4K + 2d)\vec{S}^z \right]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Demnach kann man die kontinuierliche Form der Landau-Lifshitz-Gleichung schreiben als:

$$\dot{\vec{S}} = J\vec{S} \times \left[\Delta\vec{S} + K\Delta\vec{S}^z + (4K + 2d)\vec{S}^z \right]. \quad (2.27)$$

Die diskreten Felder $\Psi_{\vec{n}}$ und $\Phi_{\vec{n}}$ transformieren sich im kontinuierlichen Fall zu $\Psi(\vec{r})$ und $\Phi(\vec{r})$. Mit (2.4) kann man (2.24) in Abhängigkeit von Φ und Ψ ausdrücken:

$$H = \frac{JS^2}{2} \int \left[(1 + K(1 - \Psi^2)) \frac{(\nabla\Psi)^2}{1 - \Psi^2} + (1 - \Psi^2)(\nabla\Phi)^2 - (4K + 2d)(\Psi^2 - 1) \right] dr^2 \quad (2.28)$$

Damit lautet (2.25)

$$\dot{\vec{S}} = J\vec{S} \times \left[\Delta\vec{S} + \Delta\vec{S}^z + (4K + 2d)\vec{S}^z \right] \quad (2.29)$$

Nun leiten wir die kontinuierlichen Bewegungsgleichungen für Φ und Ψ her. Nach der klassischen Feldtheorie schreiben sich dann die Hamiltonschen Gleichungen wie folgt:

$$\dot{\Psi} = -\frac{1}{S} \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\Phi} = -\frac{1}{S} \left[\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\Phi} - \nabla \cdot \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial(\nabla\Phi)} \right] \quad (2.30a)$$

$$\dot{\Phi} = \frac{1}{S} \frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\Psi} = \frac{1}{S} \left[\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\Psi} - \nabla \cdot \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial(\nabla\Psi)} \right], \quad (2.30b)$$

wobei \mathcal{H} die Hamilton-Dichte von (2.30) ist. Somit lauten die Bewegungsgleichungen für die Felder Φ und Ψ [48]:

$$\frac{\dot{\Phi}}{JS} = -\frac{\Delta\Psi}{1 - \Psi^2} - K\Delta\Psi + \Psi[-4K - 2d - (\nabla\Phi)^2] - \frac{\Psi}{(1 - \Psi^2)^2} (\nabla\Psi)^2 \quad (2.31a)$$

$$\frac{\dot{\Psi}}{JS} = (1 - \Psi^2) \Delta\Phi - 2\Psi\nabla\Psi\nabla\Phi. \quad (2.31b)$$

In den folgenden Kapiteln, die sich mit der Heisenbergkette befassen, berücksichtigen wir nur die *on-site* Anisotropie d.h. $K = 0$, $d > 0$, wohingegen wir uns in Kapitel 4, wo das quadratische Gitter behandelt wird, auf die Austauschanisotropie beschränken, d.h. $d = 0$, $K > 0$. Obiges Gleichungssystem (2.31) wird in einer Dimension analytisch gelöst, während dies in zwei Dimensionen nicht möglich ist.

Sowohl im eindimensionalen als auch im zweidimensionalen Heisenbergssystem vergleichen wir die Theorie, bei welcher wir über Kontinuumsnäherung gewonnene Bewegungsgleichungen lösen (gegebenenfalls numerisch), mit Spindynamiksimulationen. Diese beinhalten im Wesentlichen eine numerische Lösung der diskreten Landau-Lifshitz-Gleichung jeweils ein- und zweidimensional.

Kapitel 3

Die Heisenbergkette

In diesem Kapitel wollen wir die thermische Diffusion von Solitonen in der Heisenbergkette mit *on-site* Anisotropie untersuchen. Die Heisenbergkette stellt eine eindimensionale Anordnung von Spins dar, die ferromagnetisch mit ihrem nächsten Nachbarn gekoppelt sind. Nachdem wir die 1-Solitonlösung der Landau-Lifshitz-Gleichung hergeleitet haben, führen wir Rausch- und Dämpfungsterme in die Landau-Lifshitz-Gleichung ein und zeigen die Gültigkeit des Dissipations-Fluktuations-Theorems. Wir führen dann drei mögliche Definitionen des Ortes ein und werden begründen, welche die geeignetste ist. Bei Betrachtung kurzer Zeitskalen nehmen wir Amplitude und Breite eines Solitons als konstant an. Diese Annahme müssen wir natürlich aufgeben, wenn wir mittlere bzw. größere Zeitskalen betrachten. Fluktuationen der Struktur verlangen eine geeignete stochastische Beschreibung der Dynamik aller kollektiver Variablen. Wir diskutieren in diesem Zusammenhang auch den Einfluss der Anisotropie auf die diffusiven Eigenschaften eines Solitons. Alle theoretischen Vorhersagen werden mit Spindynamik-Simulationen verglichen, die in den jeweiligen Unterkapiteln erläutert sind.

3.1 Das Modell der Heisenbergkette

Zunächst möchten wir die im letzten Kapitel bestimmten Bewegungsgleichungen nochmals auf eine Dimension spezifiziert vorstellen, da sie die Grundlage für weitere Berechnungen in diesem Abschnitt sind. Die Hamiltonfunktion (2.1) bzw. (2.7) vereinfacht sich zu:

$$H = -J \sum_n \left[\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + d \left(\vec{S}_n^z \right)^2 \right] \quad (3.1)$$

bzw.

$$H = -J \sum_n \left[\sqrt{\left(S^2 - (S_n^z)^2 \right) \left(S^2 - (S_{n+1}^z)^2 \right)} \cos(\Phi_{n+1} - \Phi_n) + S_n^z S_{n+1}^z + \frac{\beta}{2} (S_n^z)^2 \right], \quad (3.2)$$

wobei wir $2d := \beta$ setzen. Die Landau-Lifshitz-Gleichung (2.14) lautet eindimensional:

$$\dot{\vec{S}}_n = J\vec{S}_n \times \left[\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1} + \beta\vec{S}_n^z \right] \quad (3.3)$$

Als Bewegungsgleichungen für Φ und Ψ erhält man:

$$\dot{\Psi}_n = J \sum_n \left[\sqrt{(1 - \Psi_{n+1}^2)(1 - \Psi_n^2)} \sin(\Phi_{n+1} - \Phi_n) \right] \quad (3.4a)$$

$$\dot{\Phi}_n = -J \sum_n \left[-\Psi_n \sqrt{\frac{1 - \Psi_{n+1}^2}{1 - \Psi_n^2}} \cos(\Phi_n - \Phi_{n+1}) + \Psi_{n+1} + \beta\Psi_n \right]. \quad (3.4b)$$

Die Kontinuumsversion der Hamiltonfunktion (2.24) bzw. (2.28) vereinfacht sich zu:

$$H = \frac{J}{2} \int \left[\partial_r \vec{S} \cdot \partial_r \vec{S} - \beta((S^z)^2 - S^2) \right] dr, \quad (3.5)$$

mit $\vec{S} = \vec{S}(r, t)$. In Kugelkoordinaten schreibt sich die Hamiltonfunktion als

$$H = \frac{JS^2}{2} \int \left[\frac{1}{1 - \Psi^2} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial r} \right)^2 + (1 - \Psi^2) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 - \beta(\Psi^2 - 1) \right] dr, \quad (3.6)$$

wobei r die kontinuierliche Koordinate entlang der Kette darstellt. Ebenso können wir (2.14) vereinfachen zu:

$$\dot{\vec{S}}(r, t) = J\vec{S}(r, t) \times \left[\partial_r^2 \vec{S}(r, t) + \beta\vec{S}^z(r, t) \right]. \quad (3.7)$$

Setzt man in (3.7) den Spin in sphärischen Koordinaten ein:

$$\vec{S} = \left(\sqrt{1 - \Psi^2} \cos \Phi, \sqrt{1 - \Psi^2} \sin \Phi, \Psi \right), \quad (3.8)$$

so erhält man die eindimensionale Form von (2.31):

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{1}{S} \frac{\delta H}{\delta \Phi} = JS \left[(1 - \Psi^2) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} - 2\Psi \frac{\partial \Psi}{\partial r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right] = JS \frac{\partial}{\partial r} \left[(1 - \Psi^2) \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right], \quad (3.9a)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{1}{S} \frac{\delta H}{\delta \Psi} = JS \left[-\frac{\Psi}{(1 - \Psi^2)^2} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial r} \right)^2 - \frac{1}{1 - \Psi^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} - \Psi \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 - \beta\psi \right]. \quad (3.9b)$$

Da $\Psi = \cos \Theta$, kann man die Magnetisierungsdynamik eines eindimensionalen Ferromagneten mit (3.9) durch die Winkelvariablen Θ und Φ beschreiben:

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial r^2} - \left[\beta + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right] \sin \Theta \cos \Theta - \frac{1}{JS} \frac{\partial \Phi}{\partial t} \sin \Theta = 0 \quad (3.10a)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\sin^2 \Theta \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{SJ} \frac{\partial \Theta}{\partial t} \sin \Theta = 0 \quad (3.10b)$$

Da wir nach einer nichtoszillierenden, exponentiell lokalisierten, mit konstanter Geschwindigkeit fortschreitenden Einsolitonlösung suchen, verwenden wir an dieser Stelle den sogenannten *travelling wave Ansatz* [23]. Wir setzen

$$\Psi(r, t) = \Psi(r - Vt - X_0) = \Psi(\xi) \quad (3.11a)$$

$$\Phi(r, t) = \omega t + \Phi_s(r - Vt + X_0) = \omega t + \Phi_s(\xi), \quad (3.11b)$$

wobei die Konstante X_0 die Solitonposition zur Zeit $t = 0$ festlegt. Bringt man (3.10a) und (3.10b) ausschließlich in Abhängigkeit von $\xi = X - Vt - X_0$ mit der Beziehung $\frac{\partial}{\partial t} = -V \frac{\partial}{\partial \xi}$, so erhält man:

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} - \left[\beta + \left(\frac{d\Phi_s}{d\xi} \right)^2 \right] \sin \Theta \cos \Theta + \frac{\sin \Theta}{JS} \left(-\omega + V \frac{d\Phi_s}{d\xi} \right) = 0 \quad (3.12a)$$

$$\frac{d}{d\xi} \left(\sin^2 \Theta \frac{d\Phi_s}{d\xi} \right) + \frac{V}{JS} \frac{d}{d\xi} \cos \Theta = 0. \quad (3.12b)$$

3.2 Die Lösung der kontinuierlichen Landau-Lifshitz-Gleichung

Erstmalig wurde die Einsolitonlösung von Gleichungssystem (3.12) in [24, 25] gefunden. Das Gleichungssystem wird im Anhang (4.7) ausführlich gelöst. Deswegen geben wir hier direkt die Lösungen für Ψ und Φ an:

$$\Psi = \cos \Theta = 1 - \frac{2A(1 + \beta\Gamma^2)}{1 + A\beta\Gamma^2 + \sqrt{1 + (2 - A)A\beta\Gamma^2} \cosh(2\sqrt{\beta + 1/\Gamma^2}\xi)} \quad (3.13)$$

und

$$\begin{aligned} \Phi_s(\xi) - \Phi_0 = & \frac{1}{\Gamma} \sqrt{\frac{2 - A}{A}} \xi + \\ & \arctan \left[\frac{\sqrt{2(2 - A)} \sqrt{A + \beta\Gamma^2}}{1 - A + \sqrt{1 - (-2 + A)A\beta\Gamma^2}} \tanh \left[\sqrt{\beta + \Gamma^{-2}} \xi \right] \right]. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Wir bezeichnen im Folgenden die Solitonposition mit $X(t) = X_0 + Vt$. Verwenden wir (3.11), so lassen sich (3.13) und (3.14) schreiben als:

$$\begin{aligned} \Psi(r, t) = \cos \Theta = \\ = 1 - \frac{2A(1 + \beta\Gamma^2)}{1 + A\beta\Gamma^2 + \sqrt{1 + (2 - A)A\beta\Gamma^2} \cosh(2\sqrt{\beta + 1/\Gamma^2}(r - X(t)))}, \end{aligned} \quad (3.15a)$$

$$\begin{aligned} \Phi(r, t) = \Phi_0 + \frac{2JS}{A\Gamma^2} t + \frac{1}{\Gamma} \sqrt{\frac{2 - A}{A}} (r - X(t)) + \\ \arctan \left[\frac{\sqrt{2(2 - A)} \sqrt{A + \beta\Gamma^2}}{1 - A + \sqrt{1 - (-2 + A)A\beta\Gamma^2}} \tanh \left[\sqrt{\beta + \Gamma^{-2}} (r - X(t)) \right] \right]. \end{aligned} \quad (3.15b)$$

Wir führen nun den Übergang zum isotropen Fall durch, indem wir den Anisotropieparameter β gegen Null gehen lassen und erhalten so:

$$\Psi(r, t) = 1 - A \left[\operatorname{sech} \left(\frac{r - X(t)}{\Gamma} \right) \right]^2, \quad (3.16a)$$

$$\Phi(r, t) = \Phi_0(t) + \sqrt{\frac{2}{A} - 1} \frac{r - X(t)}{\Gamma} + \arctan \left[\sqrt{\frac{A}{2 - A}} \tanh \left(\frac{r - X(t)}{\Gamma} \right) \right]. \quad (3.16b)$$

Dabei stellt A die Amplitude und Γ die Breite des Solitonpulses im isotropen System dar. Das sind genau die Lösungen, wie sie in [4] für die entsprechenden Bewegungsgleichungen gefunden wurden.

Für die gemäß (3.2) oder (3.6) berechnete Anregungsenergie erhält man

$$E_{\text{Soliton}} = 4JS^2 \sqrt{\beta + \Gamma^{-2}}, \quad (3.17)$$

d.h. die Energie hängt weder von der Amplitude A noch vom Ort r ab, jedoch wird ihr Wert wesentlich von der Anisotropie bestimmt. Bildet man hier wieder den Grenzwert $\beta \rightarrow 0$, dann erhält man die entsprechende Energie im isotropen Fall.

Neben der Energie sind auch der Gesamtimpuls $P = -S \int \partial\Phi/\partial r \Psi dr$ und die z -Komponente der Gesamtmagnetisierung $S_z = \int dr(S - S^z)$ erhalten [6].

3.2.1 Diskussion der Lösung

A ist in (3.15) auf den Bereich $0 < A \leq 2$ und die Breite Γ auf positive Werte beschränkt. Wenn $A=0$ ist, hat man für $\Theta(\xi)$ lediglich einen Phasensprung von $m \cdot 2\pi$, $m \in \mathbb{Z}$. Dagegen hat man bei $\Phi(\xi)$ neben einem Phasensprung von $m \cdot \pi$ in Φ_s unendlich große Werte für ω und V . Diesen Fall schließen wir im Folgenden aus. Es sei nun $A = 2$. Man sieht sofort, dass $V=0$ ist, was bedeutet, dass die Lösung das Spinfeld als eine am Ort fixierte Welle beschreibt, d.h. $\xi(t) = r - X_0$. Man erhält:

$$\cos \Theta = 1 - \frac{4(1 + \beta\Gamma^2)}{1 + 2\beta\Gamma^2 + \cosh \left(2\sqrt{\beta + \frac{1}{\Gamma^2}} \xi \right)} \quad (3.18a)$$

$$\Phi(\xi, t) = \frac{JS}{\Gamma^2} t + m\pi. \quad (3.18b)$$

Als weiterer Spezialfall soll $\Phi(\xi, t) = \text{const.}$ behandelt werden [6]. Das Gleichungssystem (3.10) reduziert sich dann zu:

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial r^2} - \beta \sin \Theta \cos \Theta = 0, \quad (3.19a)$$

$$\frac{V}{JS} \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} \sin \Theta = 0. \quad (3.19b)$$

Neben der trivialen Lösung ($\cos \Theta = \text{const}$) des Gleichungssystems (3.19) gibt es eine Lösung in Form einer Blochwand:

$$\cos \Theta = \tanh \left((r - X_0)(\sqrt{\beta}) \right). \quad (3.20)$$

Eine Blochwand trennt Gebiete unterschiedlicher Magnetisierungsrichtungen in einem Ferromagneten. Im Falle von (3.20) entsprechen $\cos \Theta (-\infty) = +1$ und $\cos \Theta (+\infty) = -1$ den Grundzuständen eines Ferromagneten. Die durch (3.20) beschriebene Anregung erstreckt sich auf den Bereich, der um $l_0 = 1\sqrt{\frac{1}{\beta}}$ von X_0 , dem Mittelpunkt der Blochwand, entfernt lokalisiert ist. Deswegen fällt obiger Ausdruck unter die Definition einer solitären Welle und hat wegen seiner Ladung ± 1 obendrein topologische Eigenschaften.

In einem einachsigen (*Easy-Axis-Modell*) kann sich die Blochwand ohne ein äußeres magnetisches Feld H (wir nehmen stets $H = 0$ an) nicht bewegen. Wegen der Zeitunabhängigkeit bleibt die Projektion auf die Anisotropieachse (mit der z-Achse zusammenfallend) erhalten. Für die Projektion gilt:

$$S_{\perp} = \sqrt{S_x^2 + S_y^2} = S \sin \Theta = S \operatorname{sech} \left[(r - X_0)\sqrt{\beta} \right]. \quad (3.21)$$

Einige Grafiken sollen die Gestalt der Solitonlösungen verdeutlichen, siehe Abbildung 3.1. Die Solitonkonfiguration wurde so gewählt, dass der Grundzustand, gegen den das Spinfeld fern vom Solitonzentrum strebt, durch $S^z = S$, $S^x = S^y = 0$ gekennzeichnet ist.

3.2.2 Einfluss der Anisotropie auf die Konfiguration

Jetzt wollen wir noch die Lösung (3.15) in Bezug auf die Anisotropie β diskutieren. Man sieht leicht aus den S^z -Konfigurationen, die in Abbildung 3.1 abgebildet sind, dass β die Solitonstruktur viel stärker beeinflusst als die Parameter A und Γ . Als eine Konsequenz relativ großer Anisotropie ($\beta = 0.01$) führen große Veränderungen in A und Γ zu kleinen strukturellen Änderungen von S^z , und umgekehrt verursachen kleine strukturelle Änderungen von S^z zu großen Schwankungen in A und Γ . Konsequenzen daraus diskutieren wir später. Weiter macht sich bemerkbar, dass größere β -Werte zu einem schmäleren Solitonpuls führen, während kleine β -Werte den Solitonpuls verbreitern. Im Grenzfall $\beta \rightarrow 0$ strebt der Puls gegen den Puls des isotropen Systems, der durch (3.16) gegeben ist.

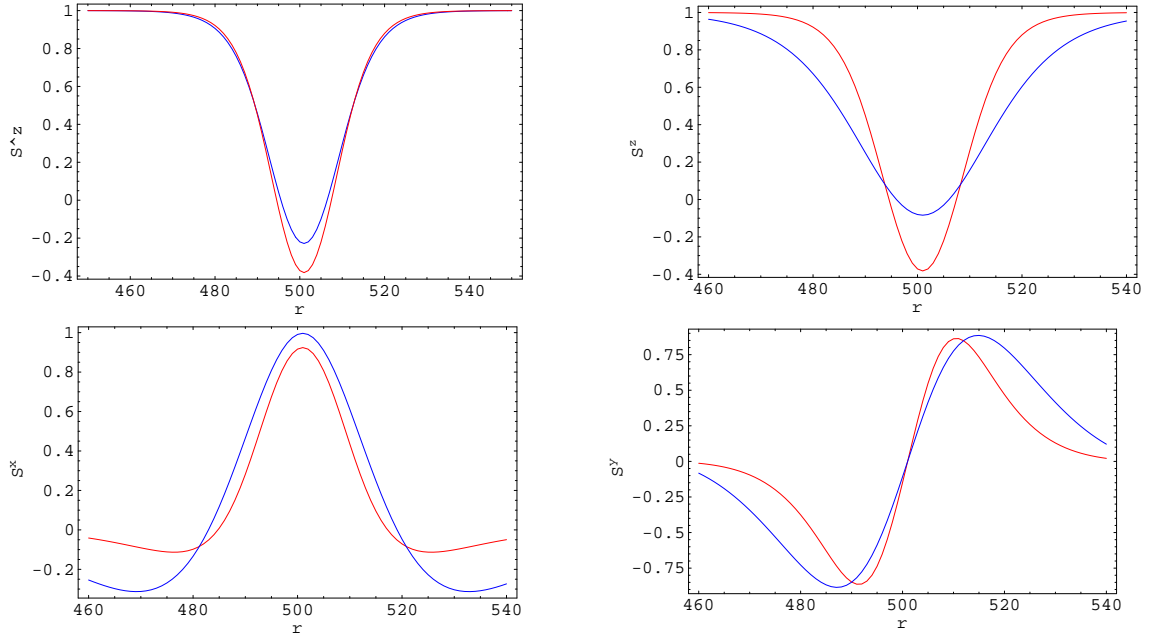


Abbildung 3.1: **Oben links:** S^z -Konfiguration in Abhängigkeit von r mit den Parametern $A = 1$, $\Gamma = 20$ (rote Linie) und $A = 0.38$, $\Gamma = 38.72$ (blaue Linie), mit Anisotropie $\beta = 0.01$

Oben rechts: Die S^z -Konfiguration für zwei Solitonen verschiedener Anisotropie $\beta = 0.01$ (rot) und $\beta = 0.001$ (blau) bei $A = 1$ und $\Gamma = 20$. **Unten:** Die S^x - und die S^y -Konfiguration für die gleichen Parameter.

3.3 Die Heisenbergkette unter Dämpfung und thermischem Rauschen

In diesem Abschnitt wollen wir die Ankopplung des Systems an ein Wärmebad modellieren, indem wir die Landau-Lifshitz-Gleichung um sowohl einen Rauschterm als auch einen Dämpfungsterm erweitern. Die Landau-Lifshitz-Gleichung werden wir mit den Störtermen zu einer stochastischen Differentialgleichung erweitern. Mit Hilfe dieser und den Erwartungswerten von Spins und Energie leiten wir schließlich das Dissipations-Fluktuations-Theorem her. Dieses stellt einen Zusammenhang zwischen den Koeffizienten der Varianzen, der Dämpfung und der Temperatur dar. Zuletzt diskutieren wir noch, inwiefern die Stärke der Temperatur und Anisotropie die Solitonstruktur beeinflussen.

3.3.1 Störterme zur Landau-Lifshitz-Gleichung

Wir erweitern nun die Landau-Lifshitz-Gleichung um *weißes Rauschen* und einen *Gilbert-Dämpfungsterm*:

$$\frac{d}{dt}\vec{S}_n + \varepsilon\vec{S}_n \times \frac{d}{dt}\vec{S}_n = -\vec{S}_n \times \left(\vec{B}_n + \vec{b}_n \right) \quad (3.22)$$

und in der Kontinuumsversion

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{S} + \varepsilon \vec{S} \times \frac{\partial}{\partial t} \vec{S} = -\vec{S} \times (\vec{B} + \vec{b}). \quad (3.23)$$

Dabei stellt der Term auf der linken Seite den Gilbert-Term mit der Stärke ε dar, während der Term auf der rechten Seite \vec{b}_n bzw. \vec{b} das Rauschen kennzeichnet. Er koppelt, genau wie das effektive Magnetfeld \vec{B}_n , multiplikativ an die Spins, deshalb spricht man hier auch von *magnetischer Kopplung* des Rauschterms an die Spins. Obwohl die Kopplung rein technisch gesehen, multiplikativ geschieht, ist es wichtig, noch zu erwähnen, dass der Rauschterm additiv zum effektiven Feld hinzukommt, was entscheidend für die zeitliche Konstanz der Spinlänge S ist. Eine weitere Konsequenz der *magnetischen Kopplung* ist die mögliche Interpretation der Terme \vec{b}_n (bzw. \vec{b}) als lokale Fluktuationen des effektiven lokalen Magnetfeldes \vec{B}_n . Ersetzt man dagegen in (3.22) $-\vec{S}_n \times \vec{b}_n$ durch einen einfachen additiven Rauschterm auf der rechten Seite \vec{b}_n , so ist die Spinlänge stochastischen Schwankungen unterworfen. Dann ist die physikalische Deutung eines additiven Rauschterms fraglich oder zumindest schwierig [20, 21].

Für die Mittelwerte und Autokorrelationsfunktionen der Rauschterme gelten folgende Relationen:

$$\langle \vec{b}_n(t) \rangle = 0 \quad (3.24a)$$

$$\langle b_m^i(t_1) b_n^j(t_2) \rangle = \sigma^2 \delta_{mn} \delta^{ij} \delta(t_1 - t_2) \quad (3.24b)$$

im diskreten Fall und

$$\langle \vec{b}(r, t) \rangle = 0 \quad (3.25a)$$

$$\langle b^i(r_1, t_1) b^j(r_2, t_2) \rangle = \sigma^2 \delta^{ij} \delta(r_1 - r_2) \delta(t_1 - t_2) \quad (3.25b)$$

in der kontinuierlichen Version des Modells. Das Rauschen bezeichnen wir demnach als *delta-korreliert* und damit als *weißes Rauschen*. Dabei ist σ jeweils eine Konstante und $\langle \dots \rangle$ bezeichnet den Mittelwert über die Realisierungen des Rauschens. Ein wesentliches Ziel dieses Abschnittes ist es, einen Zusammenhang zwischen σ und ε herzuleiten, der ein Gleichgewicht zwischen Dissipation und Fluktuation beschreibt. Dabei fordert man einen Temperaturaustausch zwischen System und Umgebung, sodass zunächst die mittlere thermische Energie des Systems ansteigt, bis sich ein Gleichgewichtszustand zwischen Dissipation und Fluktuation eingestellt hat. Dabei wollen wir uns im Folgenden auf die diskrete Kette beschränken, da diese ja Grundlage der Spindynamik-Simulationen ist, welche später beschrieben werden. Weiterhin treffen gewisse Aussagen, welche wir im diskreten Fall machen, ebenso auf den kontinuierlichen Fall zu. Physikalisch entspricht den erwähnten Störtermen in der Landau-Lifshitz-Gleichung die Ankopplung des Systems an ein Wärmebad. Die Fluktuationsterme \vec{b}_n stehen für eine Energiezufuhr vom Wärmebad ins betrachtete System, und umgekehrt beschreiben die *Gilbert-Dämpfungsterme* den Energietrans-

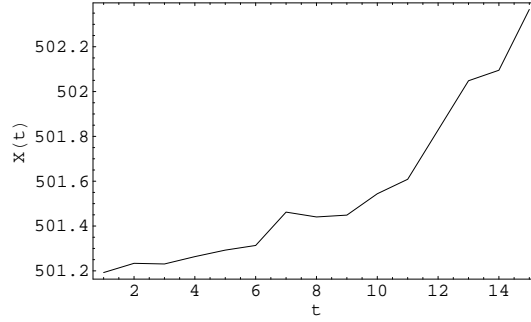


Abbildung 3.2: Position X eines Solitons als Funktion der Zeit t , mit $k_B T \neq 0$ und $\varepsilon \neq 0$

fer aus dem System heraus. Das Wärmebad selbst wiederum modelliert Wechselwirkungen des Systems mit der Umgebung, welche wir nicht explizit erfassen, wie z.B. Schwingungen der Ionen, auf denen die Spins lokalisiert sind.

Wenden wir nun $(1 - \varepsilon \vec{S}_n \times \dots)$ auf die Gleichung (3.22) an, so erhalten wir

$$\frac{d}{dt} \vec{S}_n = \frac{1}{1 + \varepsilon^2 S^2} \left\{ -\vec{S}_n \times \vec{B}_n - \vec{S}_n \times \vec{b}_n + \varepsilon \left[\vec{S}_n \left(\vec{S}_n \cdot \vec{B}_n \right) - S^2 \vec{B}_n \right] + \varepsilon \left[\vec{S}_n \left(\vec{S}_n \cdot \vec{b}_n \right) - S^2 \vec{b}_n \right] \right\}. \quad (3.26)$$

Der Vorteil einer isolierten Zeitableitung gegenüber (3.22) ist offensichtlich: zum einen drückt sie unmittelbar die Veränderung des Systemzustands als Funktion desselben und des Rauschens aus, und zum anderen eignet sie sich besser für eine Übertragung in den stochastischen Kalkül, wie wir an einer späteren Stelle sehen werden. Weiterhin ist diese Form der Landau-Lifshitz-Gleichung Grundlage für die Erzeugung der Spindynamik-Simulation. In diesem Programm wird die diskrete Landau-Lifshitz-Gleichung für eine Spinkette numerisch gelöst. Im Folgenden wollen wir darauf eingehen, wie wir *weißes Rauschen* mathematisch als stochastischen Prozess beschreiben können. Wie wir in Bild 3.3.1 sehen können, existieren zwar „Zacken“, jedoch beobachten wir keine Sprünge. Offenbar bewirken die Fluktuationen des effektiven lokalen Magnetfeldes in der Zeit stetige und gleichzeitig nirgendwo differenzierbare Bewegung des Solitonortes (welchen wir in folgenden Kapiteln definieren werden). Das ist genau eine Eigenschaft eines *Brownschen Teilchens*, dessen Trajektorie einen *random walk* beschreibt. Diese *symmetrische Irrfahrt* eines *Brownschen Teilchens* bezeichnet man als *Wiener Prozess*. Mit symmetrisch meint man, dass ein-dimensional betrachtet der Ort eines solches Teilchens in einer Zeitspanne Δt mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ um Δx wächst oder fällt, und jeder Zuwachs unabhängig vom vorhergehenden ist. Die Wahrscheinlichkeitsdichte eines *Wiener Prozesses* ist gaußverteilt, deshalb spricht man auch von *Gaußschem weißem Rauschen*. Eine hilfreiche und sehr bekannte Referenz auf diesem Gebiet ist [17]. Der formale Zusammenhang

zwischen Wiener-Prozessen und der Größe \vec{b}_n ist:

$$W_n^i(t) - W_n^i(t_0) = \frac{1}{\sigma} \int_{t_0}^t b_n^i(t') dt', \quad (3.27)$$

oder anders ausgedrückt:

$$\vec{b}_n dt = \sigma d\vec{W}_n. \quad (3.28)$$

Mit (3.25) sieht man sofort, dass

$$dW_n^i(t) dW_m^j(t) = \delta_{ij} \delta_{nm} dt \quad (3.29)$$

gilt. Wichtig zu erwähnen ist, dass die Inkremente $W_n^i(t) - W_n^i(t_0)$ Gaußsche Wahrscheinlichkeitsdichte besitzen. Die Rauschterme \vec{b}_n repräsentieren eine Überlagerung vieler stochastisch fluktuierender physikalischer Größen, welche wir nicht explizit betrachten und außerhalb des Spinsystems auf dieses einwirken (beispielsweise thermische Fluktuationen in elektromagnetischen Feldern von Elektronen und Atomkernen). Nach dem zentralen Grenzwertsatz für Summen von unabhängigen Zufallsvariablen ist die Überlagerung von fluktuierenden Größen selbst gaußverteilt. Deshalb ist die Verwendung von weißem Rauschen gerechtfertigt. Letzteres ist als Grenzfall des farbigen Rauschens zu sehen, wenn die Korrelationszeit gegen Null geht. Mit (3.29) kann man (3.26) in der für stochastische Gleichungen üblichen Inkrement-Notation schreiben:

$$d\vec{S}_n = \frac{1}{1 + \varepsilon^2 S^2} \left\{ \left[-\vec{S}_n \times \vec{B}_n + \varepsilon \left(\vec{S}_n \left(\vec{S}_n \cdot \vec{B}_n \right) - S^2 \vec{B}_n \right) \right] dt - \sigma \vec{S}_n \times d\vec{W}_n + \varepsilon \sigma \left[\vec{S}_n \left(\vec{S}_n \cdot d\vec{W}_n \right) - S^2 d\vec{W}_n \right] \right\}. \quad (3.30)$$

Nun kann man (3.30) im Prinzip als Stratonovich-Gleichung oder als Ito-Gleichung interpretieren. Aber bei physikalischen Gleichungen, welche farbiges Rauschen enthalten, nimmt man in der Regel die Stratonovich Interpretation. Das weiße Rauschen ist ein Spezialfall des farbigen Rauschens, sodass wir Gleichung (3.30) als Stratonovich-Gleichung interpretieren können [22]. Unabhängig von der Interpretation kann man immer eine Stratonovich-Gleichung in die entsprechende Ito-Version umschreiben. Dies werden wir im Folgenden tun, da sich im Ito-Kalkül die Erwartungswerte der Produkte von Zufallsgrößen, insbesondere der Produkte zwischen einer Zufallsgröße und einem Wiener-Prozess Inkrement, leichter berechnen lassen als in der Stratonovich-Form der Gleichungen. Genau diese Berechnungen werden wir im Folgenden durchführen, um das Dissipations-Fluktuations-Theorem für unser System herzuleiten.

3.3.2 Das Dissipations-Fluktuations-Theorem für die Heisenbergkette

Der stochastische Anteil von (3.30) kann geschrieben werden als

$$\frac{1}{1 + \varepsilon^2 S^2} \left\{ -\sigma \vec{S}_n \times d\vec{W}_n + \varepsilon \sigma \left[\vec{S}_n \left(\vec{S}_n \cdot d\vec{W}_n \right) - S^2 d\vec{W}_n \right] \right\} = \sigma C_n d\vec{W}_n, \quad (3.31)$$

mit der Matrix

$$C_n := \frac{1}{1 + \varepsilon^2 S^2} \begin{pmatrix} -\varepsilon \left((S_n^y)^2 + (S_n^z)^2 \right) & \varepsilon S_n^x S_n^y + S_n^z & \varepsilon S_n^x S_n^z - S_n^y \\ \varepsilon S_n^x S_n^y - S_n^z & -\varepsilon \left((S_n^x)^2 + (S_n^z)^2 \right) & \varepsilon S_n^y S_n^z + S_n^x \\ \varepsilon S_n^z S_n^x + S_n^y & \varepsilon S_n^z S_n^y - S_n^x & -\varepsilon \left((S_n^x)^2 + (S_n^y)^2 \right) \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

Die Gleichung (3.30) hat nun die allgemeine Form:

$$dx = \vec{A}(\vec{x}, t) dt + B(\vec{x}, t) dW(t), \quad (3.33)$$

wobei A ein Vektor und B eine Matrix darstellen. Dann lautet analog zu [17] die dazu korrespondierende Itoform:

$$dx = \vec{A}(\vec{x}, t) dt + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k=x,y,z} B_{kj} \partial_k B_{ij} \vec{e}_i. \quad (3.34)$$

In unserem Fall tritt dann bei der Ito-Fassung von (3.31) der Zusatzterm

$$\frac{\sigma^2}{2} \sum_{i,j,k=x,y,z} C_n^{kj} \partial_k C_n^{ij} \vec{e}_i = -\sigma^2 \frac{1}{1 + \varepsilon^2 S^2} \vec{S}_n \quad (3.35)$$

auf, wobei ∂_k die Ableitung nach der k -ten Spinkomponente bezeichnet.

Die Ito-Version von (3.30) schreibt sich dann folglich:

$$d\vec{S}_n = \frac{1}{1 + \varepsilon^2 S^2} \left\{ \left[-\vec{S}_n \times \vec{B}_n + \varepsilon \left(\vec{S}_n \left(\vec{S}_n \cdot \vec{B}_n \right) - S^2 \vec{B}_n \right) - \sigma^2 \vec{S}_n \right] dt - \sigma \vec{S}_n \times d\vec{W}_n + \varepsilon \sigma \left[\vec{S}_n \left(\vec{S}_n \cdot d\vec{W}_n \right) - S^2 d\vec{W}_n \right] \right\}. \quad (3.36)$$

Da wir uns für die mittlere thermische Energie in einer Spinkette interessieren, müssen wir ein Ensemble verschiedener Spinketten betrachten.

Die Orientierung des Spins \vec{S}_n im Raum ist durch den Polarwinkel Θ_n und den Azimutalwinkel Φ_n festgelegt, wobei die Polarachse jeweils in Richtung des Spins \vec{S}_{n-1} gelegt wird und die Achsenwahl des ersten Spins willkürlicher Natur ist. Dann gilt $S_{n-1} S_n = S^2 \cos \Theta_n$.

Nun müssen wir das effektive Feld

$$\vec{B}_n = -J \left(\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1} + \beta S_n^z \hat{e}_{z,n} \right) \quad (3.37)$$

im neuen Koordinatensystem ausdrücken: In der neuen Basis $\vec{S}_n = S \vec{e}_{3,n}$ lässt sich S_n^z offenbar als $\vec{S}_n \vec{e}_{3,n} = S$ schreiben. Um jedoch \vec{e}_3 im neuen Koordinatensystem auszudrücken, bedarf es etwas mehr Mühe. Um vom alten ins neue Koordinatensystem zu

3.3. DIE HEISENBERGKETTE UNTER DÄMPFUNG UND THERMISCHEM RAUSCHEN 31

gelangen, müssen wir z.B. die \vec{e}_3 -Achse auf die $e_{3,n}$ -Achse abbilden: wir drehen das alte Koordinatensystem um den Winkel Θ um die y -Achse, anschließend drehen wir das Ganze um Φ um die soeben erhaltene z -Achse. Bezeichnen wir die erste Drehung mit D_1 und die zweite mit D_2 , ausgedrückt durch zugehörige Drehmatrizen, so gilt für einen beliebigen Vektor X' im neuen Koordinatensystem $D_2 D_1 X = X'$. Details dieser Rechnung finden sich im Anhang (B.1). Nach (B.1) erhält man für \vec{e}_3 :

$$\vec{e}_3 = -\vec{e}_{1,n} \sin \Theta + \vec{e}_{3,n} \cos \Theta. \quad (3.38)$$

Nun kann man (3.37) folgendermaßen schreiben:

$$\vec{B}_n = -J \left[\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1} + \beta S (-\vec{e}_{1,n} \sin \Theta + \vec{e}_{3,n} \cos \Theta) \right]. \quad (3.39)$$

Wir haben Θ als den Winkel zwischen der festen Anisotropieachse und dem Spinvektor \vec{S}_n deklariert. Deshalb folgt für den Winkel Ψ_n , den \vec{S}_n mit der festen Anisotropieachse einschließt:

$$\Theta := \Psi_n = \Psi_0 + \sum_{i=2}^n \Theta_i. \quad (3.40)$$

Dabei ist Θ_2 der Winkel zwischen dem ersten und zweiten Spin, bzw. Θ_n der Winkel zwischen dem $(n-1)$ -ten und n -ten Spin. Damit kann man die Hamiltonfunktion (3.2) in der Form

$$\begin{aligned} H &= -J \sum_{n=2}^N \left(S^2 \cos \Theta_n + \frac{\beta}{2} \underbrace{S^2 (-\vec{e}_{1,n} \sin \Psi_n + \vec{e}_{3,n} \cos \Psi_n e_{z,n}^{\wedge})^2}_{(S_n^z)^2} \right) \\ &= JS^2 \sum_{n=2}^N \left(\cos \Theta_n + \frac{\beta}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.41)$$

schreiben, und für die Zustandssumme gilt mit $\alpha = (k_B T)^{-1}$:

$$\begin{aligned} Z &= \int_0^\pi \dots \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} \exp \left[\alpha JS^2 \sum_{n=2}^N \left(\cos \Theta_n + \frac{\beta}{2} \right) \right] \prod_{n=1}^N (S^2 \sin \Theta_n d\Theta_n d\Phi_n) = \\ &= 4\pi S^2 \prod_{n=2}^N \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \exp \left(\alpha JS^2 \cos \Theta_n + \alpha JS^2 \frac{\beta}{2} \right) S^2 \sin \Theta_n d\Theta_n d\Phi_n = \\ &= S^2 (4\pi)^N \left[\frac{\sinh(\alpha JS^2)}{\alpha J} \exp(\alpha JS^2 \frac{\beta}{2}) \right]^{N-1}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Hieraus folgt der Zusammenhang

$$\langle E \rangle_{kan} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} \ln Z = (N-1) \left[\frac{1}{\alpha} - \frac{JS^2 \beta}{2} - JS^2 \coth(\alpha JS^2) \right], \quad (3.43)$$

wobei $\langle \dots \rangle_{kan}$, den Mittelwert über das kanonische Ensemble darstellt, sowie

$$\text{Var}(E) = \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha} \right)^2 \ln Z = (N-1) \left[\frac{1}{\alpha^2} + (JS^2)^2 \left(1 - \coth(\alpha JS^2)^2 \right) \right]. \quad (3.44)$$

Im Fall $k_B T \ll JS^2$ erhalten wir

$$\langle E \rangle_{kan} \approx (N-1) \left[-JS^2 \left(1 + \frac{\beta}{2} \right) + k_B T \right] \quad (3.45)$$

und damit

$$\text{Var}(E) \approx (N-1) (k_B T)^2. \quad (3.46)$$

Da $-JS^2(1 + \beta)(N-1)$ der Grundzustandsenergie entspricht, folgt sofort, dass die mittlere thermische Energie pro Kettenglied im Grenzfall $k_B T \ll JS^2$ gleich $k_B T$ ist. Die folgenden Mittelwerte werden im Anschluss benötigt:

$$\begin{aligned} & \langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \rangle_{kan} = \\ &= \frac{1}{Z} \int_0^\pi \dots \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} S^2 \cos \Theta_{n+1} \exp \left[\alpha JS^2 \sum_{i=2}^N (\cos \Theta_i + \frac{\beta}{2}) \right] \prod_{i=1}^N (S^2 \sin \Theta_i d\Theta_i d\Phi_n) \\ &= \frac{1}{Z} 4\pi S^4 \left[\frac{\sinh(\beta JS^2)}{\beta J} \right]^{N-2} (4\pi)^{N-2} \exp(\alpha JS^2 \beta/2)^{N-1} \cdot \\ & \cdot \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \cos \Theta_{n+1} S^2 \exp(\alpha JS^2 \cos \Theta_{n+1}) \sin \Theta_{n+1} d\Theta_{n+1} d\Phi_{n+1} \\ &= \frac{\alpha JS^2}{2 \sinh(\alpha JS^2)} \frac{1}{(\alpha JS^2)^2} \left[2\alpha JS^2 \cosh(\alpha JS^2) - 2 \sinh(\alpha JS^2) \right] \\ &= S^2 \left[\coth \left(\frac{JS^2}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{JS^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Die Rechnung für die restlichen Mittelwerte verläuft analog, die Integrale können mit Hilfe von Mathematica [56] ohne weiteres bestimmt werden und, da alle Mittelwerte sich in der Form

$$\left\langle F(\vec{q}, \vec{p}) \right\rangle_{kan} = \frac{1}{Z} \int \dots \int F(\vec{q}, \vec{p}) e^{-\alpha H(\vec{q}, \vec{p})} d^{3N} q d^{3N} p \quad (3.48)$$

berechnen lassen, kürzen sich die dem anisotropen Anteil der Hamiltonfunktion entsprechenden Faktoren $\exp(\alpha JS^2 \beta)$ unabhängig von der Form von $F(\vec{q}, \vec{p})$ weg:

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \right)^2 \right\rangle_{kan} &= S^4 \left[1 + 2 \left(\frac{k_B T}{JS^2} \right)^2 - 2 \frac{k_B T}{JS^2} \coth \left(\frac{JS^2}{k_B T} \right) \right] \\ \left\langle \left(\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \right) \left(\vec{S}_{n+1} \cdot \vec{S}_{n+2} \right) \right\rangle_{kan} &= S^4 \left[\coth \left(\frac{JS^2}{k_B T} \right) - \frac{k_B T}{JS^2} \right]^2 = \langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \rangle_{kan}^2 \\ S^2 \langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+2} \rangle_{kan} &= \langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \rangle_{kan}^2. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Um das Ergebnis der letzten Zeile von (3.49) zu erhalten, sind wieder geometrische Betrachtungen von Nöten. Ebenso wie bei den Transformationen (B.3) betrachten

wir den Spin $S_{n+1}^{\vec{}}$ gegenüber \vec{S}_n um die Winkel Θ_{n+1} bzw. Φ_{n+1} gedreht, wobei die Polarachse durch den Spin \vec{S}_n festgelegt wird. Dabei wählen wir nur den Einheitsvektor $\vec{e}_{3,n} := \vec{S}_n/S$ in Richtung dieser Polarachse und ergänzen $\vec{e}_{1,n}$ und $\vec{e}_{2,n}$ beliebig, sodass sich ein orthonormales Rechtssystem (ON-System) ergibt. Damit legen wir die Nullrichtung für den Azimutalwinkel Φ_n bei $\vec{e}_{1,n}$ fest. Wir interessieren uns für die resultierende Bewegung, die nötig ist, das Dreibein $\{e_{1,n}^{\vec{}}, e_{2,n}^{\vec{}}, e_{3,n}^{\vec{}}\}$ auf das Dreibein $\{e_{1,n+2}^{\vec{}}, e_{2,n+2}^{\vec{}}, e_{3,n+2}^{\vec{}}\}$ abzubilden. Verwendet man diese Darstellung in (B.7), so erhält man letztendlich:

$$\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+2} = S^2 (\sin \Theta_{n+1} \sin \Theta_{n+2} \sin \Phi_{n+2} + \cos \Theta_{n+1} \cos \Theta_{n+2}). \quad (3.50)$$

Hieraus ergibt sich der Mittelwert in (3.49), indem man (3.50) in (3.48) einsetzt und integriert.

Für die stochastische Zeitentwicklung der Gesamtenergie $E = -J \sum_{n=1}^{N-1} (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + \frac{\beta}{2} S^2)$ gilt im Ito-Kalkül

$$dE = -J \sum_{n=1}^{N-1} \left[\vec{S}_{n+1} \cdot d\vec{S}_n + \vec{S}_n \cdot d\vec{S}_{n+1} + d\vec{S}_n \cdot d\vec{S}_{n+1} \right]. \quad (3.51)$$

Das Differential des anisotropen Anteils fällt hier wegen (3.38) weg (da $S^2\beta$ eine Konstante ist). Mit der Beziehung

$$d\vec{W}_i(t)d\vec{W}_j(t) = \delta_{ij}dt; \quad d\vec{W}_i(t)dt = 0 \quad (3.52)$$

und der Tatsache, dass Ordnungen höher als N in den Differentialen dt und dW_i verschwinden, erhalten wir unter Einbeziehen von (B.8) nach einigen Rechenschritten, die im Anhang B.2 zu finden sind, den Erwartungswert der Energie:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle E \rangle = & -\frac{J}{1 + \varepsilon^2 S^2} \left\{ \sum_{n=1}^{N-1} \left[2J\varepsilon S^4 + \left\langle S^3 \beta (\sin \Psi_n \sin \Theta_{n+1} \sin \Phi_{n+1} + \sin \Psi_{n+1} \cdot \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. \sin \Theta_{n+1} + \varepsilon S \sin \Theta_{n+1} \sin \Psi_n \cos \Phi_{n+1}) \right\rangle - 2\sigma^2 \langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \rangle - 2J\varepsilon \left\langle \left(\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \right)^2 \right\rangle \right] - \\ & \left. - 2J\varepsilon \sum_{n=1}^{N-2} \left[\left\langle \left(\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \right) \left(\vec{S}_{n+1} \cdot \vec{S}_{n+2} \right) \right\rangle - S^2 \langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+2} \rangle \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Der hier ermittelte Mittelwert $\langle \dots \rangle$ wird über die Realisierungen des Rauschens berechnet. Dieser Mittelwert unterscheidet sich im Allgemeinen von dem Ensemble-Mittelwert $\langle \dots \rangle_{kan}$. Nur im thermischen Gleichgewicht mit $d\langle E \rangle/dt = 0$ gilt die Gleichheit zwischen Realisierungs- und Ensemble-Mittelwert. Deswegen ergibt sich

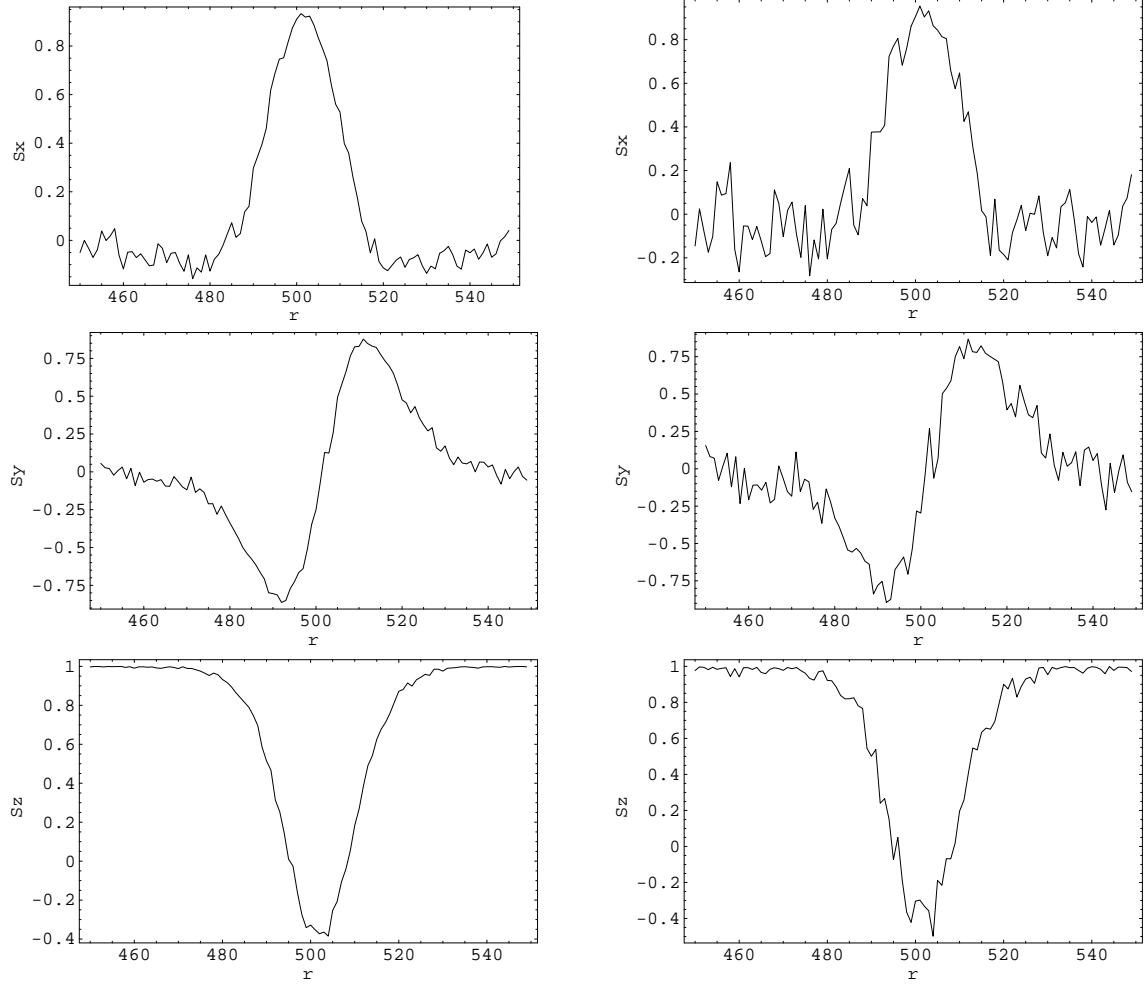


Abbildung 3.3: Die \vec{S} -Konfigurationen eines Solitons (komponentenweise von oben nach unten gelesen) nach $t = 25$ für $A = 1, \Gamma = 20, \beta = 0.001, \varepsilon = 0.01$. **Links** verwenden wir Rauschen bei $k_B T = 0.01$ bzw. **rechts**: bei $k_B T = 0.1$.

für den Mittelwert des anisotropen Anteils:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle S^3 \beta (\sin \Psi_n \sin \Theta_{n+1} \sin \Phi_{n+1} + \sin \Psi_{n+1} \sin \Theta_{n+1} + \varepsilon S \sin \Theta_{n+1} \sin \Psi_n \cos \Phi_{n+1}) \right\rangle_{kan} \\
 &= \frac{1}{Z} \int_0^\pi \dots \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} (-S^3 \beta) \sin \Psi_{n+1} \sin \Theta_{n+1} \exp \left[\alpha J S^2 \sum_{i=2}^N (\cos \Theta_i + \beta) \right] \cdot \\
 & \cdot \prod_{i=1}^N (S^2 \sin \Theta_i d\Theta_i d\Phi_i) \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

Dieses Integral vollständig zu bestimmen ist schwierig, sowohl analytisch, als auch numerisch, vor allem wegen des Ausdrucks $\sin \Psi_n$, welcher sich durch alle N Integrale zieht. Dieser spaltet sich nach jeder Integration in einen Sinus- und einen Kosi-

nusterm (jeweils multipliziert mit Koeffizienten und den restlichen Integralen) auf. Wenn man nach jeder Integration entsprechende Terme zusammenfasst, erkennt man bald eine Rekursionsformel, die leider nicht allgemein ausgewertet werden kann. Die Koeffizienten, bestehend aus komplizierten Ausdrücken, wie Bessel-Funktion und hyperbolischen Funktionen, kann man durch eine obere Grenze abschätzen, indem man den größten verwendeten Wert ($k_B T = 0.1$) einsetzt. Nach ein paar Gliedern sieht man sodann, dass die Koeffizienten viel kleiner als Eins werden und mit zunehmender Anzahl von Integrationen gegen Null streben. Wegen der hohen Anzahl der Integrale, nämlich $N=1000$, ist der Mittelwerte des anisotropen Anteils (3.54) sicher Null.

Ein weiteres Argument für das Verschwinden des anisotropen Anteils ist die Tatsache, dass weit vom Solitonzentrum entfernt $\sin \Psi_N = 0$ ist, da hier die Spins sich im Grundzustand befinden. Weiterhin sind in diesem Bereich die Änderungen $d\Theta_n$ sehr gering. Also ist der Energiemittelwert von der Form:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle E \rangle &= -\frac{J}{1+\varepsilon^2 S^2} \left\{ \sum_{n=1}^{N-1} \left[2J\varepsilon S^4 - 2\sigma^2 \langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \rangle - 2J\varepsilon \langle (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1})^2 \rangle \right] - \right. \\ &\quad \left. 2J\varepsilon \sum_{n=1}^{N-2} \left[\langle (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}) (\vec{S}_{n+1} \cdot \vec{S}_{n+2}) \rangle - S^2 \langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+2} \rangle \right] \right\}. \quad (3.55) \end{aligned}$$

Wegen der erwähnten Gleichheit von $\langle \dots \rangle$ und $\langle \dots \rangle_{kan}$ im Gleichgewichtszustand, d.h. $\frac{d}{dt} \langle E \rangle = 0$, sind die Erwartungswerte auf der rechten Seite von (B.14) durch (3.49) gegeben, weshalb die zweite Summe in (B.14) verschwindet. Da die Ergebnisse (3.49) von n unabhängig sind, können wir schließlich schreiben:

$$\sigma^2 = J\varepsilon \frac{S^4 - \langle (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1})^2 \rangle_{kan}}{\langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \rangle_{kan}} = 2\varepsilon k_B T. \quad (3.56)$$

Das bedeutet, dass wir in der Spindynamik-Simulation bei gegebenem ε diesen Wert von σ^2 setzen müssen, um die Ankopplung des Systems an ein Wärmebad zu modellieren. Nur so wird man der Forderung des Energiegleichgewichts gerecht. Nun wollen wir ein paar Aussagen über die Stärke der Störungen treffen.

3.3.3 Abhängigkeit der Solitonstruktur von Temperatur und Anisotropie

Abbildung 3.3 zeigt den Verlauf des Solitons bei unterschiedlich starkem Rauschen. Ein zu starkes Rauschen würde die Spinkonfiguration zu sehr dominieren, sodass schließlich die kohärente Anregung an sich im Rauschen untergehen würde. Ebenso würde auch eine zu große Dämpfung das Soliton frühzeitig zerstören. Da eine Stabilisierung der solitären Anregung durch topologische Erhaltungsgrößen, wie man sie etwa von Kinks kennt, in unserem System nicht gegeben ist, kann man bei starken Störungen die adiabatische Approximation nicht mehr anwenden. Deswegen

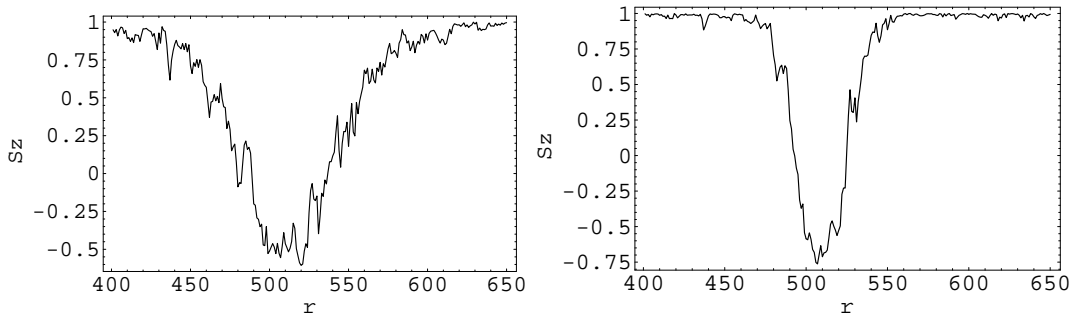


Abbildung 3.4: S^z -Konfiguration eines Solitons nach $t = 300$ für verschieden Anisotropien. (**Links:**) $\beta = 0.001$ und (**Rechts:**) $\beta = 0.01$. Die gemeinsamen Parameter sind $A = 1.5$, $\Gamma = 40$, $\varepsilon = 0.01$, $k_B T = 0.01$.

beschränken wir uns auf kleine Störungen, d.h. $\varepsilon \ll 1$ und $k_B T \ll 1$.

Nun werden wir noch den Einfluss der Anisotropie auf ein Soliton untersuchen. Aus Abbildung 3.4 kann man sehen, dass bei einer höheren Anisotropie die Wechselwirkung der S^z -Komponenten verstärkt ist, und damit der Puls schmaler und langgezogen ist. Weiterhin können wir aus 3.4 sehen, dass der Puls bei höherem β gegenüber dem Rauschen stabiler ist als bei kleinen Werten der Anisotropie. Diese Stabilisierung kann auch im Hintergrund von (3.17) erklären: bei einer gegebenen thermischen Störung des Systems geht die Energie der solitären Anregung mit der Größe der Anisotropie einher und wird damit erhöht.

3.4 Mögliche Definitionen des Solitonortes

In diesem Kapitel wollen wir der Frage nachgehen, wie wir die Position des Solitons festlegen können. Dazu stellen wir verschiedene Methoden vor, die Solitonposition X festzulegen. Wir werden sehen, dass jede Methode ihre Berechtigung hat, da $\langle X(t) \rangle$ bei allen Methoden übereinstimmt. Jedoch ergeben sich im Falle von thermischen Fluktuationen unterschiedliche Ergebnisse in den Varianzen. Anhand dieser Ergebnisse werden wir eine der Ortsdefinitionen ausschließen. Dann stellen wir die Bestimmungsmethode für X heraus, die sich für spätere Berechnungen bei Betrachtung mittlerer und langer Zeitskalen am besten eignet. Auf die Gründe dafür gehen wir am Ende dieses Unterabschnitts ein. Weiterhin bestimmen wir auch für jede mögliche Definition der Variablen X deren Mittelwert und Varianz für kurze Zeitskalen. Innerhalb kurzer Zeitskalen sind Einwirkungen der Dämpfungs- und Fluktuationseffekte auf die Solitonstruktur vernachlässigbar. Daher ist es gerechtfertigt, zeitliche Veränderungen von A und Γ unberücksichtigt zu lassen und diese als konstant anzunehmen. Da die Form des Solitons durch A und Γ bestimmt wird, bleibt die Solitonform unveränderlich. Die in diesem Unterabschnitt getroffenen Vorhersagen werden schließlich mit Ergebnissen aus Spindynamik-Simulationen verglichen und diskutiert.

3.4.1 Kollektive Ortsvariable 1

Wir nutzen aus, dass die Solitonposition $X(t)$ eine symmetrische Abweichung vom Grundzustand $(S^x, S^y, S^z) = (0, 0, S)$ der Kette darstellt, und daher $S - S^z$ ein symmetrisch um die Solitonposition lokalisierter Puls ist. Der Erwartungswert dieser Größe berechnet sich dann genauso wie der Schwerpunkt in der Mechanik:

$$X := \frac{\sum_{n=1}^N n (S - S_n^z)}{\sum_{m=1}^N (S - S_m^z)}. \quad (3.57)$$

Leitet man diesen Ausdruck nach der Zeit ab, so erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= -\frac{\sum_{n=1}^N n \dot{S}_n^z}{\sum_{m=1}^N (S - S_m^z)} + \frac{\sum_{n=1}^N n (S - S_n^z) \sum_{m=1}^N \dot{S}_m^z}{\left[\sum_{m=1}^N (S - S_m^z) \right]^2} = \\ &= \frac{1}{\sum_{m=1}^N (S - S_m^z)} \left[X \sum_{m=1}^N \dot{S}_m^z - \sum_{n=1}^N n \dot{S}_n^z \right] = \\ &= \frac{1}{\sum_{m=1}^N (S - S_m^z)} \sum_{n=1}^N (X - n) \dot{S}_n^z. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Nun ersetzen wir \dot{S}_n^z mit \dot{S}_n^z aus der Landau-Lifshitz-Gleichung (3.7):

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\sum_{n=1}^N (X - n) \left[-\vec{S}_n \times \vec{B}_n \right]^z}{\sum_{m=1}^N (S - S_m^z)} + \frac{\sum_{n=1}^N (X - n) \left[-\vec{S}_n \times \vec{b}_n \right]^z}{\sum_{m=1}^N (S - S_m^z)}, \quad (3.59)$$

wobei die Anisotropie innerhalb von \vec{B}_n in der z-Komponente des Kreuzprodukts verschwindet:

$$\begin{aligned} \left[-\vec{S}_n \times \vec{B}_n \right]^z &= \left[\vec{S}_n \times J \left(\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1} + \beta S_n^z \hat{e}_z \right) \right]^z \\ &= \left[\vec{S}_n \times J(\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1}) \right]^z + \underbrace{J\beta \left[\vec{S}_n \times S_n^z \hat{e}_z \right]^z}_{=0}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

In den Schritten, die von (3.57) zu (3.59) führen, haben wir alle kollektiven Variablen außer der Position X als konstant angenommen. Weitere Annahmen sind natürlich, dass die Kette lang genug ist, um von Randeffekten abzusehen. Schließlich haben wir ja auch bei der Kontinuumsnäherung (2.22) das Integral auf die gesamte reelle Achse $\pm\infty$ ausgedehnt. Die Solitonkonfiguration (3.15) hängt also nur über $r - X$,

also dem kontinuierlichen Analogon von $n - X$ von X ab. Der linke Bruch in (3.59) stellt den intrinsischen Anteil der Solitongeschwindigkeit dar, der rechte Bruch mit den Rauschanteilen ist der stochastische Anteil. Der intrinsische Anteil rührt von der ferromagnetischen Wechselwirkung der Spins her. Wie wir später sehen werden, beeinflusst der stochastische Anteil im Mittel die Position nicht. Gleichung (3.59) schreibt sich dann

$$\frac{dX}{dt} = F^{in} + F^{st}(t) \quad (3.61)$$

und wird durch $X(t) = X_{in}(t) + X_{st}(t)$ gelöst, wobei F^{in} und F^{st} den intrinsischen bzw. den stochastischen Anteil der Solitongeschwindigkeit (3.59) bezeichnen. Zunächst berechnen wir den intrinsischen Anteil. Dazu benutzen wir wieder die Kontinuumsnäherung:

$$\begin{aligned} \frac{dX_{in}}{dt} = F^{in} &= \frac{\sum_{n=1}^N (X - n) \left[-\vec{S}_n \times \vec{B}_n \right]^z}{\sum_{m=1}^N (S - S_m^z)} \approx -JS \frac{\int \xi \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(1 - \Psi^2) \frac{d\Phi}{d\xi} \right] dr}{\int (1 - \Psi) d\xi} = \\ &= JS \frac{\int (1 - \Psi^2(\xi)) \frac{d\Phi}{d\xi} d\xi}{\int (1 - \Psi(\xi)) d\xi} \stackrel{(A.6)}{=} \frac{2JS}{\Gamma} \sqrt{\frac{2-A}{A}} + \dot{X}(0) (= 0). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Das ist genau die Geschwindigkeit des Solitons, wie sie bereits bei der Einsolitonenlösung (3.15) bzw. (3.16) bestimmt wurde. Der intrinsische Anteil ist also konstant. Für den stochastischen Anteil erhält man

$$X_{st}(t) = \int_0^t F^{st}(t') dt'. \quad (3.63)$$

Eine weitere Größe, die für uns von Interesse ist, ist die Varianz von $X(t)$ (siehe Abb.(3.5)), die sich als

$$\begin{aligned} \text{Var} [X(t)] &= \left\langle [X(t) - \langle X(t) \rangle]^2 \right\rangle = \left\langle [X_{in}(t) + X_{st}(t) - \langle X_{in}(t) + X_{st}(t) \rangle]^2 \right\rangle = \\ &= \left\langle [(X_{in}(t) - \langle X_{in}(t) \rangle) + (X_{st}(t) - \langle X_{st}(t) \rangle)]^2 \right\rangle = \\ &= \left\langle [X_{st}(t) - \langle X_{st}(t) \rangle]^2 \right\rangle \end{aligned} \quad (3.64)$$

berechnet.

Wie man in (3.64) sieht, trägt nur der fluktuierende Anteil X_{st} der Position zur Varianz bei. Den Erwartungswert können wir wie folgt schreiben:

$$\langle X_{st}(t) \rangle = \int_0^t \langle F^{st}(t') \rangle dt', \quad (3.65)$$

sodass also der Erwartungswert von F^{st} zu berechnen ist.

Da wir eine starre Solitonstruktur angenommen haben, ist der Nenner in (3.59) auch bei stochastischen Fluktuationen der Position konstant:

$$\langle F^{st}(t) \rangle = \frac{1}{\sum_{m=1}^N (S - S_m^z)} \left\langle \sum_{n=1}^N (n - X(t)) [S_n^x(t)b_n^y(t) - S_n^y(t)b_n^x(t)] \right\rangle. \quad (3.66)$$

Nun schreiben wir die Gleichung (3.66) wieder mit Hilfe von Wiener-Prozessen um, wobei wir den konstanten Nenner mit M abkürzen:

$$dX = F^{in}dt + \sigma \frac{1}{M} \sum_{n=1}^N (n - X(t)) [S_n^x(t)dW_n^y(t) - S_n^y(t)dW_n^x(t)]. \quad (3.67)$$

Diese Gleichung ist als Stratonovich-Gleichung zu interpretieren, da wir aus genannten Gründen die Bewegungsgleichung für die Spins als Stratonovich-Gleichung gedeutet haben. Wir können die zugehörige Ito-Gleichung erhalten, indem wir wieder analog zu [17] vorgehen: Gleichung (3.67) ist allgemein von der Form einer eindimensionalen Stratonovich-Gleichung:

$$dx = a + cdW(t), \quad (3.68)$$

die sich in Itoform schreiben lässt als

$$dx = \left[a + \frac{1}{2}c\partial_x c \right] dt + cdW(t). \quad (3.69)$$

Wenn wir den stochastischen Anteil von (3.67) in der Form

$$\sigma \sum_{n=1}^N (c_n^x dW_n^x + c_n^y dW_n^y) \quad (3.70)$$

schreiben, wobei

$$c_n^x := \frac{1}{M}(X - n)S_n^y, \quad c_n^y = -\frac{1}{M}(X - n)S_n^x, \quad (3.71)$$

dann ergibt sich für den Zusatzterm:

$$\sigma^2 \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2}c_n^x \frac{\partial c_n^x}{\partial X} + \frac{1}{2}c_n^y \frac{\partial c_n^y}{\partial X} \right] dt = \frac{\sigma^2}{4} \sum_{n=1}^N \frac{\partial}{\partial X} \left[(c_n^x)^2 + (c_n^y)^2 \right] dt. \quad (3.72)$$

Um diesen auszuwerten, wechseln wir in die Kontinuumsbeschreibung und beachten noch, dass $\partial_X = -\partial_r = -\partial_\xi$ ist. Der Zusatzterm schreibt sich dann

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \left\{ \int \left(\frac{\sigma}{M} \right)^2 \frac{\partial}{\partial X} [(X - r)^2 ((S^y)^2 + (S^x)^2)] dr \right\} dt = \\ & = -\frac{S^2}{4} \left\{ \int \left(\frac{\sigma}{M} \right)^2 \frac{\partial}{\partial \xi} [\xi^2 (1 - \Psi^2)] dr \right\} dt \\ & = -\frac{dt}{4} \left(\frac{\sigma}{M} \right)^2 \lim_{L \rightarrow \infty} L^2 [S^2 - (S^z(\xi))^2]_{\xi=-L}^{\xi=+L} = 0, \end{aligned} \quad (3.73)$$

da Ψ exponentiell gegen die Eins konvergiert und damit den quadratischen Anteil L^2 überkompensiert. Das Verschwinden des Zusatzterms bedeutet, dass wir die Rauschterme \vec{b}_n und X als voneinander stochastisch unabhängig behandeln können. Das hat wiederum Auswirkung auf (3.65) und (3.66), welche die Spinfelder \vec{S}_n enthalten. Die Spins enthalten aber X , da ihr Argument von der Form $r-X$ ist. Die Solitonposition X ist hier jedoch als stochastisch fluktuierende Größe angenommen (der einzige Effekt des Rauschens, den wir in der adiabatischen Näherung berücksichtigen). Die Fluktuationen von X bedeuten, dass auch die Werte der Spinkomponenten fluktuieren. Die Spinkomponenten koppeln multiplikativ an die Rauschterme. Der Erwartungswert eines Produktes ist aber im allgemeinen nicht gleich dem Produkt der Erwartungswerte der einzelnen Faktoren. Gleichheit gilt hingegen, wenn die Faktoren stochastisch unabhängig sind. Da die Fluktuationen der Spinfelder einzig durch X bestimmt werden, und X und b_n unabhängig sind, folgt, dass der Mittelwert von F_{st} verschwindet, da der Mittelwert der b_n verschwindet. Dann können wir (3.66) schreiben als

$$\begin{aligned} \langle F^{st}(t) \rangle &= \frac{1}{\sum_{m=1}^N (S - S_m^z)} \sum_{n=1}^N (n - X(t)) S_n^x(t) \langle b_n^y(t) \rangle - (n - X(t)) S_n^y(t) \langle b_n^x(t) \rangle \\ &= 0. \end{aligned} \tag{3.74}$$

Daraus folgt für (3.65), dass $\langle X_{st} \rangle = 0$ (siehe dazu Abbildung 3.5), und damit für (3.64):

$$\begin{aligned} \text{Var}[X(t)] &= \langle (X_2(t))^2 \rangle \\ &= \langle X_2(t_1) X_2(t_2) \rangle = \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \langle F^{st}(t'_1) F^{st}(t'_2) \rangle dt'_1 dt'_2. \end{aligned} \tag{3.75}$$

Setzt man den expliziten Ausdruck für F^{st} in (3.75) ein und beachtet noch, dass $dW_n dW_m = \delta_{n,m}$, dann erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{\sigma^2}{M^2} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \left\langle \sum_{m,n=1}^N (X(t'_1) - n)(X(t'_2) - m) S_n^x(t'_1) S_m^x(t'_2) b_n^y(t'_1) b_m^y(t'_2) + \right. \\ \left. + (X(t'_1) - n)(X(t'_2) - m) S_n^y(t'_1) S_m^y(t'_2) b_n^x(t'_1) b_m^x(t'_2) \right\rangle dt'_1 dt'_2. \end{aligned} \tag{3.76}$$

Mit der stochastischen Unabhängigkeit von Rauschen und X können wir (3.76) in

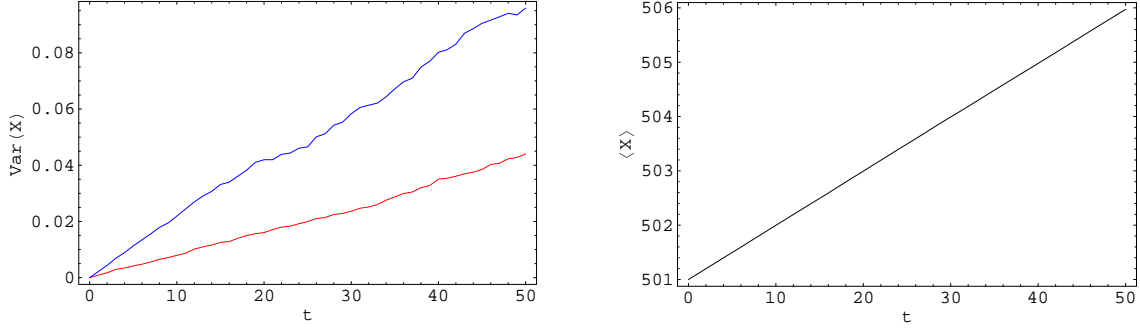


Abbildung 3.5: (**Links:**) die Ortsvarianz und (**Rechts:**) der Mittelwert $\langle X(t) \rangle$ jeweils unter Benutzung von (3.57) in Abhängigkeit von t bei verschiedenen Anisotropien: $\beta = 0.01$ (rote Linie) und $\beta = 0.001$ (blaue Linie). Die Mittelwerte $\langle X(t) \rangle$ bei den verschiedenen Anisotropien fallen zusammen und beide Diagramme stellen die Simulationsergebnisse dar, mit den konstanten Parametern $\Gamma = 20$, $A = 1$, $k_B T = 0.01$, $\varepsilon = 0.01$.

Produkte von Erwartungswerten aufspalten

$$\begin{aligned} & \frac{\sigma^2}{M^2} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \sum_{m,n=1}^N \langle (X(t'_1) - n)(X(t'_2) - m) S_n^x(t'_1) S_m^x(t'_2) \rangle \langle b_n^y(t'_1) b_m^y(t'_2) \rangle dt'_1 dt'_2 + \\ & + \frac{\sigma^2}{M^2} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \sum_{m,n=1}^N \langle (X(t'_1) - n)(X(t'_2) - m) S_n^y(t'_1) S_m^y(t'_2) \rangle \langle b_n^x(t'_1) b_m^x(t'_2) \rangle dt'_1 dt'_2. \end{aligned} \quad (3.77)$$

Mit dem Zusammenhang (3.24) folgt dann:

$$\langle F^{st}(t'_1) F^{st}(t'_2) \rangle = \left(\frac{\sigma}{M} \right)^2 \left\langle \sum_{n=1}^N (X - n)^2 [S^2 - (S_n^z)^2] \right\rangle \delta(t'_1 - t'_2). \quad (3.78)$$

In der Kontinuumsbeschreibung entspricht das

$$\langle F^{st}(t'_1) F^{st}(t'_2) \rangle = \sigma^2 \frac{\int (r - X)^2 [1 - \Psi^2] dr}{[\int (1 - \Psi) dr]^2} \delta(t'_1 - t'_2). \quad (3.79)$$

Diese Integral lösen wir jedoch numerisch, wobei wir für Ψ die Solitonlösung (3.15) verwenden. Damit ergibt sich:

$$\langle X_2(t_1) X_2(t_2) \rangle = D \min(t_1, t_2), \quad (3.80)$$

wobei wir D als Diffusionskonstante, also den Koeffizienten in der Varianz, bezeichnen. Die Varianz (siehe Abbildung 3.5) erhält man nach (3.75) hieraus für $t_1 = t_2 =: t$, sodass wir diese folgendermaßen schreiben können:

$$Var(X) = Dt. \quad (3.81)$$

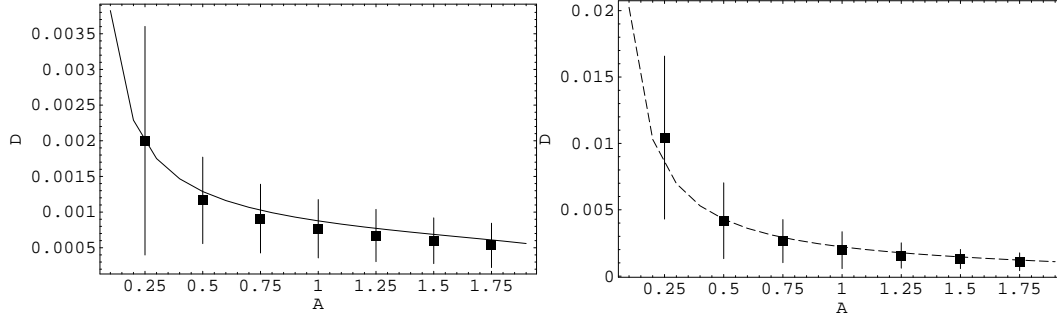


Abbildung 3.6: Die Diffusionskonstante D in Abhängigkeit von der Amplitude A unter Benutzung der 1. Definition (3.57). Die Spindynamik-Simulationen erscheinen als Messpunkte, die Kurven geben die theoretischen Vorhersagen gemäß Gleichung (3.80) wieder, wobei die durchgezogene Linie mit der Anisotropie $\beta = 0.01$ und die gestrichelte Linie mit $\beta = 0.001$ korrespondiert. Die Spindynamik-Resultate ergeben sich als Least-Square-Fit einer Ursprungsgeraden an den aus der Simulation bestimmten Zeitverlauf der Varianz von X über 50 Zeiteinheiten, wobei 500 Realisierungen berücksichtigt wurden. Die Fehlerbalken entsprechen einer Standardabweichung der Datenpunkte aus der Simulation von der angepassten Geraden. Die übrigen Parameter lauten: $k_B T = 0.01 = \varepsilon$, $\Gamma = 20$.

Dabei bestimmen wir $D(A)$ numerisch in Abhängigkeit von A für feste Werte von $\Gamma = 20$ und $\beta = 0.01$ bzw. $\beta = 0.001$ (siehe dazu Abbildung 3.6). Diese Ergebnisse werden wir in Kapitel 3.4.4 diskutieren.

3.4.2 Kollektive Ortsvariable 2

In diesem Unterkapitel machen wir die gleichen Annahmen wie im vorherigen, nämlich die Behandlung des Solitons wie ein Teilchen, was eine starre Form des Solitons voraussetzt. Nun wollen wir eine weitere denkbare Positionsdefinition, welche die symmetrische Struktur des Solitons berücksichtigt, angeben. Diese bezieht die x - und y -Komponenten der Spins mit ein und schreibt sich folgendermaßen:

$$X := \frac{\sum_{n=1}^N n [(S_n^x)^2 + (S_n^y)^2]}{\sum_{m=1}^N [(S_m^x)^2 + (S_m^y)^2]} = \frac{\sum_{n=1}^N n [S^2 - (S_n^z)^2]}{\sum_{m=1}^N [S^2 - (S_m^z)^2]}. \quad (3.82)$$

Diesen Ausdruck leiten wir nach der Zeit ab und erhalten:

$$\dot{X} = \frac{2}{\sum_{m=1}^N [(S_m^x)^2 + (S_m^y)^2]} \sum_{n=1}^N (n - X) (S_n^x \dot{S}_n^x + S_n^y \dot{S}_n^y). \quad (3.83)$$

Wieder ersetzen wir \dot{S}_n^z mit \dot{S}_n^z aus der Landau-Lifshitz-Gleichung (3.7) und erhalten

$$\begin{aligned} \dot{X} &= -\frac{2}{\sum_{m=1}^N [(S_m^x)^2 + (S_m^y)^2]} \sum_{n=1}^N (n-X) [S_n^z (S_n^y B_n^x - S_n^x B_n^y)] - \\ &\quad - \frac{2}{\sum_{m=1}^N [(S_m^x)^2 + (S_m^y)^2]} \sum_{n=1}^N (n-X) [S_n^z (S_n^y b_n^x - S_n^x b_n^y)]. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Die Gleichung (3.84) zerfällt auch in einen deterministischen und stochastischen Anteil, sodass wir wieder für \dot{X} schreiben können $\dot{X} = F^{in} + F^{st}$. Um den intrinsischen Anteil F^{in} zu berechnen, verwenden wir wieder die Kontinuumsnäherung:

$$\begin{aligned} F_{in} &= \frac{2}{\sum_{m=1}^N [(S_m^x)^2 + (S_m^y)^2]} \sum_{n=1}^N (n-X) [S_n^z (S_n^y B_n^x - S_n^x B_n^y)] \\ &\approx -2JS \frac{\int r \Psi \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(1 - \Psi^2) \frac{d\Phi}{d\xi} \right] d\xi}{\int (1 - \Psi^2) d\xi} \\ &= 2JS \frac{\int (1 - \Psi^2(\xi)) \frac{d\Phi}{d\xi} (\xi \frac{d\Psi}{d\xi} + \Psi) d\xi}{\int (1 - \Psi^2) d\xi} = 2V \frac{\int \xi \Psi \frac{\partial}{\partial \xi} (1 - \Psi) d\xi}{\int (1 - \Psi^2) d\xi} \\ &= 2V \frac{\int \xi \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \xi} (1 - \Psi^2) d\xi}{\int (1 - \Psi^2) d\xi} = V \frac{\int (1 - \Psi^2) dr}{\int (1 - \Psi^2) dr} = V. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Wir sehen, stimmt diese Geschwindigkeit mit der im vorigen Abschnitt bzw. der in Kapitel 3.2 überein.

Gleichung (3.84) interpretieren wir wieder als Stratonovich Gleichung, welche wir in die Ito-Form umschreiben, um $\langle F^{st}(t'_1) F^{st}(t'_2) \rangle dt'_1 dt'_2$ zu bestimmen:

$$dX = F^{in} dt + \sigma \sum_{n=1}^N [c_n^x dW_n^x + c_n^y dW_n^y], \quad (3.86)$$

mit

$$c_n^x := -\frac{2}{N} (n-X) S_n^z S_n^y, \quad c_n^y := \frac{2}{N} (n-X) S_n^z S_n^x \quad (3.87)$$

und $N = \sum_{m=1}^N [(S_m^x)^2 + (S_m^y)^2]$. Man sieht sofort, dass (3.86) die gleiche Struktur hat wie (3.68). Nach (3.69) berechnet sich dann der Zusatzterm als

$$\frac{\sigma^2}{4} \frac{\partial}{\partial X} \sum_{n=1}^N [(c_n^x)^2 + (c_n^y)^2] = \frac{\sigma^2}{K^2} \frac{\partial}{\partial X} \sum_{n=1}^N \left\{ (n-X)^2 (S_n^z)^2 [S^2 - (S_n^z)^2] \right\}. \quad (3.88)$$

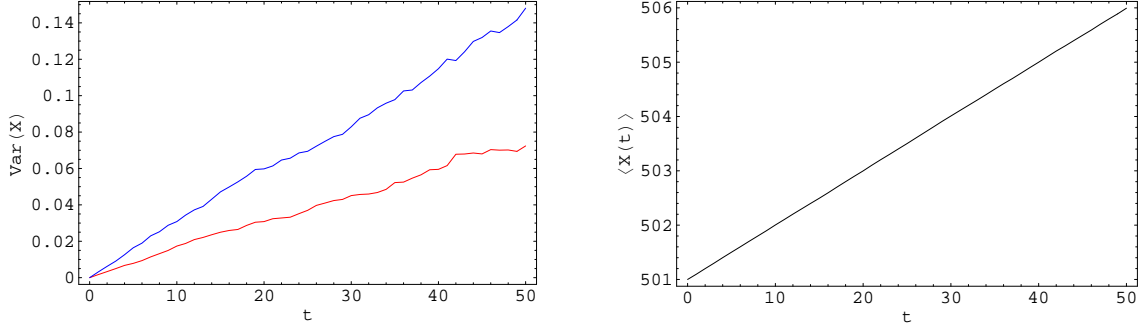


Abbildung 3.7: (**Links:**) die Ortsvarianz und (**Rechts:**) der Mittelwert $\langle X(t) \rangle$ jeweils unter Benutzung von (3.82) in Abhängigkeit von t bei verschiedenen Anisotropien: $\beta = 0.01$ (rote Linie) und $\beta = 0.001$ (blaue Linie). Die Mittelwerte $\langle X(t) \rangle$ bei den verschiedenen Anisotropien fallen zusammen und beide Diagramme stellen die Simulationsergebnisse dar, mit den konstanten Parametern $\Gamma = 20$, $A = 1$, $k_B T = 0.01$, $\varepsilon = 0.01$.

Um (3.88) bestimmen zu können, verwenden wir wieder die Kontinuumsnäherung:

$$\begin{aligned} \langle F^{st}(t_1) F^{st}(t_2) \rangle &= \frac{\sigma^2}{K^2} \left\{ \int \frac{\partial}{\partial X} \left[(n - X)^2 (S_n^z)^2 \left[S^2 - (S_n^z)^2 \right] \right] dr \right\} dt \\ &= -\frac{\sigma^2}{K^2} \lim_{L \rightarrow \infty} L^2 \left[(S^z(\xi))^2 \left(S^2 - (S^z(\xi))^2 \right) \right]_{\xi=-L}^{\xi=L} = 0. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Da $\lim_{|\xi| \rightarrow \infty} \Psi = 1$ ist, verschwindet der Zusatzterm, was uns die Rechtfertigung liefert, die Rauschterme \vec{b}_n und X als voneinander stochastisch unabhängig zu betrachten. Analoge Berechnungen wie in 3.4.1 führen zu

$$\begin{aligned} \langle F^{st}(t_1) F^{st}(t_2) \rangle &= \\ \frac{\sigma^2}{M^2} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \sum_{m,n=1}^N \left\langle (X(t'_1) - n)(X(t'_2) - m) S_n^x S_n^z(t'_1) S_m^x S_m^z(t'_2) \right\rangle \langle b_n^y(t'_1) b_m^y(t'_2) \rangle dt'_1 dt'_2 + \\ + \frac{\sigma^2}{M^2} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \sum_{m,n=1}^N \left\langle (X(t'_1) - n)(X(t'_2) - m) S_n^y S_n^z(t'_1) S_m^y S_m^z(t'_2) \right\rangle \langle b_n^x(t'_1) b_m^x(t'_2) \rangle dt'_1 dt'_2. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Im Kontinuum erhalten wir dann

$$\langle F^{st}(t_1) F^{st}(t_2) \rangle = \frac{4\sigma^2 \delta(t_1 - t_2)}{\left[\int (1 - \Psi^2) dr \right]^2} \int (r - X)^2 \Psi^2 (1 - \Psi^2) dr = D \min(t_1, t_2). \quad (3.91)$$

Dieses Integral lösen wir wieder numerisch. Die Varianz (siehe Abbildung 3.7) erhalten wir, indem wir $t_1 = t_2 = t$ setzen. Abbildung 3.8 zeigt den Verlauf der Diffusionskonstante $D(A)$ in Abhängigkeit von A , bei fest gewähltem $\beta = 0.01$ (bzw. $\beta = 0.001$) und $\Gamma = 20$. Diese Ergebnisse werden wir im Kapitel 3.4.4 diskutieren.

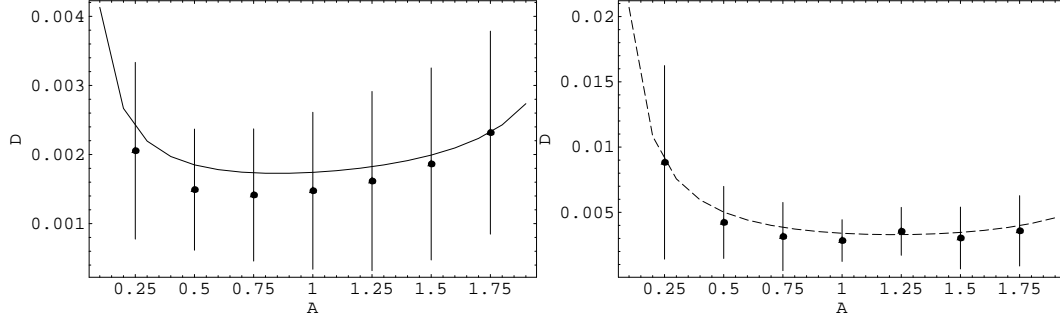


Abbildung 3.8: Die Diffusionskonstante D in Abhängigkeit von der Amplitude A unter Benutzung der 2. Definition (3.82). Die Spindynamik-Simulationen erscheinen als Messpunkte, die Kurven geben die theoretischen Vorhersagen gemäß Gleichung (3.80) wieder, wobei die durchgezogene Linie mit der Anisotropie $\beta = 0.01$ und die gestrichelte Linie mit $\beta = 0.001$ korrespondiert. Die übrigen Parameter lauten: $k_B T = 0.01 = \varepsilon$, $\Gamma = 20$.

3.4.3 Implizite kollektive Variable

Wir werden nun einen anderen Weg beschreiten, indem wir eine Ortsdefinition benutzen, bei welcher X nur implizit als Parameter in einem zeitabhängigen Ansatz enthalten ist. Die Vorteile dieser Definition gegenüber den vorhergehenden diskutieren wir am Schluss des Teilkapitels (3.4). Da wir immer noch kurze Zeitskalen betrachten, lassen wir die Amplitude A und die Breite Γ konstant. Wir verwenden nun einen zeitabhängigen Ansatz, der sowohl einer Translations- als auch Präzessionsbewegung eines Spins gerecht wird:

$$\vec{S}(r, t) = \vec{S}_{sol}(r, X(t), \Phi_0(t)). \quad (3.92)$$

Diesen Ansatz setzen wir in (3.23) ein und beschränken uns auf die z -Komponente. Dann erhalten wir:

$$\frac{\partial S^z}{\partial X} \dot{X} = J \left[\vec{S} \times \partial_r^2 \vec{S} \right]^z - \left[\vec{S} \times \vec{b} \right]^z. \quad (3.93)$$

Nachdem wir noch (3.93) mit $\partial S_{sol}^z / \partial X$ multipliziert und über r integriert haben, erhalten wir:

$$\dot{X} = \frac{J}{\int \left(\frac{\partial S_{sol}^z}{\partial X} \right)^2 dr} \int \frac{\partial S_{sol}^z}{\partial X} \left[\vec{S}_{sol} \times \partial_r^2 \vec{S}_{sol} \right]^z dr - \frac{1}{\int \left(\frac{\partial S_{sol}^z}{\partial X} \right)^2 dr} \int \frac{\partial S_{sol}^z}{\partial X} \left[\vec{S}_{sol} \times \vec{b} \right]^z dr. \quad (3.94)$$

Im Weiteren schreiben wir als Abkürzung $M = \int \left(\frac{\partial S_{sol}^z}{\partial X} \right)^2 dr$. Gleichung (3.94) ist wieder von der Form $\dot{X} = F^{in} + F^{st}$. F^{in} berechnet sich zu

$$\begin{aligned} F_{in} &= -JS \frac{\int \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[(1 - \Psi^2) \frac{d\Phi}{d\xi} \right]}{\int \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right)^2 d\xi} = JS \frac{\int (1 - \Psi^2(\xi)) \frac{d\Phi}{d\xi} \frac{d^2 \Psi}{d\xi^2} d\xi}{\int \left(\frac{d\Psi}{d\xi} \right)^2 d\xi} \\ &= -V \frac{\int \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \xi} [1 - \Psi] d\xi}{\int \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right)^2 d\xi} = V \frac{\int \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right)^2 d\xi}{\int \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \right)^2 d\xi} = V. \end{aligned} \quad (3.95)$$

Somit bewegt sich das Soliton unabhängig von seinen Ortsdefinitionen, die wir hier, bzw. in Kapitel 3.4.1 und (3.4.2), getroffen haben, mit derselben intrinsischen Geschwindigkeit V .

Analog zu den vorherigen Kapiteln (3.4.1) und (3.4.2) suchen wir nach einer Aussage, welche Korrelationen zwischen X und den Rauschtermen beschreibt. Dazu wandeln wir (3.94) in die diskrete Form um, was kein unübliches Verfahren ist, um stochastische, partielle Differentialgleichungen zu behandeln und zu interpretieren [19].

Betrachten wir nun eine beliebige Funktion $f(x)$. Wir entwickeln $f(x+h)$ und $f(x-h)$ jeweils in eine Taylorreihe um x in der Variablen h . Dann betrachten wir $\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$ [54]. Dies gibt die erste Ableitung von f an der Stelle x , plus Terme zweiter Ordnung in h . Nun nehmen wir h als klein an, d.h. klein gegenüber der typischen Längenskala, auf der die Funktion f variiert. In unserem Fall ist das Spinfeld die Funktion f und $h=1$. Unser Entwicklungspunkt ist $x=n$. Auf der Länge der Gitterkonstanten (die wir gleich Eins gesetzt haben) variiert das Spinfeld nur mäßig, da wir uns im Rahmen der Kontinuumsnäherung auf eben diesen Fall beschränken. Beachten wir noch $\partial_X = -\partial_r$, dann erhalten wir

$$\frac{\partial S^z}{\partial X}(r, t) \rightarrow -\frac{1}{2} [S_{n+1}^z - S_{n-1}^z] \quad (3.96)$$

und somit für (3.94):

$$\frac{1}{K} \int \frac{\partial S_{sol}^z}{X} [\vec{S}_{sol} \times \vec{b}]^z dr \rightarrow -\frac{1}{2K} \sum_n [(S_{n+1}^z - S_{n-1}^z) S_n^x b_n^y + (S_{n-1}^z - S_{n+1}^z) S_n^y b_n^x]. \quad (3.97)$$

Dieser Ausdruck ist wieder von der Form (3.68). Diese wollen wir wieder in Ito-Form umwandeln, wobei sich der Ito-Zusatzterm wieder nach (3.69) berechnet. Mit den Bezeichnungen

$$c_n^x = -\frac{1}{2K} (S_{n-1}^z - S_{n+1}^z) S_n^y, \quad c_n^y = -\frac{1}{2K} (S_{n+1}^z - S_{n-1}^z) S_n^x \quad (3.98)$$

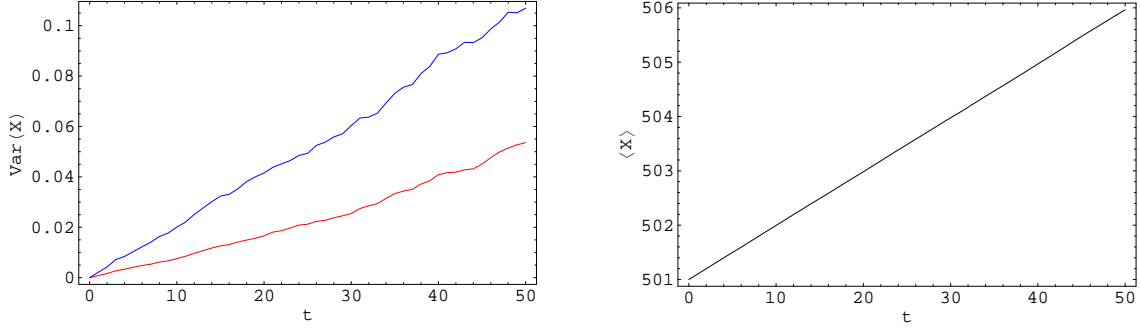


Abbildung 3.9: (**Links:**) die Ortsvarianz und (**Rechts:**) der Mittelwert $\langle X(t) \rangle$ jeweils unter Benutzung von (3.94) in Abhängigkeit von t bei verschiedenen Anisotropien: $\beta = 0.01$ (rote Linie) und $\beta = 0.001$ (blaue Linie). Die Mittelwerte $\langle X(t) \rangle$ bei den verschiedenen Anisotropien fallen zusammen und beide Diagramme stellen die Simulationsergebnisse dar, mit den konstanten Parametern $\Gamma = 20$, $A = 1$, $k_B T = 0.01$, $\varepsilon = 0.01$

lautet dann der Zusatzterm:

$$\begin{aligned} \sigma^2 \frac{dt}{2} \sum_n \left(c_n^x \frac{\partial c_n^x}{\partial X} + c_n^y \frac{\partial c_n^y}{\partial X} \right) &= \sigma^2 \frac{dt}{4} \sum_n \frac{\partial}{\partial X} [(c_n^x)^2 + (c_n^y)^2] = \\ &= \sigma^2 \frac{dt}{16K^2} \sum_n \frac{\partial}{\partial X} [(S_{n-1}^z - S_{n+1}^z)^2 ((S_n^x)^2 + (S_n^y)^2)]. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Um diesen zu bestimmen, wechseln wir wieder ins Kontinuum:

$$\begin{aligned} -\sigma^2 \frac{dt}{4K^2} \int \partial_r [(\partial_r S_{sol}^z)^2 (S^2 - (S^z)^2)] dr &= \\ &= \sigma^2 \frac{dt}{4K^2} \lim_{L \rightarrow \infty} [(\partial_r S_{sol}^z)^2 (S^2 - (S^z)^2)]_{-L}^L = 0, \end{aligned} \quad (3.100)$$

da $\lim_{|\xi| \rightarrow \infty} \Psi = 1$. Auch in diesem Fall ist die stochastische Unabhängigkeit des Rauschterms und der kollektive Variable X gegeben. Dann ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle F^{st}(t_1) F^{st}(t_2) \rangle &= \\ \frac{\sigma^2}{M^2} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \sum_{m,n=1}^N \langle (S_{n+1}^z - S_{n-1}^z) S_n^x(t'_1) S_m^x(t'_2) \rangle \langle b_n^y(t'_1) b_m^y(t'_2) \rangle dt'_1 dt'_2 &+ \\ + \frac{\sigma^2}{M^2} \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \sum_{m,n=1}^N \langle (S_{m+1}^z - S_{m-1}^z) S_m^y(t'_2) S_n^y(t'_1) \rangle \langle b_n^x(t'_1) b_m^x(t'_2) \rangle dt'_1 dt'_2. \end{aligned} \quad (3.101)$$

In der Kontinuumsapproximation gilt dann:

$$\langle F^{st}(t_1) F^{st}(t_2) \rangle = \frac{\sigma^2}{K^2} \int \left(\frac{\partial S^z}{\partial r} \right)^2 (S^2 - (S^z)^2) dr \delta(t_1 - t_2). \quad (3.102)$$

Daraus erhalten wir die Varianz der Solitonposition (siehe Abbildung 3.9):

$$\text{Var}[X(t)] = D \cdot t. \quad (3.103)$$

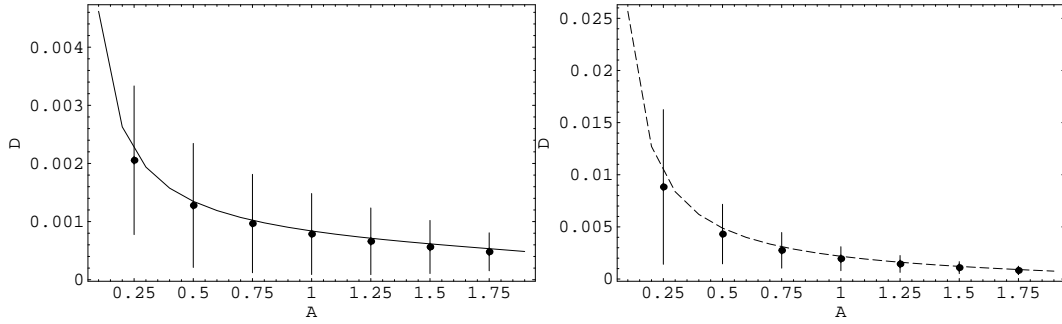


Abbildung 3.10: Die Diffusionskonstante D in Abhängigkeit von der Amplitude A unter Benutzung der 3. Definition (3.94). Die Spindynamik-Simulationen erscheinen als Messpunkte, die Kurven geben die theoretischen Vorhersagen gemäß Gleichung (3.102) wieder, wobei die durchgezogene Linie mit der Anisotropie $\beta = 0.01$ und die gestrichelte Linie mit $\beta = 0.001$ korrespondiert. Die übrigen Parameter lauten: $k_B T = 0.01 = \varepsilon$, $\Gamma = 20$.

D muss wieder numerisch bestimmt werden. Abbildung 3.10 zeigt den Verlauf der Diffusionskonstante $D(A)$ in Abhängigkeit von A , bei fest gewähltem $\beta = 0.01$ (bzw. $\beta = 0.001$) und $\Gamma = 20$.

3.4.4 Abschließende Diskussion und Vergleich mit den Simulationen

In den letzten drei Abschnitten (3.4.1), (3.4.2) und (3.4.3) haben wir die Solitonposition auf drei verschiedene Arten definiert. Die Gemeinsamkeit aller Definitionen ist die deterministische Geschwindigkeit V , also der intrinsische Anteil von (3.67), der aus der ferromagnetischen Wechselwirkung der Spins herrührt. Dies ist für eine ungestörte Solitonkonfiguration nicht verwunderlich. Ist das System aber Störungen ausgesetzt, so gehen diese aufgrund der adiabatischen Approximation, die wir gemacht haben, nur in die Position X ein, wovon jedoch V nicht abhängt. Die Rauschtermine selbst sind delta-korreliert und die zeitlichen Korrelationen der F^{st} sind allesamt proportional zu $\sigma^2 \delta(t_1 - t_2)$, was ein Charakteristikum für weißes Rauschen ist. Diese Proportionalität resultiert aus dem Verschwinden der Ito-Zusatzterme, was wiederum die Unabhängigkeit der Position X von den Rauschtermen bedeutet. Wie wir in der Abbildung 3.11 sehen, unterscheiden sich die Diffusionskonstanten, also die Proportionalitätsfaktoren der jeweiligen Ortsvarianzen, in den drei Definitionen deutlich voneinander. Wichtig zu erwähnen ist jedoch, dass aufgrund der Betrachtung kurzer Zeitskalen und damit verbundener Idealisierung einer adiabatisch starren Solitonform die Diffusion des Ortes lediglich als das diffusive Anfangsverhalten gesehen werden kann. Aus den Abbildungen 3.9 und 3.12 kann man erkennen, dass eine niedrigere Anisotropie mit einer höheren Varianz bzw. Diffusionskonstante korrespondiert. Dies kann man einsehen, da ein Anstieg in der Anisotropie β mit einem Anstieg der Solitonenergie $E = \sqrt{1/\Gamma^2 + \beta}$ einhergeht. Eine weitere Begründung für dieses Verhalten ist eine verstärkte Wechselwirkung der S^z -Komponenten, welche

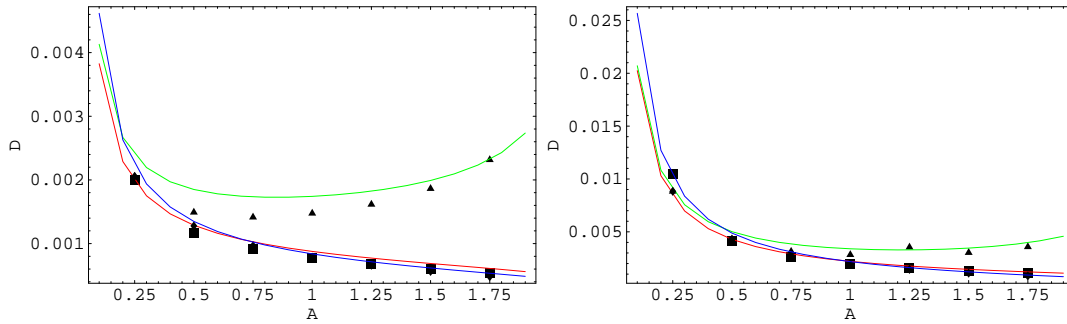


Abbildung 3.11: Die Diffusionskonstante D in Abhängigkeit von der Amplitude A für die verschiedenen Definitionen **Links:** $\beta = 0.01$ und **Rechts:** $\beta = 0.001$, unter Berechnung der 1. Definition (blau), 2. Definition (grün), 3. Definition (rot), bei konstanter Breite $\Gamma = 20$, Temperatur $k_B T = 0.01$ und Dämpfung $\varepsilon = 0.01$.

bei gegebener Temperatur den Puls stabilisieren, was wir in Abbildung 3.4 sehen können. Später werden wir sehen, dass wenn wir Fluktuationen der Struktur mitberücksichtigen, die Größe der Anisotropie und die Stärke der Diffusion miteinander einhergehen. Bevor wir die Gründe für die unterschiedlichen Ergebnisse der Diffusionskonstanten bezüglich der verschiedenen Ortsdefinitionen erläutern, werden wir zunächst auf die zugehörigen Spindynamik-Simulationen eingehen. Als Algorithmus, der die diskrete Landau-Lifshitz-Gleichung (3.22) numerisch löst, verwenden wir den Heun-Algorithmus, da er der Interpretation der Bewegungsgleichungen als Stratonovich-Gleichungen gerecht wird. Er ist ein speziell für die Lösung stochastischer Differentialgleichungen mit multiplikativen Rauschtermen (wie in Gleichung (3.23)) modifizierter Runge-Kutta-Algorithmus. Wir verwenden 500 Realisierungen über eine Gesamtzeit von $t = 50$. Für die Temperatur und Dämpfung verwenden wir $k_B T = 0.01$ bzw. $\varepsilon = 0.01$. Weiterhin wurden $S = 1 = J$ als konstant angenommen. Für den Anisotropieparameter wählen wir $\beta = 0.01$, bzw. $\beta = 0.001$. Aus der simulierten Spinkonfiguration wird nun jeweils die Position des Solitons bestimmt. An die jeweils berechnete Steigung der Varianz wird eine Ursprungsgerade mit der Methode kleinster Quadrate (least square fit) angepasst. Wir implementieren die ersten beiden Ortsdefinitionen (3.57) und (3.82) direkt in den Quelltext des Simulationsprogramms, nur mit dem Unterschied, dass wir hier nur solche Spins berücksichtigen, für die, bei einer gewählten Schranke von 0.01, $1 - S_n^z > \text{Schranke}$ gilt. Damit wird vermieden, dass Fluktuationen, die weit vom Anregungszentrum entfernt sind, in die Berechnung des Ortes mit einbezogen werden. Etwas eleganter ist da die implizite Ortsvariable aus Gründen, auf die wir im Folgenden eingehen werden. Dabei machen wir uns die Symmetrie des Solitonpulses zunutze. Dazu definieren wir die Funktion

$$F_X(Y) := \int S^z(r - X) \frac{\partial S^z}{\partial r}(r - Y) dr. \quad (3.104)$$

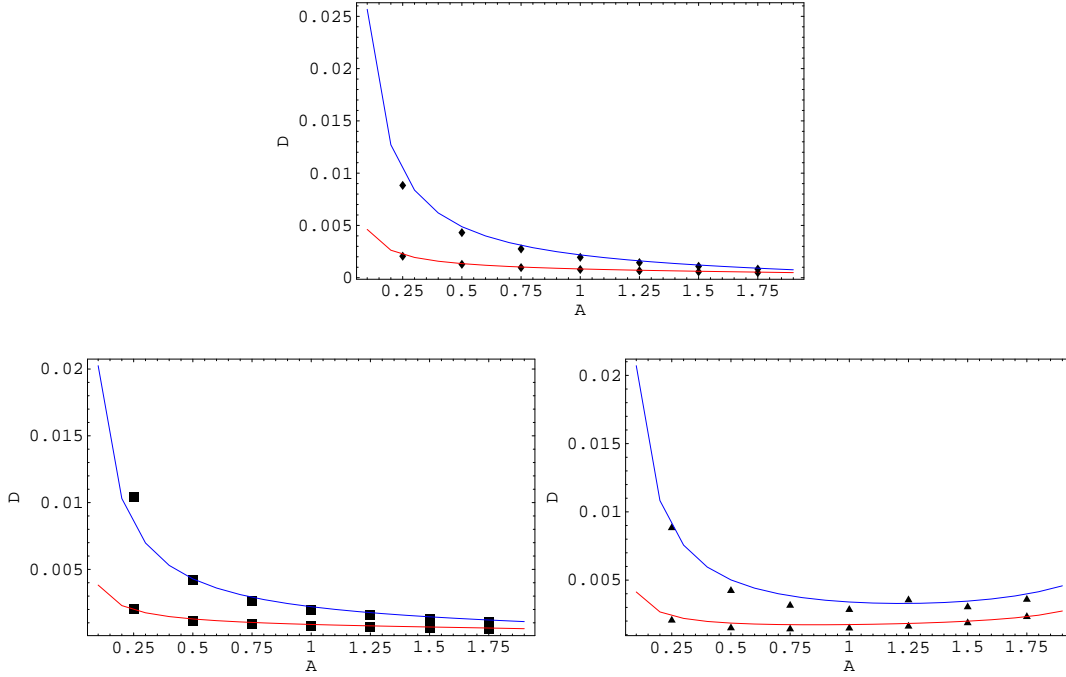


Abbildung 3.12: Die Diffusionskonstante D in Abhängigkeit von der Amplitude A , theoretische Kurve zusammen mit den Simulationswerten, 1. Definition (Punkte), 2. Definition (Dreiecke), 3. Definition (Quadrate) für verschiedene Anisotropien: $\beta = 0.01$ (rote Kurve), $\beta = 0.001$ (blaue Kurve), bei konstanter Breite $\Gamma = 20$, Temperatur $k_B T = 0.01$ und Dämpfung $\varepsilon = 0.01$.

Da S^z bezüglich X achsensymmetrisch, und $\partial_r S^z$ punktsymmetrisch bezüglich Y ist, sieht man sofort ein, dass $F_X(X)$ verschwindet. Wenn wir noch wissen möchten, welches Vorzeichen die Steigung des Grafen hat, leiten wir (3.104) nach Y ab:

$$\frac{dF_X}{dY}(Y) = - \int S^z(r-X) \frac{\partial^2 S^z}{\partial r^2}(r-Y) dr = \int \frac{\partial S^z}{\partial r}(r-X) \frac{\partial S^z}{\partial r}(r-Y) dr. \quad (3.105)$$

Da $\partial_r S^z(X-Y)$ um Y herum stark lokalisiert ist und nicht weit außerhalb der Umgebung von Y gegen Null strebt, treten auf der rechten Seite von (3.105) keine Randterme auf. Weiterhin erkennt man, dass

$$\frac{dF_X}{dY}(X) > 0 \quad (3.106)$$

gilt. Natürlich werten wir im Simulationsprogramm die diskrete Version von (3.104) aus, welche lautet:

$$\tilde{F}_X(Y) = \sum_{n=1}^{1000} S_n^z \frac{\partial S_{sol}^z}{\partial r}(n-Y). \quad (3.107)$$

Dabei bezeichnet X die zu bestimmende Position des Solitons. Wir wählen nun eine Menge von Y_i -Werten, welche äquidistant um den Bereich verteilt sind, bei welchem wir einen Vorzeichenwechsel von $-$ nach $+$ in $\tilde{F}_X(Y_i)$ beobachten. Beobachtet man einen Vorzeichenwechsel zwischen Y_i und Y_{i+1} , so bestimmen wir den Wert

von X durch lineare Interpolation. Ein großer Vorteil dieser Ortsbestimmungsmethode ist, dass wegen der starken exponentiellen Lokalisation von $\partial_r S^z$ Magnonen in größerer Entfernung vom Anregungszentrum nicht in die Ortsbestimmung eingehen, was uns Maßnahmen, wie das Einführen einer Schranke, erspart. Die Ergebnisse der Simulationen stimmen mit den theoretischen Vorhersagen überein. Auch die Vorhersagen über die Abhängigkeit der Varianz der Solitonposition $Var(X)$ von der Wahl der jeweiligen Ortsdefinitionen werden damit bestätigt. Abhängig vom Verlauf der Varianzen können wir schon jetzt eine Ortsdefinition ausschließen. Bei gleichbleibender Anisotropie β und Breite Γ ist anschaulich klar, dass ein größeres Soliton weniger diffusives Verhalten aufweisen sollte. Diese Annahme wird durch Spindynamik-Simulationen (siehe Abbildung 3.13) bestätigt. Folglich ist ein Wiederansteigen der Diffusionskonstante mit der Amplitude, wie aus Abbildung 3.8 gesehen werden kann, fragwürdig. Das ist ein guter Grund, die zweite Ortsdefinition zu verwerfen.

Nun werden wir Gründe für diese Abhängigkeit aufzeigen.

Da die Terme F^{st} in den unterschiedlichen Definitionen verschiedene Linearkombinationen der Rauschterme \vec{b}_n darstellen, gehen diese Unterschiede direkt in F^{st} ein und damit gemäß

$$dX = F^{in} dt + \sigma \frac{1}{M} \sum_{n=1}^N (n - X(t)) [S_n^x(t) dW_n^y(t) - S_n^y(t) dW_n^x(t)] \quad (3.108)$$

auch in dX . Änderungen in dX bewirken aber wiederum Änderungen $d\vec{S}$ in der Solitonstruktur, sodass es nach erneutem Lösen der diskreten Landau-Lifshitz-Gleichung zu leicht unterschiedlichen Ergebnissen für die Position X kommt. Obendrein gilt es zu berücksichtigen, dass die gestörte Spinfeldkonfiguration nicht mehr durch die analytische Solitonlösung (3.15) gegeben ist. Spinfeldfluktuationen, die vom Anregungszentrum weit entfernt auftreten, fallen bei der Positionsbestimmung kaum ins Gewicht. Nur wenn solitäre Anregungen sehr schmal sind, können Fluktuationen außerhalb des Anregungszentrums die Ortsbestimmungen nach (3.4.1) und (3.4.2) beeinflussen. Die Anzahl der Spins S_n^z , für die $1 - S_n^z \leq 0.01$ (Schranke) gilt, ist hier deutlich geringer. Fluktuationen des Spinfeldes bewirken, dass links und rechts des Anregungszentrums unterschiedlich viele Spins in die Ortsberechnung einbezogen werden, was sich dann folglich stärker auf dX auswirkt als dies bei breiteren Solitonen der Fall ist. Dies ist bei Verwendung der impliziten kollektiven Ortsdefinition nicht der Fall, da durch die starke, exponentielle Lokalisation von $\partial_r S^z$ Fluktuationen außerhalb des Anregungszentrums unberücksichtigt bleiben. Dies ist der Grund, weshalb wir in den folgenden Kapiteln genau diese Ortsdefinition verwenden werden.

Lokale Deformationen des Solitonpulses, die symmetrischer Natur sind, bewirken keine Änderungen in dX , da alle drei Ortsdefinitionen die Achsensymmetrie von S^z berücksichtigen. Dagegen resultieren lokale, asymmetrische Deformationen linear in

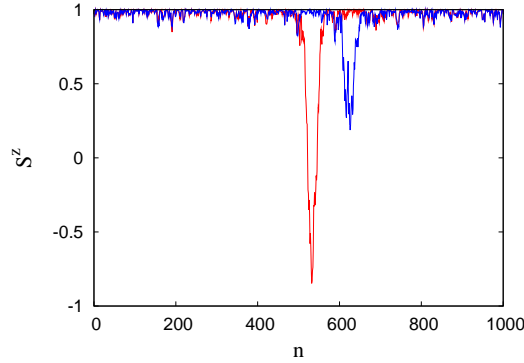


Abbildung 3.13: S^z -Konfiguration für zwei Solitonen unterschiedlicher Amplitude (blau: $A = 0.75$, rot: $A = 1.75$) nach $t = 900$. Die übrigen Parameter für beide Pulse sind $\Gamma = 20$, $k_B T = 0.01$, $\varepsilon = 0.01$.

σ im stochastischen Anteil von dX , welcher wieder in unterschiedlicher Art und Weise mit der ungestörten Solitonkonfiguration verknüpft ist und damit von den Definitionen abhängige Gesamtänderungen dX bewirkt. Da sich dX in allen drei Ortsdefinitionen unterscheidet, erhalten wir auch für $\langle F^{st}(t_1)F^{st}(t_2) \rangle$ unterschiedliche Ergebnisse.

Diese lokalen, asymmetrischen Strukturdeformationen haben bei gegebener Temperatur eine natürliche Beschränkung hinsichtlich ihrer Stärke und räumlicher Ausdehnung, welche sich naturgemäß auf das Gebiet der solitären Anregung beschränkt, was also ungefähr zweimal der Solitonbreite entspricht. In [5] argumentiert man, dass ab einer gewissen Breite Γ die Standardabweichung von X , also $\sqrt{\text{Var}(X)}$, die beschriebene unterschiedliche Übersetzung dieser Strukturdeformationen durch die verschiedenen Ortsdefinitionen nicht mehr so stark ins Gewicht fällt. Dabei sollte $\sqrt{\text{Var}(X)}$ deutlich größer als die Solitonbreite sein und die unterschiedlichen Ortsdefinitionen annähernd zu derselben Varianz führen. Diese Annahme ist aber eher hypothetischer Natur, da in der Zeit, während $\sqrt{\text{Var}(X)}$ wächst, auch die Breite des Solitons zunehmen wird. Dieser angestrebte Fall einer Varianz von einem Vielfachen der Solitonbreite kann dann folglich nie oder erst sehr spät erreicht werden, sodass die solitäre Anregung bis dahin im Rauschen nicht mehr sichtbar ist. In den folgenden Kapiteln betrachten wir längere Zeiten und geben eine adiabatisch starre Struktur des Solitons auf. Dabei verwenden wir aus genannten Gründen die implizite Definition des Ortes.

3.5 Fluktuationen der Struktur

In diesem Abschnitt betrachten wir mittlere und große Zeitskalen. Auf einer Gesamtzeitskala von $t = 1000$ bezeichnen wir einen Zeitraum für $t \lesssim 50$ als kurz, für $50 \lesssim t \lesssim 200$ als mittel und für $t \gtrsim 200$ als lang. Hierbei geben wir die starre Form des Solitons auf und berücksichtigen eine zeitliche Abhängigkeit der kollektiven Variablen im Ansatz:

$$\vec{S}(r, t) = \vec{S}_{sol}(r - X(t), \Phi_0(t), A(t), \Gamma(t)). \quad (3.109)$$

Diesen setzen wir in die Landau-Lifshitz-Gleichung (3.23) ein und erhalten:

$$\sum_{i=1}^4 \left(\frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_i} + \varepsilon \vec{S}_{sol} \times \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_i} \right) \dot{U}_i = -\vec{S}_{sol} \times (\vec{B} + \vec{b}), \quad (3.110)$$

wobei $i, k \in \{1, 2, 3, 4\}$ und $U_1 := X$, $U_2 := \Phi_0$, $U_3 := A$ und $U_4 := \Gamma$. Der Vektor \vec{S}_{sol} ist durch die 1-Solitonlösung (3.15) bestimmt. Die Dynamik der kollektiven Variablen wird durch die Dämpfung für mittlere Zeitskalen, wie wir in späteren Abschnitten sehen werden, nur geringfügig beeinflusst und wird daher im folgenden Kapitel vernachlässigt.

3.5.1 Mittlere Zeiten

Innerhalb mittlerer Zeitskalen wirken sich Effekte der Dämpfung noch nicht so stark auf die zeitliche Veränderung der kollektiven Variablen A und Γ aus, wohl aber die stochastischen Fluktuationen. Hierbei gehen wir wie für die implizite Ortsvariable in Kapitel 3.4.3 vor. Dieser Weg ist durch seinen einfachen Zugang an die Zeitentwicklung der kollektiven Variablen motiviert [4]. Deshalb betrachten wir von Gleichung (3.110) nur die z -Komponente, sodass Φ_0 herausfällt (S_{sol}^z ist von Φ_0 unabhängig):

$$\frac{\partial S_{sol}^z}{\partial X} \dot{X} + \frac{\partial S_{sol}^z}{\partial A} \dot{A} + \frac{\partial S_{sol}^z}{\partial \Gamma} \dot{\Gamma} = J \left[\vec{S}_{sol} \times \partial_r^2 \vec{S}_{sol} \right]^z - \left[\vec{S}_{sol} \times \vec{b} \right]^z. \quad (3.111)$$

Wir multiplizieren Gleichung (3.111) jeweils mit den Funktionen $\partial S_{sol}^z / \partial X$, $\partial S_{sol}^z / \partial A$ und $\partial S_{sol}^z / \partial \Gamma$ und integrieren über r . Damit erhalten wir ein gekoppeltes System von drei gewöhnlichen Differentialgleichungen für die drei kollektiven Variablen X , A , und Γ :

$$\begin{bmatrix} b_{11} & 0 & 0 \\ 0 & b_{22} & b_{23} \\ 0 & b_{23} & b_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{X} \\ \dot{A} \\ \dot{\Gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int \frac{\partial S_{sol}^z}{\partial X} \left[\vec{S} \times \partial_r^2 \vec{S} \right] dr \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \int \frac{\partial \Psi}{\partial X} \left[\vec{S}_{sol} \times \vec{b} \right]^z dr \\ \int \frac{\partial \Psi}{\partial A} \left[\vec{S}_{sol} \times \vec{b} \right]^z dr \\ \int \frac{\partial \Psi}{\partial \Gamma} \left[\vec{S}_{sol} \times \vec{b} \right]^z dr \end{bmatrix}. \quad (3.112)$$

Das System (3.112) entkoppelt zu einem 1x1 und 2x2-System:

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} b_{22} & b_{23} \\ b_{23} & b_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{A} \\ \dot{\Gamma} \end{pmatrix} &= - \begin{pmatrix} \int \frac{\partial \Psi}{\partial A} [\vec{S}_{sol} \times \vec{b}]^z dr \\ \int \frac{\partial \Psi}{\partial \Gamma} [\vec{S}_{sol} \times \vec{b}]^z dr \end{pmatrix}. \\
\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \dot{A} \\ \dot{\Gamma} \end{pmatrix} &= \frac{-1}{b_{22}b_{33} - b_{23}^2} \begin{pmatrix} b_{33} & -b_{23} \\ -b_{23} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \int \frac{\partial \Psi}{\partial A} [\vec{S}_{sol} \times \vec{b}]^z dr \\ \int \frac{\partial \Psi}{\partial \Gamma} [\vec{S}_{sol} \times \vec{b}]^z dr \end{pmatrix}. \\
\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \dot{A} \\ \dot{\Gamma} \end{pmatrix} &= \frac{-1}{b_{22}b_{33} - b_{23}^2} \begin{pmatrix} b_{33} \int \frac{\partial \Psi}{\partial A} [\vec{S}_{sol} \times \vec{b}]^z dr - b_{23} \int \frac{\partial \Psi}{\partial \Gamma} [\vec{S}_{sol} \times \vec{b}]^z dr \\ -b_{23} \int \frac{\partial \Psi}{\partial A} [\vec{S}_{sol} \times \vec{b}]^z dr + b_{22} \int \frac{\partial \Psi}{\partial \Gamma} [\vec{S}_{sol} \times \vec{b}]^z dr \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.113}$$

Dabei gilt $b_{ij} = \int \frac{\partial \Psi}{\partial U_i} \frac{\partial \Psi}{\partial U_j} dr$ und $U_i, i \in \{1, 2, 3\}$ bezeichnet die kollektiven Variablen X, A und Γ . Nachdem wir die Matrix des Systems (3.112) invertiert haben, erhalten wir

$$\begin{aligned}
\dot{X} &= \frac{2JS}{\Gamma} \sqrt{\frac{2}{A} - 1} + F_X^{st}, \\
\dot{A} &= F_A^{st}, \\
\dot{\Gamma} &= F_\Gamma^{st},
\end{aligned} \tag{3.114}$$

wobei F^{st} für die stochastischen Kräfte steht, welche die Effekte des Rauschens widerspiegeln. Bei verschwindenden stochastischen Kräften erhalten wir wieder die Dynamik von X, A und Γ , korrespondierend zum ungestörten Fall. Nun stellen wir uns wieder die Frage, ob wir Rauschterme und kollektive Variablen als voneinander stochastisch unabhängig behandeln dürfen. Dabei stützen wir uns auf die Argumentation in [4]. Der Korrekturterm, welcher bei der Umrechnung von Stratonovich in Ito-Gleichung auftritt, ist grundsätzlich von der Ordnung σ^2 , wohingegen die Rauschterme an sich und F^{st} von der Ordnung σ sind. Folglich würden nichtverschwindende Zusatzterme mit σ^4 in die jeweiligen Varianzen eingehen. Da wir hier nur kleine Temperaturen verwenden, kann man diese Terme vernachlässigen. Das bedeutet, dass wir hier nicht zwischen Ito- und Stratonovich-Interpretation unterscheiden. Damit dürfen wir das Rauschen und die kollektiven Variablen als voneinander stochastisch unabhängig betrachten. Somit folgt: $\langle F_U^{st} \rangle = 0$ für $U = X, A, \Gamma$,

und die Korrelationen der stochastischen Kräfte lauten:

$$\begin{aligned}
\langle F_X^{st}(t_1)F_X^{st}(t_2) \rangle &= \sigma^2\delta(t_1 - t_2)\frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty}(\frac{\partial}{\partial r}\Psi)^2 dr} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial}{\partial r}\Psi\right)^2 \right. \\
&\quad \left. (1 - \Psi^2) dr \right] \\
\langle F_A^{st}(t_1)F_A^{st}(t_2) \rangle &= \sigma^2\delta(t_1 - t_2)\frac{1}{(b_{23}^2 - b_{22}b_{23})^2} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(b_{33}\frac{\partial}{\partial A}\Psi - b_{23}\frac{\partial}{\partial \Gamma}\Psi\right)^2 \right. \\
&\quad \left. (1 - \Psi^2) dr \right] \\
\langle F_\Gamma^{st}(t_1)F_\Gamma^{st}(t_2) \rangle &= \sigma^2\delta(t_1 - t_2)\frac{1}{(b_{23}^2 - b_{22}b_{23})^2} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(-b_{23}\frac{\partial}{\partial A}\Psi + b_{22}\frac{\partial}{\partial \Gamma}\Psi\right)^2 \right. \\
&\quad \left. (1 - \Psi^2) dr \right] \\
\langle F_A^{st}(t_1)F_\Gamma^{st}(t_2) \rangle &= \frac{\sigma^2\delta(t_1 - t_2)}{(b_{23}^2 - b_{22}b_{23})^2} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(b_{33}\frac{\partial}{\partial A}\Psi - b_{23}\frac{\partial}{\partial \Gamma}\Psi\right) \right. \\
&\quad \left. \left(-b_{23}\frac{\partial}{\partial A}\Psi + b_{22}\frac{\partial}{\partial \Gamma}\Psi\right)(1 - \Psi^2) dr \right] \\
\langle F_X^{st}(t_1)F_A^{st}(t_2) \rangle &= 0, \\
\langle F_X^{st}(t_1)F_\Gamma^{st}(t_2) \rangle &= 0.
\end{aligned} \tag{3.115}$$

Diese Korrelationen müssen alle numerisch berechnet werden. Als Abkürzung verwenden wir

$$\langle F_U^{st}(t_1)F_V^{st}(t_2) \rangle = \sigma^2\delta(t_1 - t_2)\Sigma_{UV}(A, \Gamma). \tag{3.116}$$

Die Struktur der kollektiv-Variablen-Gleichungen unterscheidet sich nicht von der des isotropen Systems. Die einzigen Unterschiede erscheinen in den Werten der Diffusionskonstanten $\Sigma_{UV}(A, \Gamma)$ aufgrund der Anisotropie. Deswegen fahren wir so fort wie in [4, 5]. Benutzen wir außerdem voneinander unabhängige Wiener-Prozesse W_X , W_1 und W_2 , so erhalten wir die stochastischen Bewegungsgleichungen ohne Dämpfung wie folgt:

$$\begin{aligned}
dX &= \frac{2JS}{\Gamma}\sqrt{\frac{2}{A} - 1}dt + \sigma\alpha(A, \Gamma)dW_X, \\
dA &= \sigma\beta_1(A, \Gamma)dW_1, \\
d\Gamma &= \sigma\gamma_1(A, \Gamma)dW_1 + \sigma\gamma_2(A, \Gamma)dW_2,
\end{aligned} \tag{3.117}$$

wobei

$$\begin{aligned}
\alpha &= \sqrt{\Sigma_{XX}}, \quad \beta_1 = \sqrt{\Sigma_{AA}}, \\
\gamma_1 &= \frac{\Sigma_{A\Gamma}}{\sqrt{\Sigma_{AA}}}, \quad \gamma_2 = \sqrt{\Sigma_{\Gamma\Gamma} - \frac{\Sigma_{A\Gamma}^2}{\Sigma_{AA}}}.
\end{aligned} \tag{3.118}$$

Wie man sieht, ist F_X^{st} weder mit F_A^{st} noch mit F_Γ^{st} korreliert und wird daher nur durch einen Wiener-Prozess W_X beschrieben. Dabei müssen F_A^{st} und F_Γ^{st} die Relation (3.117) erfüllen. Dementsprechend haben wir die drei Koeffizienten, β , γ_1

und γ_2 eingeführt. Eine der drei Korrelationen ist $\langle F_A^{st} F_\Gamma^{st} \rangle$, daher verwenden wir einen Wiener-Prozess W_1 zweimal, um eine nichtverschwindende Korrelation zwischen diesen Variablen zu erhalten. Würde man nur W_1 verwenden, also $\gamma_2 = 0$ setzen, so könnte man zwar die Korrelation $\langle F_A^{st} F_\Gamma^{st} \rangle$ erfüllen, sowie entweder $\langle F_A^{st} F_A^{st} \rangle$ oder $\langle F_\Gamma^{st} F_\Gamma^{st} \rangle$, aber im Allgemeinen nicht beide gleichzeitig. Daher benötigt man einen weiteren Wiener-Prozess W_2 und den zugehörigen Koeffizienten γ_2 . Ebensogut hätten wir zwei Wiener-Prozesse in der dA -Gleichung und nur einen dieser beiden in der $d\Gamma$ -Gleichung verwenden können. Mehr Freiheit bleibt aber nicht.

Wie wir in (3.117) sehen, sind die stochastischen Terme δ -korreliert und stellen, wie erwähnt, in erster Ordnung von σ weißes Rauschen dar. Die Verwendung von Wiener-Prozessen ist damit gerechtfertigt. Das Gleichungssystem (3.117) wird in [4] analytisch gelöst, indem man sich eine störungstheoretische Behandlung (*small noise expansion*) zunutze macht. Details der Rechnung befinden sich im Anhang C. Für die Varianzen der kollektiven Variablen finden wir dann also:

$$\begin{aligned}\text{Var}[X(t)] &= \sigma^2 \Sigma_{XX} t + \sigma^2 \Sigma_{cub} t^3, \\ \text{Var}[A(t)] &= \sigma^2 \Sigma_{AA} t, \\ \text{Var}[\Gamma(t)] &= \sigma^2 \Sigma_{\Gamma\Gamma} t,\end{aligned}\tag{3.119}$$

mit

$$\Sigma_{cub} = \frac{4J^2 S^2}{3\Gamma_0^2} \left[\frac{\Sigma_{AA}}{A_0^4} \left(\frac{2}{A_0} - 1 \right)^{-1} + \frac{\Sigma_{\Gamma\Gamma}}{\Gamma_0^2} \left(\frac{2}{A_0} - 1 \right) + \frac{2\Sigma_{A\Gamma}}{A_0^2 \Gamma_0} \right].\tag{3.120}$$

Die Koeffizienten Σ_{UV} hängen nur von A_0 und Γ_0 ab, welche die Anfangswerte ohne Rauschen darstellen. Die Koeffizienten Σ_{UV} müssen numerisch ausgewertet werden. Wir beobachten einen *direkten Effekt* des Rauschens auf die Position X . Das ist nicht verwunderlich, wenn man bedenkt, dass ein normaler *random walk* zu einer linearen Zeit-Abhängigkeit der Varianz führt. Zusätzlich beobachten wir einen *indirekten Effekt*: das Rauschen verursacht stochastische Änderungen neben X auch in A und Γ . Tatsächlich erhalten wir für diese Variablen eine lineare Zeitabhängigkeit in der Varianz, was signifikant für Brownsche Bewegung ist. Da sowohl A als auch Γ die deterministische Geschwindigkeit der solitären Anregung bestimmen, verursachen deren stochastische Dynamik wiederum stochastische Änderungen in der Geschwindigkeit. Dieses Phänomen führt zu einem zusätzlichen Term in der Ortsvarianz, welcher mit t^3 zeitlich wächst. Dieses *superdiffusive Verhalten* wurde auch in der isotropen Heisenbergkette gefunden [4, 5]. Hier, in der anisotropen Heisenbergkette, hängen, wie auch schon im Kurzzeitverhalten, die Werte der Diffusionskonstanten von der Größe der Anisotropie β ab. Diese Beziehung werden wir nun genauer untersuchen.

Wie schon in Kapitel 3.2.2 erwähnt, führen kleine strukturelle Änderungen in \vec{S} zu starken Fluktuationen in A und Γ . Dieses Verhalten wird mit wachsender Anisotropie forciert. Folglich führen Fluktuationen in A und Γ zu starken Schwankungen

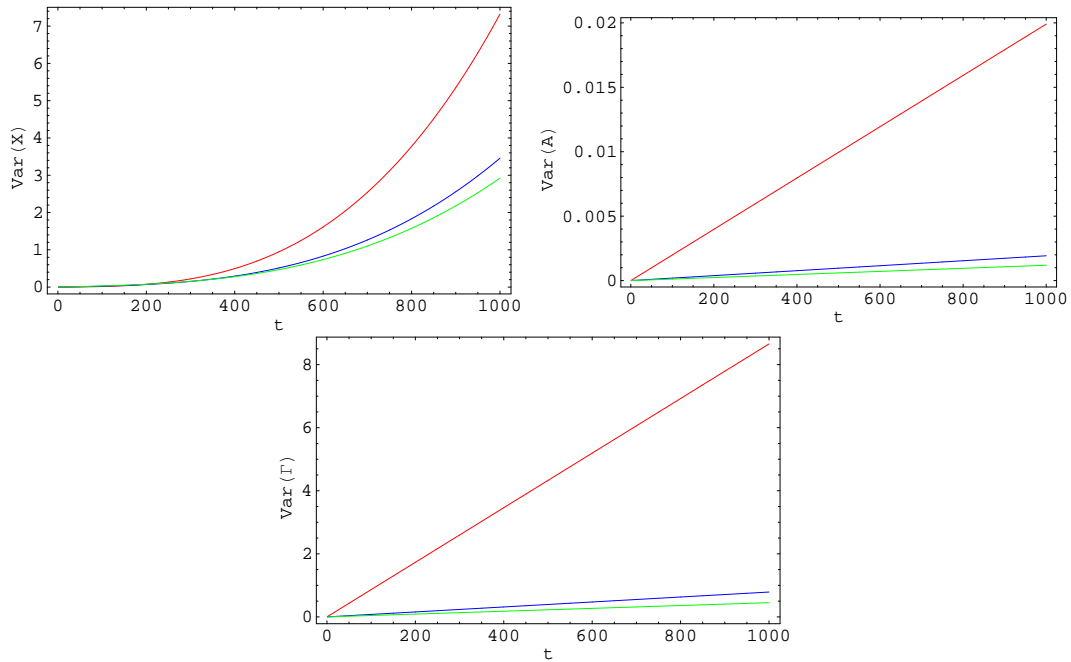


Abbildung 3.14: Varianzen aus (3.119): $\text{Var}(X)$, $\text{Var}(A)$ und $\text{Var}(\Gamma)$ abhängig von t , $k_B T = 0.001$, mit Anisotropie $\beta = 0.01$ (rote Linie), $\beta = 0.001$ (blaue Linie) und $\beta = 0.0001$ (grüne Linie), für alle Figuren verwenden wir $A = 1$, $\Gamma = 20$

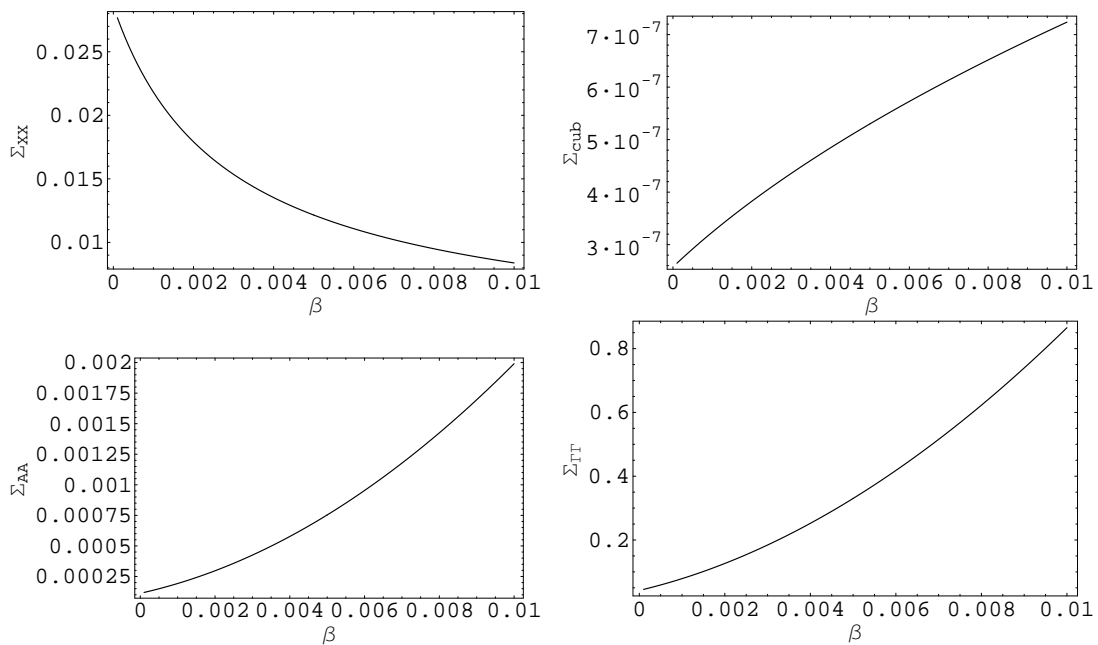


Abbildung 3.15: Diffusionskonstanten aus Gleichung (3.119): Σ_{XX} , Σ_{cub} (Koeffizient des kubischen Anteils in $\text{Var}(X)$), Σ_{AA} und $\Sigma_{\Gamma\Gamma}$ in Abhängigkeit von β bei konstantem $A = 1$, $\Gamma = 20$, Σ_{AR} zeigen wir nicht explizit, da es schon in Σ_{cub} enthalten ist

in der Geschwindigkeit V und damit zu einem Anstieg von Σ_{cub} . In Abbildung 3.14 können wir den Effekt der Anisotropie auf die Varianzen betrachten, nämlich einen Anstieg aller Varianzen mit β . Das bedeutet, dass bei einer gegebenen Temperatur strukturelle Fluktuationen in \vec{S} zu umso größeren Fluktuationen in A und Γ führen, je größer β ist. Diese Beziehung lässt sich leicht verifizieren, wenn wir die Diffusionskonstanten Σ_{XX} , Σ_{cub} , Σ_{AA} und $\Sigma_{\Gamma\Gamma}$ in Abhängigkeit von β auftragen. Aus Abbildung 3.15 kann man entnehmen, dass alle Diffusionskonstanten mit β wachsen, außer Σ_{XX} . Diese Diffusionskonstante ist mit linearem t verknüpft. Nach $t > 100$ wird $\Sigma_{XX}t$ von $\Sigma_{cub}t^3$ kompensiert, sodass insgesamt die Ortsvarianz mit steigendem β wächst. Dieses Verhalten ist auch unabhängig von den Initialisierungswerten A und Γ .

Nun betrachten wir zwei Solitonen, wobei eines die anisotrope Einsolitonlösung und das andere die isotrope Einsolitonlösung darstellt. Einen Solitonpuls in der anisotropen Heisenbergkette kann man immer, wenn die Anisotropie nicht zu groß ist, stets gut mit der isotropen Lösung fitten. Nachdem die isotrope Lösung mit entsprechender Wahl von A und Γ der anisotropen Lösung angepasst wurde, vergleichen wir das diffusive Verhalten der beiden Pulse. Wir stellen in Übereinstimmung mit den soeben getroffenen Vorhersagen fest, dass die anisotrope Einsolitonlösung in allen kollektiven Variablen eine größere Diffusion aufweist als die isotrope Lösung.

Das diffusive Verhalten eines Solitons wird also nicht durch seine Form beeinflusst, sondern im Wesentlichen durch die Größe der Anisotropie.

3.5.2 Lange Zeiten

Analytische Überlegungen

Wir werden jetzt das Langzeitverhalten der solitären Anregung studieren, d.h. Zeitskalen, für die $t \geq 300$ ist. Hier kann der Dämpfungseffekt auf die kollektiven Variablen nicht mehr vernachlässigt werden, weswegen wir die Dämpfung in

$$\sum_{i=1}^4 \left(\frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_i} + \varepsilon \vec{S}_{sol} \times \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_i} \right) \dot{U}_i = -\vec{S}_{sol} \times (\vec{B} + \vec{b}) \quad (3.121)$$

mit berücksichtigen. Dazu führen wir das Vektorprodukt dieser Gleichung mit $\frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_k}$ aus und danach noch das Skalarprodukt des Ergebnisses mit \vec{S}_{sol} . Die anschließende Integration über den Raum ergibt:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 \int \vec{S}_{sol} \cdot \left[\frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_k} \times \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_i} + \varepsilon \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_k} \times \left(\vec{S}_{sol} \times \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_i} \right) \right] dr \dot{U}_i = \\ = - \int \vec{S}_{sol} \cdot \left[\frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_k} \times \left(\vec{S}_{sol} \times (\vec{B} + \vec{b}) \right) \right] dr. \end{aligned} \quad (3.122)$$

Als Abkürzung führen wir den Vektor $\vec{C} := \vec{C}^{in} + \vec{C}^{ex}$ ein, welcher definiert ist durch:

$$\begin{aligned} C_k^{in} &:= - \int \vec{S}_{sol} \cdot \left[\frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_k} \times (\vec{S}_{sol} \times \vec{B}) \right] dr, \\ C_k^{ex} &:= - \int \vec{S}_{sol} \cdot \left[\frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_k} \times (\vec{S}_{sol} \times \vec{b}) \right] dr. \end{aligned} \quad (3.123)$$

Indem wir die Gesetze der Vektoralgebra und die Relation

$$\vec{S}_{sol} \cdot \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_k} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial U_k} (\vec{S}_{sol} \cdot \vec{S}_{sol}) = 0 \quad (3.124)$$

verwenden, schreibt sich Gleichung (3.121) wie folgt:

$$\sum_{i=1}^4 [N_{ki} + \varepsilon M_{ki}] \dot{U}_i = \sum_{i=1}^4 L(\varepsilon) \dot{U}_i = C_k, \quad (3.125)$$

Hier haben wir folgende Abkürzungen verwendet:

$$\begin{aligned} N_{ki} &:= \int \vec{S}_{sol} \cdot \left[\frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_k} \times \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_i} \right] dr = S^3 \int \left[\frac{\partial \Psi}{\partial U_i} \frac{\partial \Phi}{\partial U_k} - \frac{\Psi}{\partial U_k} \frac{\partial \Phi}{\partial U_i} \right] dr, \\ M_{ki} &:= S^2 \int \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_k} \cdot \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_i} dr = S^4 \int \left[\frac{1}{1 - \Psi^2} \frac{\partial \Psi}{\partial U_k} \frac{\partial \Psi}{\partial U_i} + (1 - \Psi^2) \frac{\partial \Phi}{U_k} \frac{\partial \Phi}{\partial U_i} \right] dr. \end{aligned} \quad (3.126)$$

Nach Invertierung des Gleichungssystems (3.125) erhalten wir

$$\dot{U}_i = \sum_{k=1}^4 [\mathbf{L}(\varepsilon)^{-1}]_{ik} C_k. \quad (3.127)$$

Diese Gleichung möchten wir ausführlicher schreiben und erhalten explizit:

$$\begin{bmatrix} \dot{X} \\ \dot{\Phi}_0 \\ \dot{A} \\ \dot{\Gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon M_{11} & \varepsilon M_{12} & N_{13} & N_{14} \\ \varepsilon M_{12} & \varepsilon M_{22} & N_{23} & N_{24} \\ -N_{13} & -N_{23} & \varepsilon M_{33} & \varepsilon M_{34} \\ -N_{14} & -N_{24} & \varepsilon M_{34} & \varepsilon M_{44} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 + C_X^{st} \\ 0 + C_{\Phi_0}^{st} \\ C_A^{in} + C_A^{st} \\ C_\Gamma^{in} + C_\Gamma^{st} \end{bmatrix}. \quad (3.128)$$

Dabei sehen wir wieder den Zerfall von (3.128) in

$$\dot{U}_i = F_i^{in} + F_i^{st}, \quad (3.129)$$

mit

$$\begin{aligned} F_i^{in} &:= \sum_{k=1}^4 [\mathbf{L}(\varepsilon)^{-1}]_{ik} C_k^{in}, \\ F_i^{st} &:= \sum_{k=1}^4 [\mathbf{L}(\varepsilon)^{-1}]_{ik} C_k^{st}. \end{aligned} \quad (3.130)$$

Explizit erhalten wir dann $C_X^{in} = 0$, $C_{\Phi_0}^{in} = 0$,

$M_{ij} = M_{ji}$, $N_{ij} = -N_{ji}$ und

$$\begin{aligned}
M_{11} &= \frac{4S^4}{A\Gamma^2\sqrt{\beta}} \left(A\Gamma\sqrt{\beta(1+\beta\Gamma^2)} - \log \left[\frac{1 + A\beta\Gamma^2 - A\Gamma\sqrt{\beta(1+\beta\Gamma^2)}}{\sqrt{1 - (-2+A)A\beta\Gamma^2}} \right] \right), \\
M_{12} &= \frac{4S^4}{\sqrt{\beta}\Gamma} \sqrt{\frac{2-A}{A}} \log \left[\frac{1 + A\beta\Gamma^2 - A\Gamma\sqrt{\beta(1+\beta\Gamma^2)}}{\sqrt{1 - (-2+A)A\beta\Gamma^2}} \right], \\
M_{22} &= \frac{4S^4}{\beta\sqrt{\beta}A\Gamma^2} \left(A\Gamma\sqrt{\beta(1+\beta\Gamma^2)} + \log \left[\frac{1 + A\beta\Gamma^2 - A\Gamma\sqrt{\beta(1+\beta\Gamma^2)}}{\sqrt{1 - (-2+A)A\beta\Gamma^2}} \right] \right), \quad (3.131) \\
N_{23} &= \frac{S^3 2(1+\beta\Gamma^2)}{\sqrt{\beta+1/\Gamma^2}(-1-(2-A)A\beta\Gamma^2)}, \\
N_{24} &= \frac{S^3 2A(-1+(-2+A)\beta\Gamma^2)}{\sqrt{\beta\Gamma^2+1}(1-(-2+A)A\beta\Gamma^2)}.
\end{aligned}$$

M_{33} , M_{34} , M_{44} , N_{13} und N_{14} werden genauso wie die Diffusionskonstanten D_{ij} numerisch berechnet, die wir im Folgenden definieren. Die Korrelationen der stochastischen Kräfte sind gegeben durch

$$\begin{aligned}
&\left\langle F_i^{ex}(t_1) F_j^{ex}(t_2) \right\rangle = \\
&\sum_{m=1}^4 \sum_{k=1}^4 \left\langle [\mathbf{L}(\varepsilon)^{-1}]_{ik}(t_1) C_k^{st}(t_1) [\mathbf{L}(\varepsilon)^{-1}]_{jm}(t_2) C_m^{st}(t_2) \right\rangle.
\end{aligned} \quad (3.132)$$

Wir führen die gleichen Näherungen wie in Abschnitt 3.5 durch und vernachlässigen daher mögliche Korrelationen zwischen dem Rauschen und den kollektiven Variablen. Dabei sehen wir wieder von der Unterscheidung zwischen Ito- und Stratonovich-Interpretation ab, was für kleine Temperaturen absolut tragfähig ist. Dann folgt sofort für die Mittelwerte der stochastischen Kräfte $\langle F_i^{st} \rangle = 0$ und für deren Korrelationen:

$$\begin{aligned}
&\left\langle F_i^{st}(t_1) F_j^{st}(t_2) \right\rangle = \\
&\sigma^2 S^4 \sum_{k=1}^4 \sum_{m=1}^4 \left\langle [\mathbf{L}(\varepsilon)^{-1}]_{ik}(t_1) [\mathbf{L}(\varepsilon)^{-1}]_{jm}(t_1) \int \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_k} \cdot \frac{\partial \vec{S}_{sol}}{\partial U_m}(t_1, r) dr \right\rangle \delta(t_1 - t_2) = \\
&= \sigma^2 S^2 \left\langle \left[\mathbf{L}(\varepsilon)^{-1} \mathbf{M}_G (\mathbf{L}(\varepsilon)^{-1})^T \right]_{ij}(t_1) \right\rangle \delta(t_1 - t_2) \\
&=: D_{ij}(t_1) \delta(t_1 - t_2). \quad (3.133)
\end{aligned}$$

Dabei ist die Korrelationsmatrix von folgender Form

$$D = \begin{bmatrix} D_{XX} & D_{X\Phi_0} & 0 & 0 \\ D_{X\Phi_0} & D_{\Phi_0\Phi_0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D_{AA} & D_{A\Gamma} \\ 0 & 0 & D_{A\Gamma} & D_{\Gamma\Gamma} \end{bmatrix}. \quad (3.134)$$

Analog zum isotropen Fall [4, 5] und dem Kapitel 3.4 benutzen wir voneinander unabhängige Wiener-Prozesse und schreiben folgendermaßen die stochastischen Bewegungsgleichungen mit Dämpfung:

$$\begin{aligned} dX &= F_X^{in} dt + \alpha_1 dW_1 + \alpha_2 dW_2, \\ d\Phi_0 &= F_{\Phi_0}^{in} dt + \alpha_3 dW_2, \\ dA &= F_A^{in} dt + \alpha_4 dW_3 + \alpha_5 dW_4, \\ d\Gamma &= F_{\Gamma}^{in} dt + \alpha_6 dW_4, \end{aligned} \quad (3.135)$$

wobei

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \sqrt{D_{11} - \frac{D_{12}^2}{D_{22}}}, & \alpha_2 &= \frac{D_{12}}{\sqrt{D_{22}}}, & \alpha_3 &= \sqrt{D_{22}}, \\ \alpha_4 &= \sqrt{D_{33} - \frac{D_{34}^2}{D_{44}}}, & \alpha_5 &= \frac{D_{34}}{\sqrt{D_{44}}}, & \alpha_6 &= \sqrt{D_{44}}. \end{aligned} \quad (3.136)$$

In Kapitel 3.5.1 sind wir der Zeitentwicklung der intrinsischen Anteile und der Diffusionskonstanten mit der Methode der *small noise expansion* gerecht geworden. Das Gleichungssystem (3.135) kann nicht mehr analytisch mit dieser Methode gelöst werden. Deswegen müssen wir uns bei der numerischen Lösung von (3.135) Gedanken darüber machen, wie wir die Zeitentwicklung der Erwartungswerte $\langle F^{in}(\dots, U_k, \dots) \rangle$ und $\langle \alpha_i(\dots, U_k, \dots) \rangle$ berechnen bzw. approximieren können. Dazu gehen wir wieder vor wie in [4] und betrachten eine allgemeine Funktion g der kollektiven Variablen, wobei g von der Ordnung σ^0 ist. Wir entwickeln die Funktion um die Erwartungswerte ihrer Argumente:

$$\begin{aligned} g(\dots, U_k, \dots) &= g(\dots, \langle U_k \rangle, \dots) + \sum_{i=1}^4 \frac{\partial g}{\partial U_i}(\dots, \langle U_k \rangle, \dots) (U_i - \langle U_i \rangle) + \\ &\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^4 \frac{\partial^2 g}{\partial U_j \partial U_i}(\dots, \langle U_k \rangle, \dots) (U_j - \langle U_j \rangle) (U_i - \langle U_i \rangle) + \dots \end{aligned} \quad (3.137)$$

Da wir nur Terme der ersten Ordnung in σ betrachten und $\langle U_i - \langle U_i \rangle \rangle = 0$ sowie $U_i - \langle U_i \rangle \propto \sigma$ gilt, folgt, dass in dieser Näherung

$$\langle g(\dots, U_k, \dots) \rangle \approx g(\dots, \langle U_k \rangle, \dots) \quad (3.138)$$

der Fehler der Ordnung σ^2 ist. Die Näherung (3.138) ist also bei den niedrigen Temperaturen, die wir hier verwenden, vollkommen gerechtfertigt. Ersetzen wir g mit F^{in} , so folgt $\langle F_i^{in}(\dots, U_k, \dots) \rangle \approx F_i^{in}(\dots, \langle U_k \rangle, \dots)$. Ersetzen wir g mit den Koeffizienten α_i aus (3.136), welche selbst von der Ordnung σ sind, so ist der Fehler in den D_{ij} dann nur noch von der Ordnung σ^4 . Deswegen können wir auch hier $\alpha_s^{(i)}(\dots, U_k, \dots) \approx \alpha_s^{(i)}(\dots, \langle U_k \rangle, \dots)$ setzen. Dann erhalten wir insgesamt die Gleichungen:

$$dU_i = F_i^{in}(\dots, U_k, \dots)dt + \sum_s \alpha_s^{(i)}(\dots, \langle U_k \rangle, \dots)dW_s, \quad (3.139)$$

und

$$d\langle U_i \rangle = F_i^{in}(\dots, \langle U_k \rangle, \dots)dt \Leftrightarrow \frac{d}{dt}\langle U_i \rangle = F_i^{in}(\dots, \langle U_k \rangle, \dots). \quad (3.140)$$

In Worten beschrieben, heißt das, dass die intrinsischen Kräfte jeweils an denjenigen Mittelwerten der kollektiven Variablen ausgewertet werden, welche zu diesem Zeitpunkt aus allen Realisierungen bestimmt wurden. Genau diese Zeitabhängigkeit, die in (3.140) ausgedrückt wird, beeinflusst auch das Zeitverhalten der Stärke der stochastischen Kräfte F^{st} . Letztere stellen also additives weißes Rauschen dar, dessen Stärke aber zeitabhängig ist.

Im Folgenden werden wir (3.135) numerisch lösen und mit den Ergebnissen von Spindynamik-Simulationen vergleichen. Dazu wird im nächsten Abschnitt der Algorithmus beschrieben, der in den Simulationen verwendet wird.

Bestimmung der kollektiven Variablen im Algorithmus

Im Abschnitt 3.5.1 haben wir die stochastischen Bewegungsgleichungen ohne Dämpfung (3.114) störungstheoretisch gelöst und diejenigen mit Dämpfung (3.135) aus Abschnitt 3.5.2 numerisch. Zum Vergleich simulieren wir die Spindynamik einer Kette von 1000 Spins, deren Grundlage die diskrete Landau-Lifshitz-Gleichung (3.22) ist. Diese Gleichung wird numerisch mit Hilfe des Heun-Algorithmus [18] gelöst, welcher einer geeigneten Behandlung der multiplikativen Kopplung zwischen den Spin- und Rauschkomponenten, die sich aus $\vec{S}_n \times \vec{b}_n$ ergeben, gerecht wird. Als Lösung erhalten wir in jedem Zeitschritt (in unserem Fall $n = 1000$) diskrete Werte der Spins \vec{S}_n .

Nun möchten wir einen Algorithmus konstruieren, um aus diesen Sets von diskreten Spinwerten die kollektiven Variablen zu gewinnen, beginnend mit der Position X des Solitons. Um X zu bestimmen, gehen wir vor wie in Kapitel 3.4.3. Wir definieren wieder eine Funktion

$$F(Y, A_i, \Gamma_i) := \int S^z(r - X, A, \Gamma) \frac{\partial S_{sol}^z}{\partial r}(r - Y, A_i, \Gamma_i) dr. \quad (3.141)$$

Diese verschwindet an der Stelle $Y = X$ wegen ihrer Punktsymmetrie, welche F unabhängig von den Werten A_i und Γ_i besitzt. In den Simulationen verwenden wir

natürlich die diskrete Version von (3.141). Im ersten Zeitschritt werten wir F für die Initialisierungswerte A_0 und Γ_0 aus, indem wir wieder eine Menge von Versuchswerten Y_i verwenden, die symmetrisch um X_0 , die Startposition des Solitons, verteilt sind. Wechselt dann F zwischen Y_j und Y_{j+1} das Vorzeichen von Minus nach Plus, so wird die gesuchte Nullstelle X zwischen die beiden Versuchswerte linear interpoliert. Das ist gegenüber der Bestimmung von X in Kapitel 3.4.3 noch nichts Neues, außer dass F noch von A und Γ abhängt. Diese müssen wir jetzt für den nächsten Zeitschritt bestimmen.

Als nächstes bestimmen wir den extremalen Wert S_{min}^z von S^z , welcher genau der zu X korrespondierende S^z -Wert ist, um eine Beziehung zwischen A und Γ herstellen zu können. Um dieses Ziel zu erreichen, benötigen wir eine geeignete Fitfunktion. Je besser die Fitfunktion sich den diskreten Werten von S^z anpassen lässt, desto präziser kann S_{min}^z bestimmt werden. Da die Lösung (3.15) nicht die geeignete Struktur hat, um sie als Fitfunktion verwenden zu können ($\partial_A \Psi$ bzw. $\partial_\Gamma \Psi$ kann weder nach A noch nach Γ explizit aufgelöst werden), verwenden wir $\text{sech}^2(x)$ zum Fitten. Das damit erhaltene Minimum akzeptieren wir als den gesuchten Wert S_{min}^z . Mit Hilfe dieses Wertes und der Solitonlösung (3.15) können wir A als Funktion von Γ ausdrücken:

$$A = \frac{4(1 - S_{min}^z)}{4 + \beta(1 + S_{min}^z)^2 \Gamma^2}. \quad (3.142)$$

Dann definieren wir:

$$\Delta(\Gamma_i) = \int [S^z - S_{sol}^z(r - X, A_i(\Gamma_i), \Gamma_i)]^2 dr. \quad (3.143)$$

Indem wir wieder einige Versuchswerte Γ_i verwenden, suchen wir ein Γ_j , welches $\Delta(A_i(\Gamma_i), \Gamma_i)$ minimiert. Wir fitten dann eine Parabel durch Γ_{j-1} , Γ_j und Γ_{j+1} im $\Delta - \Gamma$ Raum. Derjenige Γ -Wert, der das Minimum der Parabel darstellt, ist der gesuchte.

Mit dem gerade gefundenen (A, Γ) Paar ermitteln wir, wie oben, nochmals X .

Zuletzt müssen wir noch Φ_0 bestimmen. Dazu benutzen wir den $\arctan(\frac{S^z}{S_x})$ wieder innerhalb eines Bereiches der Spins, für die $1 - S_n^z > 0.01$ gilt. Von dem so erhaltenen Wert Φ müssen wir noch Φ_X abziehen um Φ_0 zu bestimmen. Dabei ist Φ_X nach (3.15) allein durch X , A und Γ festgelegt. Da wir diese Subtraktion nicht elementar durchführen können, da wir Sprünge der ATAN2 Funktion von $(-\pi, \pi)$ berücksichtigen müssen, berechnen wir Φ_0 wie folgt:

$$\text{atan2} \left[\sin(\Phi) \cos(\Phi_X) - \cos(\Phi) \sin(\Phi_X), \cos(\Phi) \cos(\Phi_X) + \sin(\Phi) \sin(\Phi_X) \right]. \quad (3.144)$$

Damit ist ein Zeitschritt zu Ende. Im nächsten Zeitschritt dienen dann die erhaltenen Werte X , A und Γ als neue Initialisierungswerte.

Wie wir schon in Kapitel 3.2.2 diskutiert haben, sind bei gegebener Anisotropie β

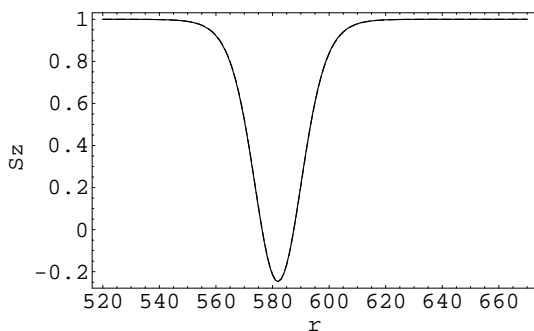


Abbildung 3.16: S^z -Konfiguration nach $t = 800$, gestrichelte Linie: S^z -Konfiguration, beschrieben durch die analytische Lösung (3.15), welche wir an die simulierte Konfiguration mit geeigneten Parametern A und Γ anfitten, durchgezogene Linie: S^z -Konfiguration aus der Simulation mit Initialparametern $A = 1$, $\Gamma = 20$, $\beta = 0.01$, $k_B T = 0$, $\varepsilon = 0.01$. Abweichungen zwischen diesen beiden Kurven können nicht beobachtet werden

die kollektiven Variablen A und Γ recht empfindlich bezüglich struktureller Fluktuationen der solitären Anregung. Diese Tatsache verursacht ein Problem bei der Bestimmung der kollektiven Variablen aus der simulierten Spinkonfiguration. Die Konsequenzen wollen wir nun erläutern. Der durch Rauschen gestörte Solitonpuls (siehe Abbildung (3.3)) besitzt Zacken, die sich vor allem im Anregungszentrum selbst, aber auch außerhalb davon beobachten lassen. Dadurch wird das Soliton durch den sech²-Fit etwas breiter gefittet, sodass wir immer kleine Fluktuationen in S_{min}^z haben. Diese bewirken aber bei nichtverschwindender Anisotropie größere Fluktuationen in A und Γ . Dies kann bei zu großer Anisotropie die Bestimmung von A und Γ unmöglich machen. Im Detail bedeutet das, dass kein Γ mehr gefunden werden kann, das (3.143) minimiert, sodass folglich die Simulation abbricht. Aus diesem Grund müssen wir uns auf den Anisotropiewert $\beta = 0.001$ beschränken. Zuletzt überprüfen wir noch, wie gut die Spinkonfiguration durch den Ansatz (3.15) approximiert wird. Dazu entnehmen wir am Ende einer Simulation die bestimmten Werte für X , A und Γ und setzen sie in (3.15) ein. Diesen Plot vergleichen wir dann mit dem, der die Spinkonfiguration nach Simulationseende darstellt. Aus Abbildung 3.16 kann man keinen sichtbaren Unterschied zwischen den beiden beschriebenen Plots erkennen.

3.5.3 Numerische Ergebnisse

Da das Rauschen, wie man an der Relation (3.128) sehen kann, multiplikativ an die kollektiven Variablen ankoppelt, eignet sich besonders der Heun-Algorithmus, um die stochastischen Bewegungsgleichungen mit Dämpfung (3.135) für alle kollektiven Variablen numerisch zu lösen. Da die numerischen Integrationen der M_{ij} und N_{ij} in (3.128) bei jedem Zeitschritt ausgeführt werden müssen und beide Ausdrücke von relativ komplizierter Struktur sind, parallelisieren wir den Quelltext des Programms. Dies ist aber noch nicht ausreichend, um das Programm schnell genug zu

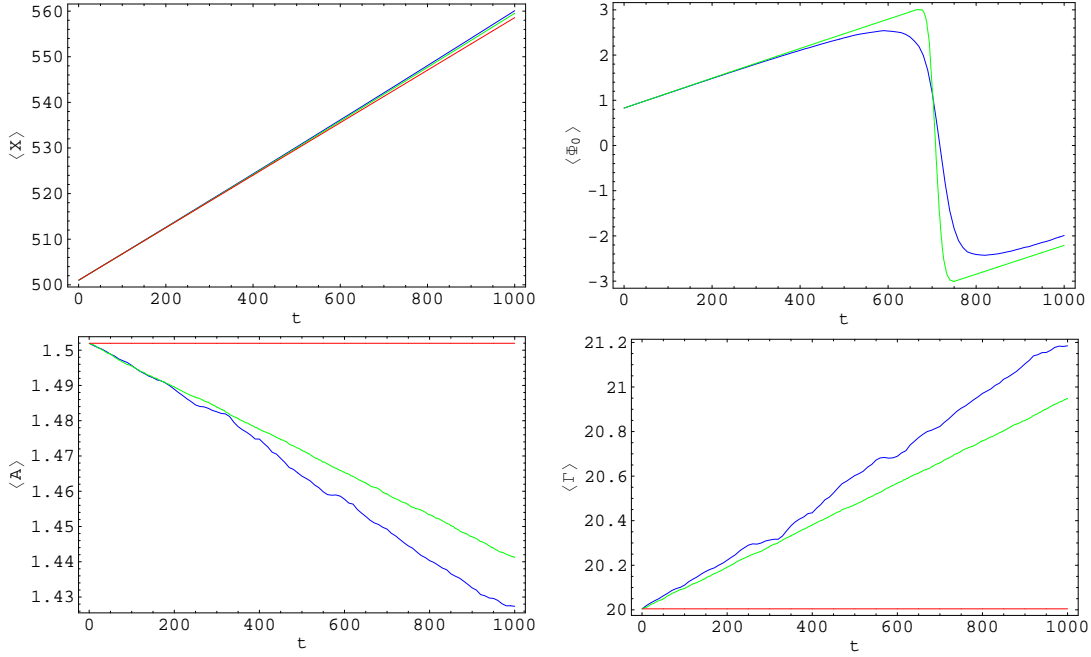


Abbildung 3.17: Mittelwerte der kollektiven Variablen, blaue Linie: Simulationsergebnisse, grüne Linie: numerische Integration der stochastischen Bewegungsgleichung mit Dämpfung (3.135), rote Linie: störungstheoretische Lösung der stochastischen Bewegungsgleichung (3.117), mit $\beta = 0.001$, $k_B T = 0.001$, $\varepsilon = 0.01$. Als Initialparameter benutzen wir $A = 1.5$, $\Gamma = 20$, $\Phi_0 = 0.83$.

machen. Daher benutzen wir einen Integrationszeitschritt der Größe 0.1. Wir haben uns vergewissert, dass die Verwendung dieses Zeitschrittes die Genauigkeit der Ergebnisse nicht merklich schmälert. Diese Ergebnisse vergleichen wir mit denen, die wir aus den Spindynamik-Simulations-Ergebnissen erhalten. Sowohl in der numerischen Lösung von den stochastischen Bewegungsgleichungen mit Dämpfung (3.135) als auch in den Simulationen verwenden wir 1000 Realisierungen und betrachten eine Gesamtzeit von $t = 1000$ bei einer Temperatur von $k_B T = 0.001$ und einer Dämpfung von $\varepsilon = 0.01$. Weiterhin wollen wir hier Ergebnisse präsentieren, die sich auf zwei verschiedene Anfangsparametersets Φ_0 , A und Γ beziehen und in den Abbildungen 3.17, 3.18, 3.19 und 3.20 zu sehen sind.

Um die Solitondynamik zu beschreiben, ist die wichtigste kollektive Variable unumstritten die Position $X(t)$. Sowohl in $\langle X \rangle$ als auch in $Var(X)$ erhalten wir eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Spindynamik, der numerischen Lösung der stochastischen Bewegungsgleichung mit Dämpfung und dem störungstheoretischen Ergebnis aus Abschnitt 3.5.1. Für den Mittelwert $\langle \Phi_0 \rangle$ erhalten wir auch eine gute Übereinstimmung.

Wie wir bereits Anfang des Kapitels (3.5.1) erwähnt haben, beziehen sich die dort erhaltenen Ergebnisse auf mittlere Zeiten, die höchstens bis ca. $t = 200$ ausgedehnt werden können. Die Vernachlässigung der Dämpfung in (3.5.1) ist also tatsächlich eine ungeeignete Approximation für lange Zeiten, insbesondere was die Dynamik

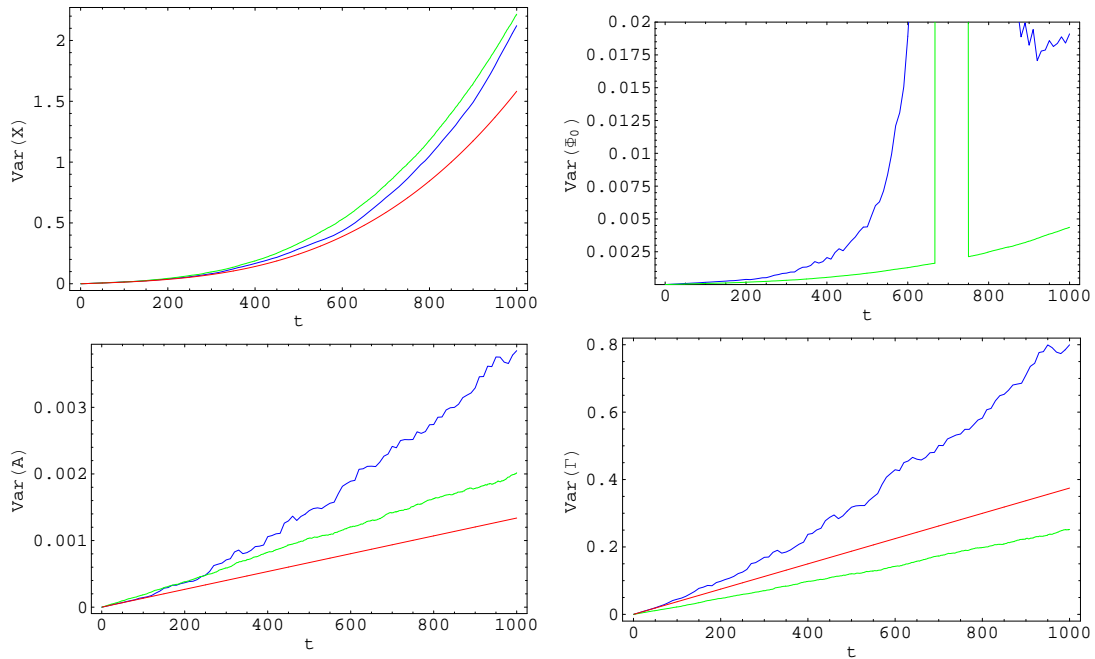


Abbildung 3.18: Varianzen der kollektiven Variablen, blaue Linie: Simulationsergebnisse, grüne Linie: numerische Integration der stochastischen Bewegungsgleichung mit Dämpfung (3.135), rote Linie: störungstheoretische Lösung von stochastischen Bewegungsgleichung (3.117), mit $\beta = 0.001$, $k_B T = 0.001$, $\varepsilon = 0.01$. Als Initialparameter benutzen wir $A = 1.5$, $\Gamma = 20$, $\Phi_0 = 0.83$.

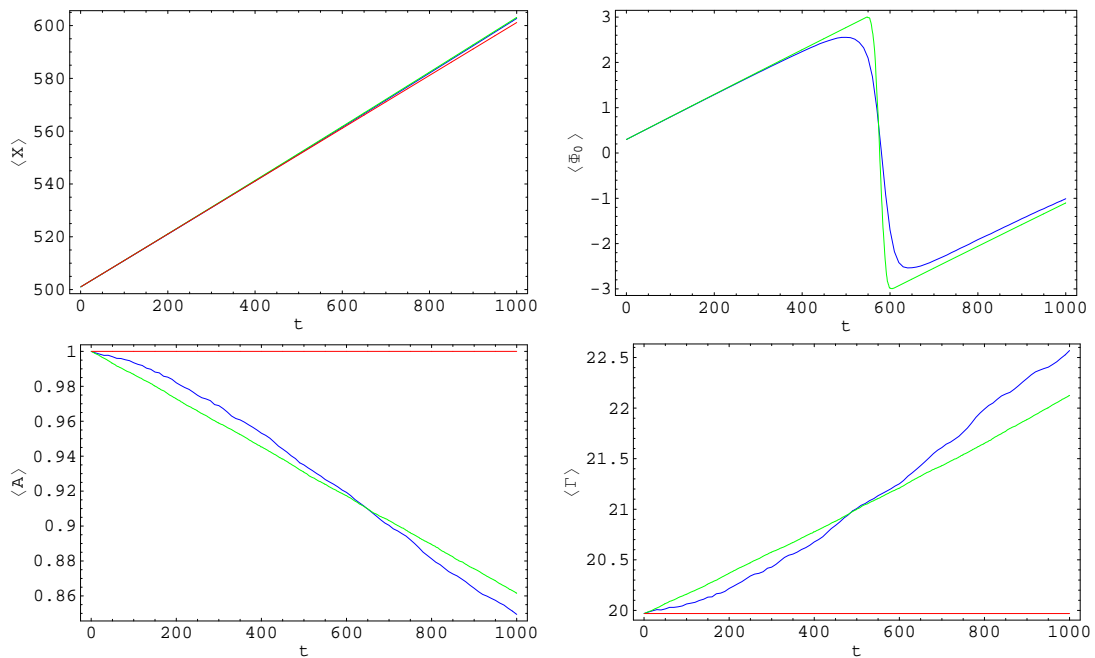


Abbildung 3.19: Mittelwerte der kollektiven Variablen, blaue Linie: Simulationsergebnisse, grüne Linie: numerische Integration der stochastischen Bewegungsgleichung mit Dämpfung (3.135), rote Linie: störungstheoretische Lösung von stochastischen Bewegungsgleichung (3.117), mit $\beta = 0.001$, $k_B T = 0.001$, $\varepsilon = 0.01$. Als Initialparameter benutzen wir $A = 1$, $\Gamma = 20$, $\Phi_0 = 0.298$.

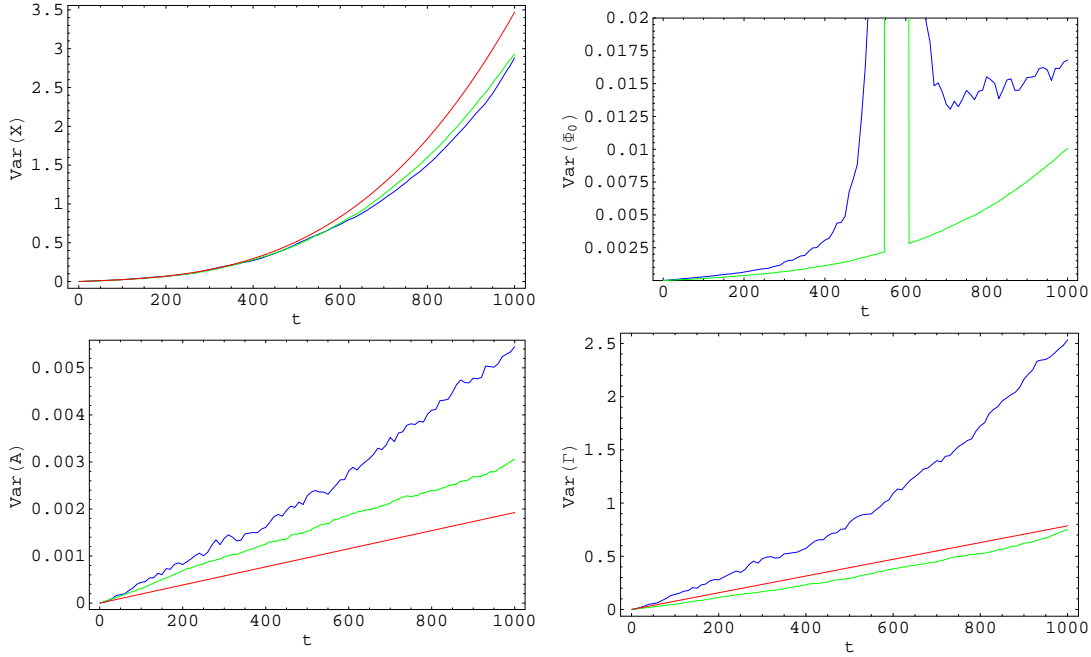


Abbildung 3.20: Varianzen der kollektiven Variablen, blaue Linie: Simulationsergebnisse, grüne Linie: numerische Integration der stochastischen Bewegungsgleichung mit Dämpfung (3.135), rote Linie: störungstheoretische Lösung von stochastischen Bewegungsgleichung (3.117), mit $\beta = 0.001$, $k_B T = 0.001$, $\varepsilon = 0.01$. Als Initialparameter benutzen wir $A = 1$, $\Gamma = 20$, $\Phi_0 = 0.298$.

von A und Γ angeht.

Die systematischen Abweichungen zwischen den Spindynamik-Simulationen und der numerischen Lösung der stochastischen Bewegungsgleichung mit Dämpfung in A und Γ werden durch Probleme in der Bestimmung dieser kollektiven Variablen verursacht. Wie dies geschieht, haben wir im letzten Unterabschnitt *Bestimmung der kollektiven Variablen im Algorithmus* erläutert. Da Φ_0 unter anderem aus A und Γ bestimmt wird, beeinflussen natürlich Fluktuationen in A und Γ die Varianz $Var(\Phi_0)$. Als Konsequenz weist $Var(\Phi_0)$ in den Simulationen einen größeren Wert auf als in der Numerik. Der Sprung in $Var(\Phi_0)$ ist ein Artefakt der Bestimmungsprozedur. Dabei hat die ATAN2-Funktion in Fortran Sprünge von $-\pi$ nach π , was sich wiederum als Sprung in der Varianz niederschlägt. Um die Ergebnisse in Φ_0 miteinander vergleichen zu können, haben wir in der numerischen Lösung der stochastischen Bewegungsgleichung mit Dämpfung das dort berechnete Φ_0 auf den Bereich $(-\pi, \pi)$ gefaltet. Daher beobachten wir in den Abbildungen 3.18 und 3.20 auch Sprünge der gestrichelten Linien in $Var(\Phi_0)$, wobei man in den Simulationsergebnissen eine deutliche Verbreiterung eines Sprunges feststellt. Der Grund dafür ist die Tatsache, dass Φ_0 nicht simultan in allen Realisierungen springt. Da sich zu einem bestimmten Zeitpunkt die Werte von Φ_0 in den verschiedenen Realisierungen um den Wert 2π unterscheiden können, kommt es zu diesen Zeitpunkten zu einer breiteren Verteilung um den Mittelwert $\langle \Phi_0 \rangle$ und damit einer größeren Varianz.

3.5.4 Zusammenfassung

In Kapitel 3 haben wir die Diffusion von Solitonen auf einer klassischen, anisotropen Heisenbergkette untersucht. Dabei wesentlich war die Kopplung des Systems an ein Wärmebad, sodass wir dem Fluktuations-Dissipations Theorem gerecht wurden. Modelliert wurde das Wärmebad durch Rauschterme in der Landau-Lifshitz-Gleichung, welche additiv zum effektiven B -Feld hinzukamen und damit magnetisch an das Spinfeld gekoppelt waren. Neben diesem Energiefluss ins System benötigten wir auch einen Energietransfer aus dem System heraus. Diesen modellierten wir durch den Gilbert-Dämpfungsterm. Um die Dynamik der solitären Anregung zu untersuchen, betrachteten wir drei unterschiedlich lange Zeitperioden. In der ersten und kürzesten ($t \lesssim 100$) nahmen wir an, dass die Form des Solitons sich kaum verändert und somit eine adiabatisch starre Form der Struktur angenommen werden darf. Stochastische Fluktuationen traten nur in der Position des Solitons auf. Weiterhin hat die Solitonenposition gegenüber den anderen kollektiven Variablen eine größere Bedeutung, da sie bekanntlich im Allgemeinen eine experimentell leicht zu bestimmende Größe ist.

Dazu behandelten wir das Soliton als adiabatisch starr, d.h. es wurde mathematisch wie ein Teilchen behandelt. Kennzeichnend dafür ist in der Festlegung des Solitonortes die Verwendung der Schwerpunktsdefinition in (3.4.1) und (3.4.2). Die Verwendung der impliziten Ortsvariable benutzt die Eigenschaft, dass $\partial_r S^z$ stark lokalisiert ist, sodass wir keine Schranke, wie wir sie in (3.4.1) und (3.4.2) beschrieben haben, verwenden mussten und Fluktuationen der Struktur die Ortsbestimmung kaum beeinflussten. Deswegen gaben wir dieser Ortsbestimmungsmethode den Vorzug bei den Berechnungen in den folgenden Kapiteln. Aufgrund unterschiedlicher Übersetzung lokaler Fluktuationen in die Ortsdefinition zeigten die drei unterschiedlichen Ortsdefinitionen den gleichen Mittelwert, aber unterschiedliche Varianzen. Aufgrund des gleichen zeitlichen Mittelwertes $\langle X \rangle$ verwundert es nicht, dass die deterministische Geschwindigkeit aller drei Definitionen die gleiche ist. Die Diffusionskonstanten nehmen mit steigender Anisotropie ab, was im Gegensatz zu dem Verhalten bei $t > 100$ steht. Aufgrund einer durch die Anisotropie erhöhten Solitonenergie und verstärkten Wechselwirkung der S^z -Komponenten geht bei gegebener Temperatur eine steigende Anisotropie mit einer abnehmenden Ortsdiffusion einher. Dieser Effekt wird aber bei größeren Zeitskalen durch die Fluktuationen in der Solitonstruktur, die einen zusätzlichen diffusiven Beitrag zur Solitonenposition liefern, kompensiert und tritt in den Hintergrund. Um die Diffusion eines Solitons über größere Zeiträume hinweg zu betrachten, war es aber nötig, die adiabatisch starre Form des Solitons aufzugeben.

In Kapitel 3.5.1 berücksichtigten wir Zeitperioden $100 \lesssim t \lesssim 200$, in denen auch stochastische Fluktuationen in A und Γ , jedoch nicht durch Dämpfung hervorgerufene Änderungen, berücksichtigt wurden. Da die deterministische Geschwindigkeit V des

Solitons durch A und Γ bestimmt ist, gehen diese Fluktuationen direkt in V ein. Das führt zu einem zusätzlich diffusiven Effekt und äußert sich durch einen kubischen Anteil ($\propto t^3$) in der Ortsvarianz $Var(X)$. Diesen Effekt bezeichneten wir als *superdiffusiv*. Hier zeigte sich deutlich eine Zunahme der Varianzen in X , A und Γ mit der Anisotropie β . Das konnten wir auch daran erkennen, dass alle Diffusionskonstanten mit β zunehmen. Wie wir in den Abbildungen 3.18 und 3.20 erkennen können, werden die Varianz und der Mittelwert des Solitonortes durch das störungstheoretische Resultat selbst für lange Zeiten recht gut wiedergegeben. Dies liegt vor allem daran, dass die Bestimmung von X in den Simulationen mit der Berechnung von X in (3.5.1) korrespondiert. Dagegen beschreibt das störungstheoretische Ergebnis die Dynamik von $\langle A \rangle$ und $\langle \Gamma \rangle$ für längere Zeiten (d.h. $t > 300$) sehr unbefriedigend.

Deswegen berücksichtigten wir noch die Dämpfung. Damit erhielten wir ein Differentialgleichungssystem für X , A , Γ und Φ_0 . Mit Hilfe von Wiener Prozessen konnten wir daraus die stochastischen Bewegungsgleichungen mit Dämpfung ableiten. Diese lösten wir numerisch und verglichen den Zeitverlauf der Varianzen und Mittelwerte mit dem, welchen wir aus den Simulationen erhalten hatten. In $Var(X)$, $\langle X \rangle$ sowie in $\langle \Phi_0 \rangle$ erhielten wir eine gute Übereinstimmung. Die Dynamik in A und Γ , welche wir aus der simulierten Konfiguration erhielten, ist Problemen bei der Bestimmung ausgesetzt. Bei nichtverschwindender Anisotropie führen minimale Schwankungen in S_{min}^z zu großen Schwankungen in A und Γ . Die Varianzen von A und Γ liegen damit deutlich über den theoretischen Werten. Ein weiterer Grund für die Abweichungen [4] ist die mangelnde Korrespondenz zwischen der theoretischen Herleitung von A und Γ und deren Gewinnung aus der Simulation. Diese Fluktuationen beeinflussen die Varianz der Variable Φ_0 aufgrund deren Berechnung aus A und Γ , sodass auch $Var(\Phi_0)$ in der Simulation deutlich größer ausfällt.

Am Ende von Kapitel 3.5.2 haben wir uns vergewissert, dass die Spinkonfiguration sehr genau durch den Ansatz (3.15) approximiert werden kann. Dadurch haben wir eine Rechtfertigung erhalten, dass alle durchgeführten Näherungen angewendet werden durften. Das betrifft sowohl die Kontinuumsapproximation als auch die Beschreibung der Dynamik mittels kollektiver Variablen in adiabatischer Approximation.

Kapitel 4

Das zweidimensionale Heisenbergssystem

In diesem Kapitel untersuchen wir zweidimensionale topologische Solitonen des klassischen zweidimensionalen Heisenbergmodells auf einem quadratischen Gitter. Wir stellen zunächst dieses Modell zusammen mit den zugehörigen Erhaltungsgrößen vor. Ausgangspunkt hierfür ist die Hamiltonfunktion (2.1), bzw. (2.24), die bereits anfangs in Kapitel 2 diskutiert wurde. Danach begründen wir die Notwendigkeit einer dynamischen Stabilisierung, indem wir Stellung zu den Aussagen des Hobart-Derrick-Theorems zusammen mit den Eigenschaften des Belavin-Polyakov-Solitons nehmen. Ferner zeigen wir durch Rechnung, dass diese Stabilisierung des Solitons für das von uns betrachtete Soliton tatsächlich gegeben ist. Anschließend beschreiben wir die Struktur eines Solitons, das allein durch die Präzessionsfrequenz der Spins charakterisiert ist. Die Struktur können wir für bestimmte Grenzfälle analytisch und für beliebige Solitonradien durch sogenannte Versuchsfunktionen, die die tatsächliche Lösung approximieren, beschreiben. Um die Bewegung des Solitons als Ganzes, welche gemäß den Vorhersagen in [30] durch interne, im Soliton gebundene Magnonen zustande kommt, darstellen zu können, führen wir den Schwerpunkt des Solitons als Ortsvariable ein. Beziehen wir noch die Störungen durch die Magnonen in die Berechnung der Solitongeschwindigkeit mit ein, so können wir Aussagen darüber machen, welche der vorhandenen Magnonenmoden überhaupt zur Solitonbewegung beitragen. Die im Kontinuumsmodell getroffenen Ergebnisse werden zuletzt mit Spindynamiksimulationen verglichen. Abschließend fassen wir die Ergebnisse zusammen und diskutieren diese.

4.1 Das Modell auf dem quadratischen Gitter und Erhaltungsgrößen

Gemäß den allgemeinen Prinzipien der Quantenmechanik korrespondiert jede Welle, die sich in einem Medium befindet, mit einem Quasiteilchen. Im Ferromagneten entsprechen Spinwellen den Quasiteilchen, die man als *Magnonen* bezeichnet.

Der Impuls p und die Energie E eines freien Magnons sind

$$p = \hbar k, \quad E(k) = \hbar\omega(k), \quad (4.1)$$

wobei $\omega(k)$ die Frequenz der Spinwelle und k ihr Wellenvektor sind.

Die linearen Anregungen über dem Grundzustand in unserem System (also die linearen Magnonen) haben die wohlbekannt Form [6] $1 - \vec{S}_n^z = \text{const} \ll 1$, $\vec{S}_n^x + \vec{S}_n^y \propto \exp(i\vec{k} \cdot \vec{n}a - i\omega t) = \exp(ik_x a + ik_y a - i\omega t)$, mit folgendem Dispersionsgesetz:

$$\omega(\vec{k}) = \omega_0 + 4JS \left[\sin^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{k_y a}{2} \right) \right]. \quad (4.2)$$

Hier ist $\omega_0 = 4JS\tilde{K}$ die sogenannte homogene Resonanzfrequenz, \vec{k} der Wellenvektor und a die Gitterkonstante. Wie man im Magnonenspektrum $\omega(\vec{k})$ sehen kann, existiert eine Lücke der Breite ω_0 . Freie Magnonen können also nur existieren, wenn $\omega > \omega_0$. Im Easy-Axis-Modell untersucht man folglich lokale Schwingungen innerhalb des Bereichs $0 < \omega < \omega_0$.

Solche lokalen Schwingungen sind durch die Blochwände im Soliton gebunden. Diese wurden ausführlichst in [30] untersucht und tragen, wie wir später sehen werden, Verantwortung für die Solitonbewegung.

Im Falle kleiner Anisotropien ist die charakteristische Länge $l_0 = a/\sqrt{4\tilde{K}}$, welche die Breite der Blochwand bezeichnet, viel größer als die Gitterkonstante. Wir verwenden ausschließlich kleine Anisotropien, sodass wir die Kontinuumsnäherung der Hamiltonfunktion verwenden können. Ausgehend von der Kontinuumsversion der Hamiltonfunktion (2.24) können wir diese mit $\Psi = \cos \Theta$ schreiben als:

$$E = \frac{JS^2}{2} \int d^2r \left[(\nabla\Theta)^2 (1 + K \sin^2 \Theta) + \sin^2 \Theta (\nabla\Phi)^2 + 4\tilde{K} \sin^2 \Theta \right], \quad (4.3)$$

wobei $4\tilde{K} = 4K + 2d$.

Aus der Lagrangefunktion

$$\mathcal{L} = -S \int d^2r (1 - \cos \Theta) \frac{\partial \Phi}{\partial t} - E[\Theta, \Phi] \quad (4.4)$$

erhalten wir die Bewegungsgleichungen:

$$\sin \Theta \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{a^2}{S} \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \Theta} = -\frac{a^2}{S} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Theta} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \Theta} \right], \quad (4.5a)$$

$$\sin \Theta \frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{a^2}{S} \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \Phi} = \frac{a^2}{S} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \Phi} \right], \quad (4.5b)$$

wobei \mathcal{L} die Energiedichte von (4.3) darstellt. Dies ist die gleiche Identität wie (2.30)

aus Kapitel 2. Die Bewegungsgleichungen in Φ und Θ lauten entsprechend:

$$\Delta\Theta (1 + K \sin^2 \Theta) + K \sin \Theta \cos \Theta (\nabla\Theta)^2 - \cos \Theta \sin \Theta \left[4\tilde{K} + (\nabla\Phi)^2 \right] - \frac{\dot{\Phi}}{JS} \sin \Theta = 0 \quad (4.6a)$$

$$\sin^2 \Theta \Delta\Phi + 2 \cos \Theta \sin \Theta \nabla\Phi \nabla\Theta + \frac{\dot{\Theta}}{JS} \sin \Theta = 0. \quad (4.6b)$$

In der Regel wird der Beitrag $K \sin^2 \Theta$ in Gleichung (4.3) nicht berücksichtigt [6,30], da dieser nur innerhalb des Solitons einen nichtverschwindenden Beitrag hat. Deswegen können wir diesen Summanden gegenüber +1 vernachlässigen. Demzufolge lässt sich die Energie (4.3) schreiben als:

$$E = \frac{JS^2}{2} \int d^2r \left[(\nabla\Theta)^2 + \sin^2 \Theta (\nabla\Phi)^2 + \frac{1}{l_0^2} \sin^2 \Theta \right], \quad (4.7)$$

wobei $l_0^2 = \frac{a^2}{4K}$.

Im Grenzfall großer Wellenlängen können die Magnonenanregungen der Form $\Theta = \text{const} \ll 1$, $\Phi = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t$ durch das Magnonenspektrum

$$\omega(\vec{k}) = \omega_0(1 + k^2 l_0^2), \quad (4.8)$$

das sich aus der diskreten Form ableiten lässt, beschrieben werden.

Die Erhaltungsgrößen unseres Systems sind Gesamtmagnetisierung S_z und die z -Komponente des Bahndrehimpulses \vec{L} , welcher sich aus dem Vektorprodukt, bestehend aus dem Ort \vec{r} und dem kanonischen Impuls $\vec{P} = S/a^2 \int d^2r (1 - \cos \Theta) \vec{\nabla}\Phi$, ergibt. Da Φ in der Energiedichte \mathcal{E} nicht explizit vorkommt (Eigenschaft der Spinraum-Isotropie), ist S_z ein Bewegungsintegral:

$$S_z = S \int d^2r (1 - \cos \Theta). \quad (4.9)$$

Diese Identität ergibt die kontinuierliche Fassung des diskreten Ausdrucks (2.19), dessen Erhaltung wir in Kapitel 2.1 gezeigt haben. Leiten wir nach der Zeit total ab, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \dot{S}_z &= \int \sin \Theta \dot{\Theta} d^2r \stackrel{(4.5)}{=} -\frac{a^2}{S} \int \left[\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \Phi} + \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \nabla \Phi} \right] d^2r \\ &= -\frac{a^2}{S} \int \left[\nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \nabla \Phi} \right] d^2r = -\frac{a^2}{S} \oint \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \nabla \Phi} \vec{n} dl = \\ &= -\frac{a^2}{S} \oint \sin^2 \Theta \vec{\nabla} \cdot \Phi \vec{n} dl = \int_0^{2\pi} \sin^2 \Theta \frac{\partial \Phi}{\partial \rho} \frac{L}{2} d\chi = 0, \end{aligned} \quad (4.10)$$

da Θ fern des Solitonenzentrums gegen Null strebt. Dabei haben wir die Polarkoordinaten χ und $\rho = r/l_0$ und die Systemgröße L verwendet. Schreiben wir die z -Komponente der Gesamtmagnetisierung (4.9) in Polarkoordinaten, so erhalten wir:

$$S_z = N = \underbrace{\frac{S}{a^2} \frac{2\pi}{l_0^2}}_{N_2} \int \rho (1 - \cos \Theta) d\rho, \quad (4.11)$$

wobei N_2 der maximal möglichen Anzahl derjenigen Spins entspricht, die sich innerhalb der Fläche $l_0^2\pi$ im angeregten Zustand mit $S^z = -1$ befinden [6, 34]. Dieses Integral konvergiert, wenn, wie in unserem Fall, $\cos \Theta$ die Solitonlösung beschreibt, und es entspricht der Anzahl N der im Soliton gebundenen Magnonen.

Wir werden jetzt explizit nachweisen, dass auch die z -Komponente des Bahndrehimpulses

$$L_z = -\frac{S}{a^2} \int d^2r (1 - \cos \Theta) \left[\vec{r} \times \vec{\nabla} \Phi \right]^z \quad (4.12)$$

eine Erhaltungsgröße im Kontinuumsmodell darstellt. Es gilt:

$$\begin{aligned} -\dot{L}_z &= \frac{S}{a^2} \int \left[\sin \Theta \dot{\Theta} \frac{\partial \Phi}{\partial \chi} + (1 - \cos \Theta) \frac{\partial}{\partial \chi} \dot{\Phi} \right] d^2r \\ &\stackrel{(4.5)}{=} \int \left[-\frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial \chi} + \frac{S}{a^2} \frac{\partial}{\partial \chi} \left((1 - \cos \Theta) \dot{\Phi} \right) - \frac{S}{a^2} \dot{\Phi} \frac{\partial}{\partial \chi} (1 - \cos \Theta) \right] d^2r \\ &\stackrel{(4.5)}{=} - \int \left[\frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial \chi} + \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \Theta} \frac{\partial \Theta}{\partial \chi} \right] d^2r - \underbrace{\frac{S}{a^2} \int \frac{\partial}{\partial \chi} \left[(1 - \cos \Theta) \dot{\Phi} \right] r dr d\chi}_{=0} \\ &= - \int \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \chi} d^2r = 0, \end{aligned} \quad (4.13)$$

da keine bestimmte Richtung oder Achse im Raum ausgezeichnet ist. Wegen dieser Raumisotropie ist L_z also erhalten.

Jedoch hat man im diskreten System keine Isotropie des Raumes, da hier das System nur um diskrete Werte $n\pi/2$, $n \in \mathbb{Z}$, gedreht werden kann. Somit ist L_z im diskreten System nicht erhalten. Die Erhaltung von S_z und L_z im Kontinuumsmodell gilt nicht für ein Easy-Plane-System.

4.2 Das Belavin-Polyakov-Soliton und die Solitonstabilität

Im zweidimensionalen isotropen ferromagnetischen Heisenbergssystem sind alle Spins im Grundzustand zueinander parallel ausgerichtet, wobei es keine Vorzugsrichtung der Spins gibt. Die einfachste nichtlineare Anregung in diesem System ist ein zweidimensionales Soliton von endlicher Energie. Es zeichnet sich dadurch aus, dass sich die Spins weit entfernt vom Solitonzentrum in einem Grundzustand und nahe des Zentrums in einem anderen Grundzustand mit der entgegengesetzten Spinrichtung befinden. Topologische Eigenschaften eines Solitons werden durch die topologische Ladung q beschrieben. Diese erhält man durch die Relation

$$q = \frac{1}{8\pi} \int d^2x \varepsilon_{\alpha\beta} \left[\vec{m} \cdot (\nabla_\alpha \vec{m} \times \nabla_\beta \vec{m}) \right] = \frac{1}{4\pi} \int \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \frac{\partial \Phi}{\partial y} - \frac{\Psi}{\partial y} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) dx dy \quad (4.14a)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int \sin \Theta d\Theta d\Phi. \quad (4.14b)$$

Der sogenannte Pontryagin-Index nimmt ganze Werte $q \in \mathbb{Z}$ an und stellt gleichzeitig ein Bewegungsintegral dar. Das einfachste zweidimensionale, topologische Soliton stellt das Belavin-Polyakov-Soliton dar. Dieses ist formal die Lösung der zweidimensionalen isotropen Landau-Lifshitz-Gleichung und wird beschrieben durch [36]

$$\tan \frac{\Theta}{2} = \left(\frac{R}{r} \right)^{|q|}, \quad \Phi = \varphi_0 + q\chi, \quad (4.15)$$

wobei r und χ Polarkoordinaten der XY -Ebene und φ_0 eine beliebige Konstante darstellen. Die Energie (4.7) dieses Solitons hängt nicht vom Solitonradius R ab. Dies ist eine Folge der Skaleninvarianz des isotropen Modells. Die Energie des Belavin-Polyakov-Solitons beträgt

$$E = 4\pi|q|JS^2. \quad (4.16)$$

Dieses Soliton stellt aber ein eher akademisches Problem dar, da in der Realität jeder Ferromagnet irgendeine Art von Anisotropie besitzt. Bereits jede kleinste Anisotropie würde die Skaleninvarianz des Modells verletzen, weil dann die Solitonenergie in der niedrigsten Ordnung von R/l_0 die Form

$$E = 4\pi|q|JS^2 + \text{const} \left(\frac{R}{l_0} \right)^2 \quad (4.17)$$

annimmt. Dieser Ausdruck der Energie hat aber kein Minimum für nichtverschwindende Solitonradien, sodass ein statisches Soliton nicht existiert. Dies entspricht der Aussage des Hobart-Derrick-Theorems, nach welchem in zweidimensionalen Kontinuumsmodellen die Anisotropieenergie verschwinden muss, damit ein statisches, zweidimensionales Soliton existieren kann. Aus diesem Grund gibt es im Kontinuumsmodell allein das Belavin-Polyakov-Soliton, welches statisch und stabil ist.

Jedoch kann dieses Soliton im diskreten Modell aus folgenden Gründen nicht stabilisiert werden: Um das kontinuierliche Modell möglichst genau an das diskrete anzunähern, treten Feldgradienten höherer Ordnung auf, wie beispielsweise $J'S^2(\Delta\Psi)^2$. Diese tragen zur Energie in Form eines weiteren additiven Terms bei:

$$E(R) = JS^2 \left[1 + \xi_1 \left(\frac{R}{l_0} \right)^2 + \xi_2 \frac{J'}{J} \left(\frac{a}{R} \right)^2 \right]. \quad (4.18)$$

Die Energie $E(R)$ hat aber nur ein Minimum, wenn $J' > 0$ ist. Es konnte jedoch gezeigt werden [51], dass $J' < 0$ ist, und dass es damit kein statisches Soliton geben kann, das mit einem Energieminimum von (4.18) korrespondiert.

Daher suchte man nach anderen Wegen, ein topologisches, zweidimensionales Soliton zu stabilisieren [37, 38].

4.3 Dynamische Stabilisierung des Solitons

Wir wollen nun die Möglichkeiten diskutieren, ein topologisches, zweidimensionales Soliton zu stabilisieren. Dazu eignet sich eine dynamische Stabilisierung. Hierfür muss nach [38] mindestens eine der Größen S_z oder L_z notwendigerweise erhalten sein, damit ein Soliton dynamisch stabilisiert ist. Das entspricht entweder einer Präzessionsbewegung der Spins bzw. einer Rotation des Solitons. Da in unserem Fall keine Rotationsbewegung des Solitons vorliegt, konzentrieren wir uns auf ein Soliton, das allein durch die Präzessionsbewegung der Spins charakterisiert ist. Wir werden nun zeigen, dass das Soliton durch die Existenz der Erhaltungsgröße S_z im Kontinuumsmodell tatsächlich stabilisiert wird. Dabei gehen wir analog zu [37, 38] vor und betrachten folgenden Ausdruck:

$$\delta \{ \mathcal{E}[\Theta, \Phi] - \lambda \mathcal{S}[\Theta, \Phi] \} = 0, \quad (4.19)$$

wobei λ ein Lagrange-Multiplikator ist. Man bemerke, dass das Funktional $\mathcal{E} - \lambda \mathcal{S}$ ein Extremum haben kann, auch wenn die Energie keines hat. Das Extremum von (4.19) ist die 1-Solitonlösung der zweidimensionalen Landau-Lifshitz-Gleichung. Dabei entspricht das Funktional \mathcal{S} der Erhaltungsgröße S_z und das Funktional in (4.19) der Lagrangefunktion (4.4). Somit lautet diese

$$\mathcal{L} = \frac{S}{a^2} \int d^2r \{ \mathcal{E}[\Theta, \Phi] - (1 - \cos \Theta) \omega_p \}. \quad (4.20)$$

Natürlich kann ein stabiles Soliton mit einem Energieminimum für ein gegebenes fixes S_z einhergehen. In unserem Fall aber konnte verifiziert werden [37, 38], dass eine dynamische Solitonlösung einem Sattelpunkt des Funktionals (4.19) entspricht. Daher ist die Frage nach der Stabilität eines dynamischen Solitons nichttrivial. Deswegen zeigten Zhmudskii et al. die Solitonstabilität unter Verwendung der *direkten Lyapunov Methode*. Nach längerer Rechnung konnten die Autoren durch diese Methode die asymptotische Stabilität eines einparametrischen Solitons nachweisen, wenn es folgende Bedingung erfüllt:

$$\frac{\partial N}{\partial \omega_p} < 0. \quad (4.21)$$

Diese Bedingung gilt in unserem Fall, wie wir später durch analytische Rechnung bestätigen können.

Nun haben wir die Stabilität eines einparametrischen Solitons im Kontinuumsmodell, das durch die Präzessionsfrequenz der Spins charakterisiert ist, nachgewiesen. In später folgenden Kapiteln werden wir uns sodann mit der Dynamik eines zweiparametrischen Solitons beschäftigen, das sich sowohl durch die Präzession der Spins als auch durch die Kreisbewegung seines Schwerpunktes auszeichnet. Durch Spindynamik-Simulationen werden wir sehen, dass im diskreten System sowohl einparametrische als auch zweiparametrische Solitonen stabil sind. Da das Kontinuums-

modell eine Näherung des diskreten Modells ist, folgt aus der Stabilität im diskreten Modell sofort die Stabilität in beiden Fällen für das Kontinuumsmodell.

4.4 Das einparametrische Soliton

Wir beschreiben nun die einfachste dynamische, nichtlineare Anregung des Systems, gegeben durch (4.3) und (4.4), nämlich ein zirkulärsymmetrisches, topologisches, präzedierendes Soliton. Das Gleichungssystem (4.6) können wir folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned} & (K \sin^2 \Theta + 1) \left(\frac{d^2 \Theta}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\Theta}{dr} \right) + K \sin \Theta \cos \Theta \left(\frac{d\Theta}{dr} \right)^2 - \\ & - \sin \Theta \cos \Theta \left(4\tilde{K} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \chi} \right)^2 \right) - \frac{\dot{\Phi}}{JS} \sin \Theta = 0, \end{aligned} \quad (4.22)$$

mit $r^2 = x^2 + y^2$ und $\chi = \arctan(y/x)$. Da sowohl $K \sin \Theta \cos \Theta \left(\frac{d\Theta}{dr} \right)^2$ als auch $K \sin^2 \Theta \left(\frac{d^2 \Theta}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\Theta}{dr} \right)$ von höherer Ordnung als Θ^2 sind, werden sie in der Literatur für weitere Berechnungen nicht mehr berücksichtigt [6, 30], sodass sich (4.22) schreiben lässt als

$$\frac{d^2 \Theta}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\Theta}{dr} - \sin \Theta \cos \Theta \left(\left(\frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial \chi} \right)^2 + \frac{1}{l_0^2} \right) - \frac{\dot{\Phi}}{JS} \sin \Theta = 0. \quad (4.23)$$

Wir betrachten nun einparametrische Solitonen und beschreiben diese durch folgende Gleichung:

$$\Phi = \varphi_0 + q\chi - \omega_p t, \quad (4.24a)$$

$$\Theta = \Theta_0(\rho), \quad \Theta_0(0) = \pi, \quad \Theta_0(\infty) = 0, \quad (4.24b)$$

wobei $\rho = r/l_0$ und χ Polarkoordinaten in der Ebene des Magneten darstellen, $q \in \mathbb{Z}$ die topologische Ladung bezeichnet und ω_p ($0 < \omega_p < \omega_0$) die Frequenz der internen Präzession der Spins darstellt. Das einparametrische Soliton stellt ein kreisförmige Blochwand dar, wobei die Spins im Inneren vorzugsweise in die negative z -Richtung und im äußeren Bereich vorzugsweise in die positive z -Richtung gerichtet sind (siehe Abbildung 4.1). Im Gegensatz zu vorherigen Veröffentlichungen auf diesem Gebiet versehen wir ω_p mit einem negativen Vorzeichen. Das ist durch die Präzessionsbewegung der Spins im Uhrzeigersinn (mathematisch negativ) motiviert, wie es in den Simulationen beobachtet werden kann. Wir betrachten nur den Fall $q = 1$. Mit der Relation vereinfachen sich die Bewegungsgleichungen (4.6) zu

$$\frac{d^2 \Theta_0}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\Theta_0}{d\rho} - \sin \Theta_0 \cos \Theta_0 \left(1 + \frac{1}{\rho^2} \right) + \frac{\omega_p}{\omega_0} \sin \Theta_0 = 0, \quad (4.25)$$

wobei wir r/l_0 durch ρ und $a^2/(JS l_0^2)$ mit ω_0 ersetzt haben. Diese Gleichung wurde numerisch für den Fall $\tilde{K} = 2d$ in [32–34] gelöst. Sie korrespondiert dann entspre-

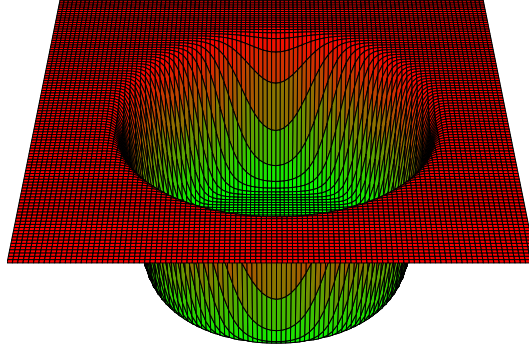


Abbildung 4.1: Die nichtplanare Struktur eines Solitons mit großem Radius aus der Vogelperspektive.

chend mit der Energie, die durch Vereinfachung von (4.3) gewonnen wird:

$$E = \frac{JS^2}{2} \int d^2r \left[(\nabla\Theta_0)^2 + \sin^2\Theta_0 (\nabla\Phi)^2 + \frac{1}{l_0^2} \sin^2\Theta_0 \right]. \quad (4.26)$$

Die Anzahl N der gebundenen Magnonen in einem solchen Soliton ist durch den Zusammenhang (4.11) gegeben.

Die Funktion Θ_0 haben wir durch die Gleichung (4.25) und die Randbedingungen (4.24b) festgelegt. Integrieren wir (4.25), so erhalten wir:

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d\Theta_0}{d\rho} \right) - \sin\Theta_0 \cos\Theta_0 - \frac{1}{\rho^2} \sin\Theta_0 \cos\Theta_0 + \frac{\omega_p}{\omega_0} \sin\Theta_0 \right] d\rho = 0 \\ \Rightarrow & \int_0^\infty \left[\rho \frac{d\Theta_0}{d\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d\Theta_0}{d\rho} \right) - \rho^2 \frac{d\Theta_0}{d\rho} \sin\Theta_0 \cos\Theta_0 - \frac{d\Theta_0}{d\rho} \sin\Theta_0 \cos\Theta_0 + \right. \\ & \left. + \frac{\omega}{\omega_0} \rho^2 \frac{d\Theta_0}{d\rho} \sin\Theta_0 \right] d\rho \\ = & \int_0^\infty \left[\frac{1}{2} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d\Theta_0}{d\rho} \right)^2 - \rho^2 \frac{1}{2} \frac{d}{d\rho} \sin^2\Theta_0 - \frac{1}{2} \frac{d}{d\rho} \sin^2\Theta_0 + \right. \\ & \left. + \frac{\omega_p}{\omega_0} \rho^2 \frac{d}{d\rho} (1 - \cos\Theta_0) \right] d\rho = 0 \\ \stackrel{\text{part. Int.}}{\Rightarrow} & \int_0^\infty \sin^2\Theta_0 \rho d\rho = 2 \frac{\omega_p}{\omega_0} \int_0^\infty (1 - \cos\Theta_0) \rho d\rho. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Mit dieser Beziehung und Gleichung (4.11) können wir die Energie (4.7) wie folgt umschreiben:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{\text{exc}} + \omega_p N, \quad (4.28a)$$

$$\mathcal{E}_{\text{exc}} = \frac{JS^2}{2} \int d^2x \left[(\nabla\Theta_0)^2 + \sin^2\Theta_0 (\nabla\Phi)^2 \right]. \quad (4.28b)$$

Das stimmt mit der Identität $\omega_p = \delta\mathcal{E}/\delta N$ überein. Nicht nur die Energie des Solitons hängt von der Anzahl N der gebundenen Magnonen ab, sondern auch die Struktur des Solitons. Anschaulich ist klar, dass in umfangreicheren Solitonen, also solchen mit größeren Radien, mehr Magnonen gebunden sind als in kleinen. Entsprechend besteht eine Korrelation zwischen dem Radius und der Anzahl der gebundenen Magnonen. Einem großen Radius R entspricht der Fall $N \gg N_2$ (siehe (4.11)), wohingegen für einen kleinen Radius das Gegenteil gilt. Diese Beziehungen werden wir in den Spindynamik-Simulationen genauer untersuchen und daraus auch eine Abhängigkeit der Energie von N ableiten. Im Folgenden wollen wir die Struktur eines einparametrischen Solitons zunächst für Grenzfälle diskutieren. Insbesondere betrachten wir die Solitonstruktur (für beliebige Radien) in der Nähe des Soliton-zentrums, oder sehr weit davon entfernt, bzw. die Solitonstruktur für beliebige Abstände vom Solitonzentrum bei sehr kleinen bzw. sehr großen Solitonradien.

4.4.1 Asymptotisches Verhalten der Solitonlösung

Hier möchten wir das asymptotische Verhalten der Solitonlösung von (4.23) in den Randbereichen, d.h. ganz im Solitonzentrum und weit davon entfernt, analytisch beschreiben. Dazu werden wir die in [35] erhaltenen Ergebnisse kurz zusammenfassen. Zunächst betrachten wir die Umgebung des Soliton-zentrums. Betrachtet man einen kleinen Winkel $\alpha = \pi - \Theta_0 \ll \pi$, dann können wir (4.23) unter Beachtung von (4.24a) linearisieren und erhalten eine modifizierte Besselgleichung:

$$r^2 \frac{d^2 \alpha}{dr^2} + r \frac{d\alpha}{dr} - \alpha [q^2 + r^2 (\omega_0 + \omega_p)] = 0, \quad (4.29)$$

mit $\omega_0 = \frac{JSa^2}{I_0^2}$. Substituiert man noch $\rho = \sqrt{\omega_0 + \omega_p} r = \frac{r}{r_1}$, so erhält man

$$\rho^2 \frac{d^2 \alpha}{d\rho^2} + \rho \frac{d\alpha}{d\rho} - (\rho^2 + q^2) \alpha = 0. \quad (4.30)$$

Eine Lösung von (4.30) ist für $q = 1$ gegeben durch $\alpha \simeq I_1(r)$, und für $r \rightarrow 0$ erhält man

$$\Theta_0(r) \simeq \pi - \frac{r}{r_1}. \quad (4.31)$$

Nun betrachten wir die ferne Umgebung des Soliton-zentrums und damit kleine Winkel Θ . Die Linearisierung von (4.23) führt wieder zu einer modifizierten Besselgleichung

$$r^2 \frac{d^2 \Theta_0}{dr^2} + r \frac{d\Theta_0}{dr} + \Theta_0 [q^2 + r^2 (\omega_0 - \omega_p)] = 0. \quad (4.32)$$

Substituieren wir $\zeta = \sqrt{\omega_0 - \omega_p} r = \frac{r}{r_0}$, so folgt

$$\zeta^2 \frac{d^2 \Theta_0}{d\zeta^2} + \zeta \frac{d\Theta_0}{d\zeta} - (\zeta^2 + q^2) \Theta_0 = 0. \quad (4.33)$$

Damit hat die Solitonlösung mit $q = 1$ die asymptotische Form $\Theta_0(r) \simeq I_1(\zeta)$, sodass für $r \rightarrow \infty$ gilt:

$$\Theta_0(r) \simeq \sqrt{\frac{r_0}{r}} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right). \quad (4.34)$$

Wir möchten noch anmerken, dass die eben getroffenen Aussagen über das asymptotische Verhalten der Solitonen an den Randbereichen unabhängig von der Solitongröße getroffen wurden. Im nächsten Unterabschnitt betrachten wir globale Lösungen, die das Verhalten für beliebige Werte der Ortsvariable wiedergeben. Dies ist aber mit der Einschränkung verbunden, dass wir analytisch nur sehr kleine oder sehr große Solitonen beschreiben können.

4.4.2 Zweidimensionale topologische Solitonen im Grenzfall großer und kleiner Radien

Die Struktur eines Solitons hängt entscheidend von der Beziehung zwischen Anisotropie und dem Radius des Solitons ab. Wenn der Radius R des Solitons viel größer ist als die magnetische Länge l_0 , d.h. $R/l_0 \gg 1$ bzw. $\omega_p \ll \omega_0$, dann hat das Soliton die Form einer kreisförmigen Blochwand im Abstand R vom Solitonzentrum:

$$\cos \Theta_0 = \tanh \frac{r - R}{l_0}. \quad (4.35)$$

Verwenden wir diese Form, um die Solitonstruktur zu beschreiben, so kann man die Anzahl der im Soliton gebundenen Magnonen abschätzen. Die Anzahl ist bestimmt durch die Solitongröße R und die Präzessionsfrequenz ω_p :

$$N \approx N_2 \left(\frac{\omega_0}{\omega_p}\right)^2 \approx N_2 \left(\frac{R}{l_0}\right)^2. \quad (4.36)$$

Im Falle kleiner Solitonradien, d.h. $R/l_0 \ll 1$ bzw. $\omega_0 - \omega_p \ll 1$, fand man in [34] die folgende asymptotische Lösung:

$$\tan \frac{\Theta_0(r)}{2} = \frac{R}{r_0(\omega_p)} K_1\left(\frac{r}{r_0}\right), \quad (4.37a)$$

$$r_0(\omega_p) = \frac{l_0}{\sqrt{1 - \frac{\omega_p}{\omega_0}}} = \frac{1}{\sqrt{\omega_0 - \omega_p}}. \quad (4.37b)$$

Hier ist $K_1(x)$ die McDonald-Funktion und r_0 ein Maß für den exponentiellen Abfall von Θ . Sie liefert das korrekte Verhalten für $r \gg R$, wo sie exponentiell abfällt, und für $r < R \ll l_0$, wo sie in die wohlbekanntere Belavin-Polyakov Lösung (4.15) übergeht [36]. In diesem Fall konvergiert ω_p gegen ω_0 , wenn $N \rightarrow 0$. Jedoch hat die erste Ableitung eine Singularität im Ursprung: $d\omega/dN \rightarrow \infty$, wenn $N \rightarrow 0$. Dieses Verhalten wird korrekt durch

$$\frac{\omega_p}{\omega_0} \approx 1 - \frac{1}{\ln(8N_0/e\gamma^2 N)} \quad (4.38)$$

beschrieben, wobei $\gamma \approx 1.78$ die Eulerkonstante ist (siehe [34, 39]).

4.4.3 Versuchsfunktionen für beliebige Solitonengrößen

Im Fall mittelgroßer Solitonradien fanden Sheka et al. [30] eine „Versuchsfunktion“ (*trial function*), die ähnlich wie (4.37) das asymptotische Verhalten korrekt wiedergibt, aber andererseits noch einen freien Parameter R_{fit} enthält, mit welchem man diese Funktion an die numerische Lösung von (4.25) fitten kann, sodass über ein globales Verhalten (für beliebige r -Werte) von $\Theta_0(r)$ sehr genau Auskunft gegeben werden kann:

$$\tan \frac{\Theta_{fit}(r)}{2} = \frac{R_{fit}}{r} \exp \left[-\frac{(r - R_{fit})}{r_0} \right]. \quad (4.39)$$

Stimmt R_{fit} mit dem Solitonradius überein, so verschwindet das Argument in der Exponentialfunktion und es ist $\Theta_0 = \pi/2$. In [30] findet man eine Tabelle, aus der man den Wert für R_{fit}/l_0 zu gegebenen Werten ω_p/ω_0 ablesen kann. Ebenfalls kann man daraus den tatsächlichen Wert R und dessen prozentuale Abweichung bezüglich R_{fit} , die stets in einer Größenordnung von 0.01 liegt, ersehen. Nun konstruieren wir einen Zusammenhang zwischen dem Solitonradius R und der Präzessionsfrequenz ω_p , der den Anforderungen (4.36) und (4.38) genügt. Diese Abhängigkeit beschreiben wir folgendermaßen:

$$\omega_p(R) \approx \frac{\omega_0 l_0}{R + l_0}. \quad (4.40)$$

Dies liefert für große R die Form (4.36) und ergibt den Grenzwert $\omega_p = 0$ für $R \gg l_0$. In der gleichen Approximation erhalten wir die Stärke des exponentiellen Abfalls r_0 (4.37b):

$$r_0 \approx l_0 \sqrt{(R + l_0)/R}. \quad (4.41)$$

Mit der Identität (4.40) und (4.41) erhalten wir schließlich für (4.39):

$$\tan \frac{\Theta_0(r)}{2} \approx \frac{R}{r} \exp \left(-\frac{r - R}{l_0} \sqrt{\frac{R}{R + l_0}} \right). \quad (4.42)$$

Diesen Ausdruck verwenden wir als Initialisierung, um einparametrische Solitonen in den Simulationen zu erzeugen.

4.5 Solitondynamik

4.5.1 Anregung eines Solitons zur Bewegung im Spinraum

Um die Solitondynamik darstellen zu können, ist es zunächst notwendig, den Solitonort als Koordinate festzulegen. Wir definieren die Solitonposition $X(t) = (x(t), y(t))$ als Schwerpunkt der Verteilung $S - S^z$:

$$\vec{X} = \frac{\sum_{\vec{n}} \vec{n} (S - S_{\vec{n}}^z)}{\sum_{\vec{n}} S - S_{\vec{n}}^z}, \quad (4.43)$$

wobei $\vec{n} = (n_x, n_y)$. In der kontinuierlichen Form schreibt sich diese Relation folgendermaßen:

$$\vec{X}(t) = \frac{S}{Na^2} \int d^2x \vec{r}(1 - \cos \Theta). \quad (4.44)$$

Damit erhalten wir als Solitongeschwindigkeit

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \frac{JS^2}{N} \int d^2x \sin^2 \Theta \vec{\nabla} \Phi. \quad (4.45)$$

Die Idee, ein Soliton durch interne Magnonenmoden zur Bewegung anzuregen, entwickelte D. Sheka et al [30]. Demnach gibt es in jedem topologischen, zweidimensionalen Soliton in unserem System interne Magnonenmoden, die aufgrund einer Dispersionslücke im Magnonenspektrum (4.8) nur im Bereich $[0, \omega_{gap}]$ existieren können, wobei $\omega_{gap} = \omega_0 - \omega_p$. Diese Moden treten in Form von verschiedenartigen Schwingungen der Solitonstruktur auf. Wir betrachten ein mit ω_p rotierendes Bezugssystem, weshalb das Intervall möglicher interner Magnonenfrequenzen die Obergrenze $\omega_0 - \omega_p$ hat. Solche Moden verursachen verschiedene Arten von Schwingungen in der Struktur des Solitons. Um solche Moden zu beschreiben, führen wir kleine Störungen erster Ordnung in (4.24) ein [30, 50]:

$$\Theta = \Theta_0(\rho) + \sum_m A_m f_m(\rho) \cos(m\chi - \omega_m t), \quad (4.46a)$$

$$\Phi = \varphi_0 + \chi - \omega_p t + \sum_m \frac{A_m}{\sin \Theta_0} g_m(\rho) \sin(m\chi - \omega_m t), \quad (4.46b)$$

wobei ω_m die Magnonenfrequenzen sind. Diesen Ansatz setzen wir in die Bewegungsgleichungen (4.6) ein und linearisieren diese für kleine Störungen f und g . Mit einem geschickt gewählten Ansatz können die Winkelanteile von f und g aus den erhaltenen partiellen Differentialgleichungen herausgekürzt werden. Die radialen Funktionen $f_m(\rho) = u_m(\rho) + v_m(\rho)$ und $g_m(\rho) = u_m(\rho) - v_m(\rho)$ erfüllen ein Eigenwertproblem, das durch die folgenden zwei gekoppelten Schrödinger-Gleichungen gegeben ist [30]:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + V_+(\rho) - \frac{\omega_m}{\omega_0} \right] u_m &= W(\rho)v_m, \\ \left[-\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + V_-(\rho) + \frac{\omega_m}{\omega_0} \right] v_m &= W(\rho)u_m, \end{aligned} \quad (4.47)$$

mit den radialen Potentialen

$$V_{\pm}(\rho) = \frac{(\cos \Theta_0 \pm m)^2}{\rho^2} + \cos \Theta_0 \left(\cos \Theta_0 - \frac{\omega_p}{\omega_0} \right) - \frac{1}{2} \sin^2 \Theta_0 \left(1 + \frac{1}{\rho^2} \right) - \frac{1}{2} (\Theta'_0)^2, \quad (4.48a)$$

$$W(\rho) = \frac{1}{2} \sin^2 \Theta_0 \left(1 + \frac{1}{\rho^2} \right) - \frac{1}{2} (\Theta'_0)^2, \quad (4.48b)$$

mit $\Theta'_0 = d\Theta_0/d\rho$. Die Lösungen $f(\rho)$ und $g(\rho)$ des Gleichungssystems (4.47) erhält man numerisch [30]. Für die Spezialfälle $m = 0$ bzw. $m = 1$ existieren sogenannte *Goldstonemoden* mit $\omega_{0,1} = 0$. Diese korrespondieren mit zwei Bewegungsarten des Solitons, die sich aus den Symmetrieeigenschaften unseres Systems ergeben. Da in der verallgemeinerten Form der Hamiltonfunktion (2.1) die jeweiligen Energiebeiträge nur von der Lage der Spins relativ zueinander, insbesondere vom relativen Winkel zwischen den jeweiligen Nachbarspins, abhängen, können die Spins im Raum beliebig rotieren, solange sich ihre Lage zueinander nicht ändert. Die Goldstonemode mit $m = 0$ entspricht einer *vom Ort unabhängigen* zusätzlichen Konstante A , die additiv zur internen Phase Φ in Gleichung (4.46b) hinzukommt. Das ändert folglich die Lage der Spins zueinander nicht und ist gerade die Folge der Rotationssymmetrie unseres Solitons. Dies kann nachvollzogen werden, wenn man die Eigenfunktionen und die Eigenfrequenz

$$f_0 = 0, \quad \omega_{m=0} = 0 \quad (4.49)$$

in die Relation (4.46) einsetzt. Dann ergibt sich lediglich eine Konstante A , die zu φ_0 additiv hinzukommt.

Die zweite Goldstonemode ist die sogenannte Translationsmode ($m = 1$), die für eine Translationsbewegung des Solitons verantwortlich ist. Die zugehörigen Eigenfunktionen sind durch [30]

$$f_1(\rho) = \Theta'_0(\rho), \quad g_1(\rho) = -\frac{\sin \Theta_0(\rho)}{\rho}, \quad \omega_{m=1} = 0 \quad (4.50)$$

gegeben. Das entspricht aber bei Einsetzen in (4.46) genau der Verschiebung des Solitons in x -Richtung und kennzeichnet die Translationssymmetrie in unserem System: Da in der Energie (4.7) die Position des Solitons nicht vorkommt, kann das Soliton eine Translationsbewegung ausführen, ohne dass die Energie dabei verändert wird.

Die Nullmoden besitzen keine Frequenzen und sie sind „halblokal“, was bedeutet, dass sie zwar lokalisiert sind, aber ihr Abfall nicht stark genug ist, um quadratintegrabel zu sein. Halblokale Moden existieren in allen Magneten. Diese sind *halblokal*, da sie nur langsam mit $\frac{1}{r}$ oder $\frac{1}{r^2}$ abfallen.

In unserem System existieren die lokalen Moden nur innerhalb des Frequenzbereiches $\omega_m \in [0, \omega_0 - \omega_p]$. Die Anzahl der lokalen Moden hängt wesentlich von der Größe des Solitons ab. Nimmt der Solitonradius ab, so verlassen fast alle Moden die Dispersionslücke, $\omega_{gap} \in [0, \omega_0 - \omega_p]$, wobei sie dann nicht mehr lokalisiert sind und oszillieren können. Dieses Verhalten nennt man *quasilokal*. Alleine die lokale Magnonenmode mit $m = -1$ bleibt für alle Solitonradien mit ihrer Frequenz innerhalb des Intervalls $[0, \omega_{gap}]$. Im Spektrum kann man erkennen, dass alle Moden ab einer bestimmten Frequenz, bzw. unterhalb eines bestimmten Schwellenwertes R_c , die Grenze des kontinuierlichen Spektrums erreichen. Für ein Soliton mit $R \leq R_c = 1.52l_0$ existiert nur noch eine einzige lokale Mode, nämlich jene mit $m = -1$. Wir können

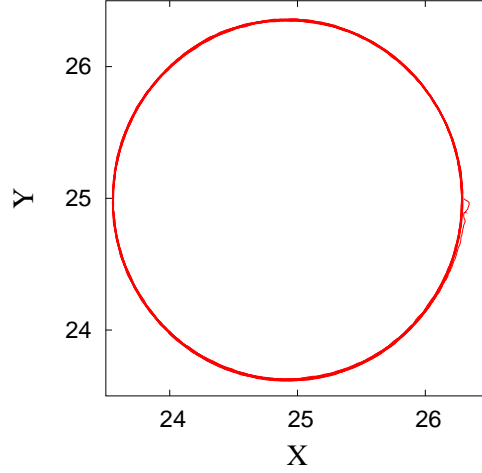


Abbildung 4.2: Trajektorie eines Solitons nach Deformation mit den Initialisierungswerten $R = 4.87l_0$ und $\omega_p = 0.2\omega_0$.

zeigen, dass nur diese Magnonenmoden einen Beitrag zur Solitongeschwindigkeit liefern. Details der folgenden Rechnung befinden sich im Anhang D. Berechnen wir die Geschwindigkeit (4.45), indem wir den Ansatz (4.46) verwenden, so erhalten wir:

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{i\omega_0 l_0 N_0}{2N} \left(C_{-1} e^{i\omega_{-1}t} - C_1 e^{i\omega_1 t} \right), \quad (4.51)$$

wobei die Konstanten C_m durch die Solitonstruktur bestimmt werden,

$$C_m = A_m \int_0^\infty d\rho \left\{ \rho \sin^2 \Theta_0(\rho) \left[\frac{g_m(\rho)}{\sin \Theta_0(\rho)} \right]' + g_m(\rho) \sin \Theta_0(\rho) + m f_m(\rho) \sin 2\Theta_0(\rho) \right\}. \quad (4.52)$$

Die Mode mit $m = 1$ ist die halblokale Mode mit verschwindender Frequenz, die nur eine Verschiebung des Solitons beschreibt. Wir können zeigen, dass $C_1 = 0$, und damit ist die Kreisbewegung des Solitons ausschließlich mit der Magnonenmode mit $m = -1$ verbunden:

$$\vec{X}(t) = R_{\text{orb}} e^{-i\omega_{-1}t}, \quad R_{\text{orb}} = \frac{|C_{-1}| N_0 \omega_0 l_0}{2N \omega_{-1}}, \quad (4.53)$$

wobei R_{orb} den Radius der Kreisbahn darstellt. Es führt also ausschließlich die Mode mit $m = -1$ zu einer Bewegung des Solitons als Ganzes. In den Spindynamik-Simulationen stellen wir gemäß den Vorhersagen in [30] eine Kreisbewegung (siehe Abbildung 4.2) des Solitons als Ganzes fest. Es ist also zum ersten Mal gelungen, eine Kreisbewegung des Solitons in Simulationen zu erzeugen und diese Dynamik analytisch zu erfassen.

4.5.2 Beziehungen zwischen der Präzessions- und der lokalen Modenfrequenz

In [30] konnten für kleine bzw. große Solitonradien folgende Abhängigkeiten für die Eigenfrequenz ω_{-1} , den Solitonradius R und der Präzessionsfrequenz ω_p gefunden werden:

$$\omega_{-1}(R) \approx 2\omega_0 \left(\frac{l_0}{R} \right)^3, \quad R \gg l_0 \quad (4.54a)$$

$$\omega_{-1}(\omega_p) \approx \omega_0 - \omega_p, \quad R \ll l_0. \quad (4.54b)$$

Um das Magnonenspektrum für ω_{-1} bei beliebigen Solitonradien beschreiben zu können, konstruiert man wieder eine Versuchsfunktion, die den approximativen Bedingungen (4.54) genügt:

$$\omega_{-1}^{trial}(\zeta) = \omega_0 \frac{2\zeta^3(1-\zeta)}{1-\zeta+2\zeta^4}, \quad \zeta = \frac{\omega_p}{\omega_0}. \quad (4.55)$$

Diese Relation reproduziert die numerischen Ergebnisse mit einer erstaunlich hohen Genauigkeit von mindestens $2 \cdot 10^{-3}$.

4.5.3 Charakterisierung durch nichtverschwindenden Gesamtdrehimpuls

Im Folgenden werden wir Aussagen darüber treffen, wie ein sich im Spinraum bewegendes Soliton charakterisiert werden kann. Abbildung 4.3 zeigt die interne, planare Struktur eines (nicht) deformierten Solitons. Einparametrische Solitonen haben keine Translationsbewegung, ihre einzige dynamische Komponente ist die Präzession aller Spins mit der Präzessionsfrequenz $\omega_p = \frac{\delta E}{\delta N}$. Die Dynamik eines Solitons als Ganzes ist durch die Erhaltung des Bahndrehimpulses (4.13) charakterisiert. Jedoch, wenn das Soliton eine symmetrische *in-plane* Struktur der Form $\Phi = \omega_p t + \chi$ besitzt, ist der Bahndrehimpuls

$$\begin{aligned} L_z &= -\frac{S}{a^2} \int d^2x (1 - \cos \Theta) \left[\vec{r} \times \vec{\nabla} \Phi \right]^z = -\frac{S}{a^2} \int d\rho d\chi (1 - \cos \Theta) \rho \left[\hat{e}_\rho \times \frac{1}{\rho} \hat{e}_\chi \right]^z \\ &= -\frac{S}{a^2} \int d\rho d\chi (1 - \cos \Theta) \rho = -S_z \end{aligned} \quad (4.56)$$

und damit der Gesamtdrehimpuls $J_z = L_z + S_z = L_z - S_z = 0$. In diesem Fall ist die einzig mögliche Form der Dynamik die Präzession der Spins mit [6, 41]

$$-\frac{\delta \mathcal{E}}{\delta L_z} = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta S_z} = \omega_p, \quad (4.57)$$

und das Soliton selbst bewegt sich nicht. Um es zu bewegen benötigen wir einen nichtverschwindenden Gesamtdrehimpuls J_z . Dies erreichen wir, indem wir das Soliton deformieren. Mit einem deformierten Soliton als Initialisierungskonfiguration

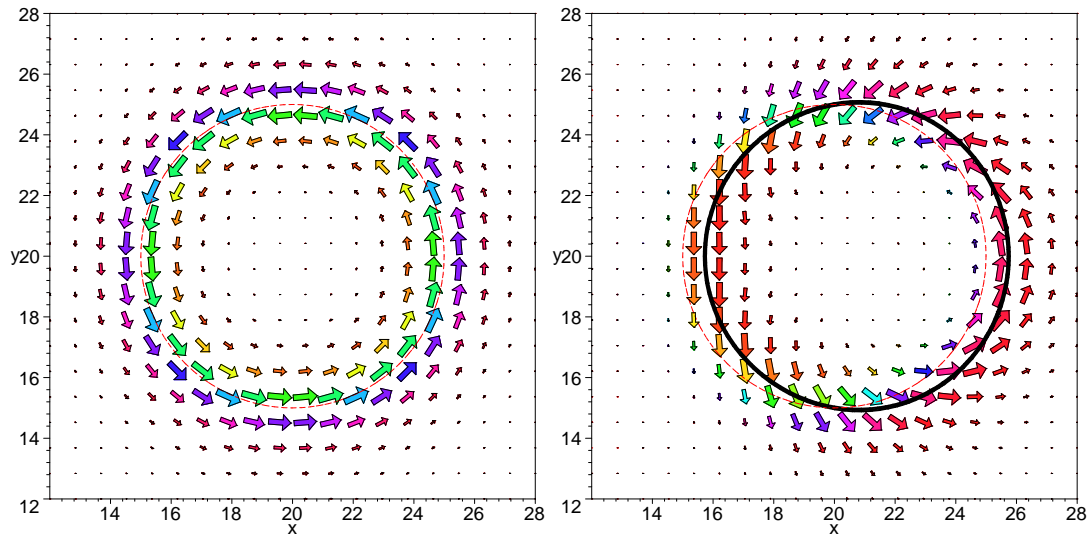


Abbildung 4.3: Planare Spinstruktur eines Solitons mit $R = 5l_0$. Diese stellt eine Initialisierungskonfiguration der planaren Spinfeldkomponenten in den Simulationen dar. Die linke Abbildung beschreibt das undeformierte Soliton $S_z = 0$ ($\Theta = \pi/2$) und die rechte Abbildung ein elliptisch deformiertes. Die durchgezogene Linie entspricht der gestörten und die gestrichelte Linie der ungestörten Konfiguration.

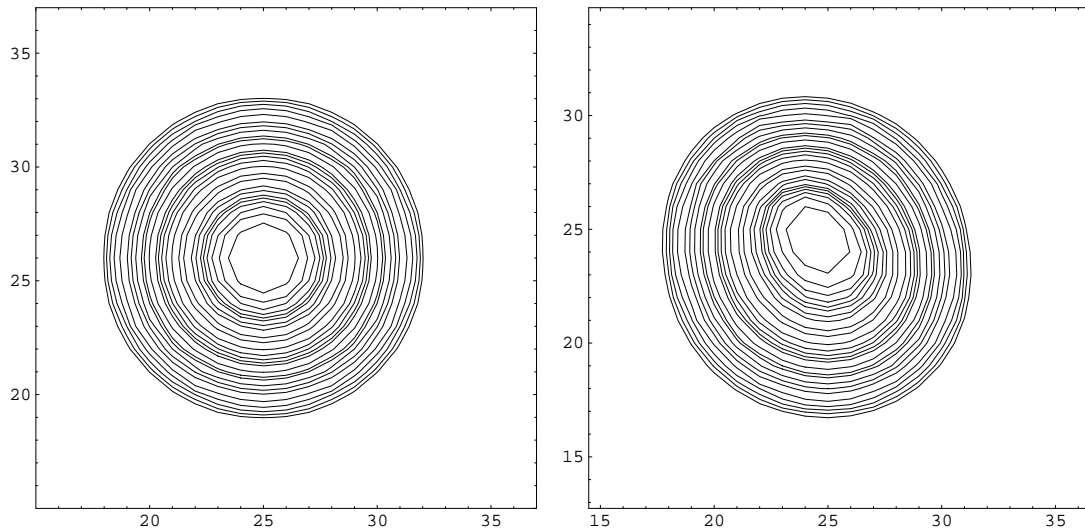


Abbildung 4.4: Konturplot, bestehend aus Linien, auf denen alle Spins mit gleicher S^z -Komponente liegen, eines (**Links:**) nicht-deformierten Solitons und (**Rechts:**) eines deformierten Solitons ($A = 1$)(rechts), mit den Initialisierungsparametern $\omega_p = 0.2$ und $R = 6.58$. Dies sind Momentaufnahmen der simulierten Konfiguration.

lösen wir im nächsten Abschnitt die diskrete Landau-Lifshitz-Gleichung numerisch. Insbesondere werden wir eine elliptische Deformation des Solitons vornehmen (siehe die Abbildungen 4.3 und 4.4), welche der Form einer internen Magnonenmode mit $m = -1$ entspricht.

4.6 Spindynamik-Simulationen

Um die Vorhersagen der Kontinuumstheorie über Solitoneigenschaften im diskreten System zu überprüfen, lösen wir die diskrete Version der zweidimensionalen Landau-Lifshitz-Gleichung mit Dämpfung,

$$(1 + \varepsilon^2) \frac{d\vec{S}_n}{dt} = - \left[\vec{S}_n \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_n} \right] + \frac{\varepsilon}{S} \left[\vec{S}_n \times \left[\vec{S}_n \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_n} \right] \right], \quad (4.58)$$

auf einem quadratischen Gittersystem der Kantenlänge L . Dabei stellt \mathcal{H} die Hamiltonfunktion (2.1) dar, wobei wir lediglich die Austauschanisotropie K verwenden und $d = 0$ setzen. Als numerischen Integrationsalgorithmus wählen wir *Runge-Kutta vierten Grades* mit einem Zeitschritt der Breite 0.01. Nahe des Randes gelten die gleichen Bedingungen wie im kontinuierlichen System: die Spins befinden sich annähernd im Grundzustand, d.h. $\vec{S}_n = (0, 0, 1)^T$. Für die Grenzen des zweidimensionalen Systems verwenden wir periodische Randbedingungen, d.h.

$$\begin{aligned} \text{linker Rand} \quad \vec{S}(0, 0 \dots L + 1) &= \vec{S}(L, 0 \dots L + 1), \\ \text{rechter Rand} \quad \vec{S}(L + 1, 0 \dots L + 1) &= \vec{S}(1, 0 \dots L + 1), \\ \text{unterer Rand} \quad \vec{S}(0 \dots L + 1, 0) &= \vec{S}(0 \dots L + 1, L), \\ \text{oberer Rand} \quad \vec{S}(0 \dots L + 1, L + 1) &= \vec{S}(0 \dots L + 1, 1). \end{aligned} \quad (4.59)$$

Bei jeder Simulation wird das Soliton im Systemzentrum gestartet. Für die numerische Auswertung haben wir $J = 1$ gesetzt, genauso wie die Spinlänge S , die Wirkung \hbar und die Gitterkonstante a . Den Anisotropieparameter variieren wir innerhalb des Bereichs $K \in [0.0005, 0.1]$, was einer magnetischen Länge l_0 von $l_0/a \in (1.58, 22.4)$ entspricht, so dass wir von Diskretheitseffekten absehen können und in der Nähe des Kontinuumslimits sind. Die Größe des Gitters variieren wir innerhalb von $L/a \in (50, 800)$.

4.6.1 Simulationen für ein einparametriges Soliton

Wir starten die Simulationen, indem wir zum Zeitpunkt $t = 0$ die genäherte Solitonlösung (4.42)

$$\frac{S^z}{S} = 1 - 2 \frac{R^2 \exp \left[-2 - \frac{r-R}{l_0} \sqrt{\frac{R}{R+l_0}} \right]}{r^2 + R^2 \exp \left[-2 - \frac{r-R}{l_0} \sqrt{\frac{R}{R+l_0}} \right]} \quad (4.60a)$$

$$\Phi = \chi \quad (4.60b)$$

als Initialisierung verwenden. Dabei werden die Solitonradiuswerte R aus der Tabelle I in [30] entnommen (siehe Abschnitt 4.4.2). Die Zylinderkoordinaten r und χ werden direkt aus den Gitterpunkten (n_x, n_y) berechnet:

$$r = \sqrt{(n_x - n_c)^2 + (n_y - n_c)^2} \quad (4.61a)$$

$$\chi = \arctan \left[\frac{n_x - n_c}{n_y - n_c} \right], \quad (4.61b)$$

wobei (n_c, n_c) das Systemzentrum bezeichnet, welches mit dem Solitonzentrum zusammenfällt. Es ist wichtig zu erklären, warum es für das Lösen der diskreten Landau-Lifshitz-Gleichung (4.58) ausreicht, eine Anfangsbedingung für die Spin-konfiguration zu setzen. Der Grund dafür ist, dass diese eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit ist, wohingegen die Newtonschen Bewegungsgleichungen, als Differentialgleichungen zweiter Ordnung in der Zeit, zu ihrer Lösung zwei Anfangsbedingungen benötigen. Natürlich weicht die Lösung, die man am Ende der Simulationen erhält, immer von Lösungen im kontinuierlichen System ab, d.h., wenn man das System mit einer nicht perfekten Solitonlösung initialisiert, so wird einerseits im Laufe der Zeit die Solitonlösung verbessert, andererseits aber werden Magnonen erzeugt, die minimiert werden müssen. Dies geschieht in der Regel durch die Verwendung von Dämpfung, die wir aber nach einer gewissen Zeit abschalten, damit das Soliton nicht ausgedämpft wird. Innerhalb dieser Zeit t_d dämpfen wir alle Spinwellen, die von einer nicht perfekten Initialisierungsbedingung herrühren, nahezu aus. Die niedrigste Frequenz des kontinuierlichen Magnonenspektrums ist ω_0 . Deswegen wählen wir als Dämpfungszeit

$$t_d = \frac{1}{\varepsilon \omega_0}. \quad (4.62)$$

Innerhalb von t_d wird neben Magnonen aber auch das Soliton selbst gedämpft, was folglich die Solitonenergie und die Anzahl N der gebundenen Magnonen verringert. Ein abnehmendes N korrespondiert nach (4.11) und (4.36) mit einer kleiner werdenden Gesamt magnetisierung S_z und diese mit einem kleiner werdenden Solitonradius R (siehe Abbildung 4.5). Die Dämpfungszeit kann für sehr klein werdende Solitonen aber nicht mehr nach (4.62) gewählt werden. Es hat sich als zweckmäßig erwiesen, t_d nie größer als 3000 werden zu lassen. Konkret ist das der Fall ab Solitonradien $R/l_0 \leq 0.81$ bzw. $\omega_p/\omega_0 \geq 0.6$. Folglich können Magnonen nicht mehr vollständig ausgedämpft werden. Wir können aber nicht stärker oder länger dämpfen, weil kleine Solitonen sehr sensitiv sind, sodass diese oft bei nur kleiner Erhöhung von t_d nicht mehr existieren. Dieses Dilemma ist auch in [35] beschrieben. Allerdings wurde dort als obere Grenze $t_d = 100$ festgelegt und die kleinsten betrachteten Solitonen waren $R/l_0 = 4$ (was bei uns noch unter intermediäre Radien fällt). Nachdem der Dämpfungsvorgang beendet ist, also für $t > t_d$, wird $\varepsilon = 0$ gesetzt, sodass ab diesem

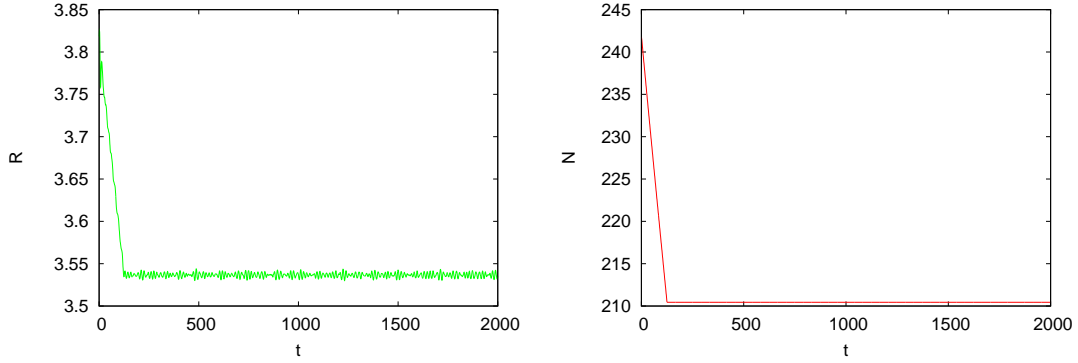


Abbildung 4.5: (**Links:**) Der Solitonradius $R(t)$ und (**Rechts:**) die Anzahl der gebundenen Magnonen N , beide für $\omega_p = 0.25$ und $R = 3.82$

Zeitpunkt nur noch die vereinfachte Form von (4.58) numerisch gelöst wird:

$$\frac{d\vec{S}_{\vec{n}}}{dt} = -\vec{S}_{\vec{n}} \times \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{S}_{\vec{n}}}. \quad (4.63)$$

Nun möchten wir die Wahl der übrigen Parameter diskutieren, welche für die Simulationsergebnisse von entscheidender Bedeutung sind. Zweck aller Simulationen ist, die in der Kontinuumsnäherung gemachten theoretischen Vorhersagen über Solitoneigenschaften zu bestätigen. Daher bemühen wir uns darum, möglichst nahe am Kontinuumsfall zu sein, was Diskreteffekte ausschließt bzw. stark minimiert. Damit haben die Ergebnisse der Numerik auch größere Aussagekraft.

Aus diesen Gründen wählen wir die magnetische Länge l_0 stets so, dass $l_0 \gg a$, die Gitterkonstante, ist. Dies reguliert natürlich die Wahl der Anisotropiekonstante K , für die wir bei den größten Solitonen $K = 0.1$ wählen. Der Extremfall großer Anisotropien zusammen mit Diskreteffekten wurde in [35] untersucht.

Neben l_0 gehen noch R und ω_p in die Solitoninitialisierung ein, wobei das Verhältnis ω_p/ω_0 die Größe r_0 bestimmt. Diese charakterisiert die Größenordnung des exponentiellen Abfalls weit entfernt vom Solitonzentrum und ist durch (4.37b) bestimmt.

Am schnellsten verlaufen Simulationen mit mittelgroßen Solitonradien: für $R/l_0 = 4.87$, $\omega_p/\omega_0 = 0.2$ und $K = 0.1 \rightarrow l_0 \approx 1.58$ ist eine Systemgröße von $L = 50$ absolut ausreichend. Große Solitonen, also solche mit großem Radius wie beispielsweise $R/l_0 = 20$, $\omega_p/\omega_0 = 0.05$ benötigen eine Systemgröße von $L = 200$. Für große Solitonen gilt $1 \ll r_0 \approx l_0 \ll R \ll L$, sodass der exponentielle Abfall außerhalb des Solitonzentrums recht stark ist (im Gegensatz zu kleinen Solitonen). Diese Solitonen zeichnen sich also durch eine starke Lokalisation aus und damit auch durch eine höhere Stabilität (siehe Abbildung 4.6). Im Falle kleiner Solitonen, d.h. $1 \ll R \ll l_0 \ll r_0 \ll L$, ist der exponentielle Abfall recht schwach, sodass der Lokalisierungsbereich zunimmt. Für das kleinste Soliton wählen wir eine Anisotropie $K = 0.0005$, was einer magnetischen Länge $l_0 = 22.4a$ entspricht. Das gibt uns

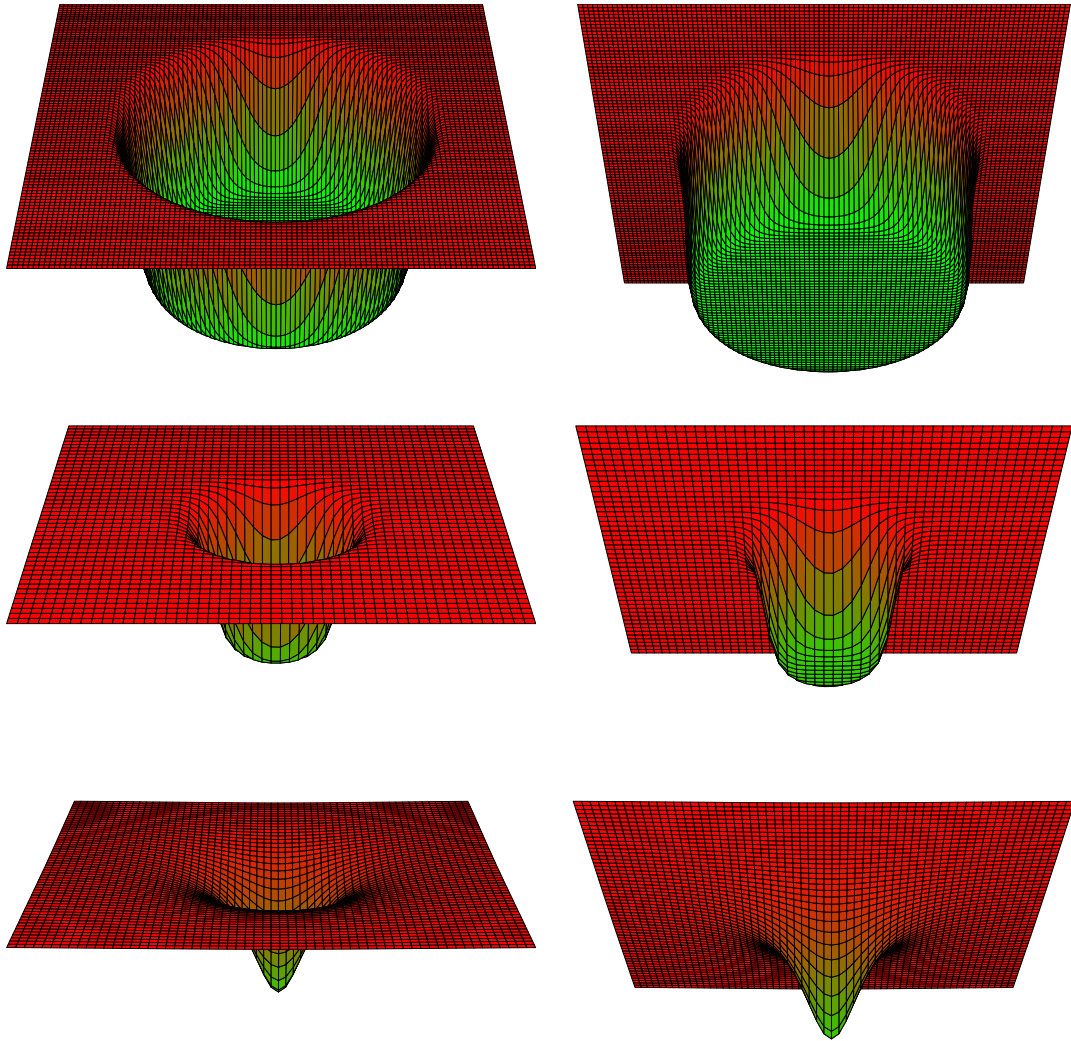


Abbildung 4.6: Die nichtplanaren Solitonstrukturen S^z aus verschiedenen Blickwinkeln. Von oben nach unten korrespondieren die Plots mit folgenden Parametersätzen: $\omega_p = 0.05$ und $R = 20$, $\omega_p = 0.2$ und $R = 6.58$, $\omega_p = 0.73$ und $R = 0.325$.

die Möglichkeit, kleine Solitonen bis zu einem Radius von $R = 0.225$ zu betrachten. Die zugehörige Präzessionsfrequenz $\omega_p/\omega_0 = 0.843$ befindet sich schon nahe an ω_0 , sodass r_0 sehr große Werte annimmt: $r_0 = l_0/\sqrt{1 - \omega_p/\omega_0} \approx 58a$. Das bedeutet einen langsameren exponentiellen Abfall der Solitonstruktur (siehe Abbildung 4.6). Folglich müssen wir unser System vergrößern, um Randeﬀekte zu vermeiden. Wir simulieren hierbei mit Systemgrößen von bis zu $L = 800$. Um diese Rechnung in realer, endlicher Zeit bewältigen zu können, muss man sich Gedanken darüber machen, wie man das Programm hinsichtlich seiner Geschwindigkeit optimieren kann. Dabei sind viele Aspekte zu berücksichtigen, wie z.B. Schleifenoptimierungen, Wahl eines schnellen Compilers oder eine Parallelisierung des Programmcodes, sodass auf mehreren Prozessoren gleichzeitig gerechnet werden kann. Die zwei wichtigsten Arten der Parallelisierung sind Shared-Memory-Multiprozessormaschinen und Clusterrechner. Auf die unterschiedlichen Arten der Parallelprogrammierung gehen wir im Anhang E ein.

Die Position (4.43) haben wir schon in Kapitel 4.5.1 deﬁniert. Da ein Soliton eine lokalisierte Anregung ist, die Teilchencharakter hat, bot es sich an, die Position ähnlich wie in (3.4.1) als Schwerpunkt zu deﬁnieren:

$$\vec{X} = \frac{\sum_{\vec{n}} \vec{n} (S - S_{\vec{n}}^z)}{\sum_{\vec{n}} S - S_{\vec{n}}^z}. \quad (4.64)$$

Da das Soliton von einer kreisförmigen Blochwand umgeben ist, bietet es sich an, deren halben Durchmesser als Solitonradius zu deﬁnieren. Wir untersuchen das System streifenweise (horizontal) nach einem Vorzeichenwechsel in S^z . Hat man Gitterpunkte gefunden, die sich im Vorzeichen von S^z unterscheiden, so bestimmen wir durch lineare Interpolation (in der $x - z$ -Ebene) genau den x -Wert, für den S^z verschwindet. Sodann wird der Abstand zum Zentrum berechnet, was dem gesuchten Radius entspricht:

$$R = \frac{1}{n_v} \sum_{(n_x, n_y)} \sqrt{\left(n_x + \left| \frac{S^z(n_x, n_y)}{S^z(n_x, n_y) - S^z(n_x + 1, n_y)} \right| - n_c \right)^2 + (n_y - n_c)^2}, \quad (4.65)$$

wobei hier n_v die Gesamtanzahl der Vorzeichenwechsel ist. Wenn das Soliton etwas elliptisch deformiert wird, kann der Radius nicht mehr berechnet werden, wobei dieser bei dynamischen Solitonen ohnehin nicht mehr von Interesse ist.

Vergleich zwischen Simulation und Theorie

Es sollen nun die Ergebnisse für die Erhaltungsgröße S_z diskutiert werden. Nachdem wir, bei den Initialisierungen (4.60a) beginnend, das Soliton an das Gitter angepasst hatten, haben wir einparametrische Solitonen simuliert, was man im Ansatz (4.60a) sehen kann. Die untersuchten Solitonen decken einen großen Parameterbereich von N bzw. R und ω_p ab. Um numerisch die Anzahl der gebunden Magnonen zu bestimmen,

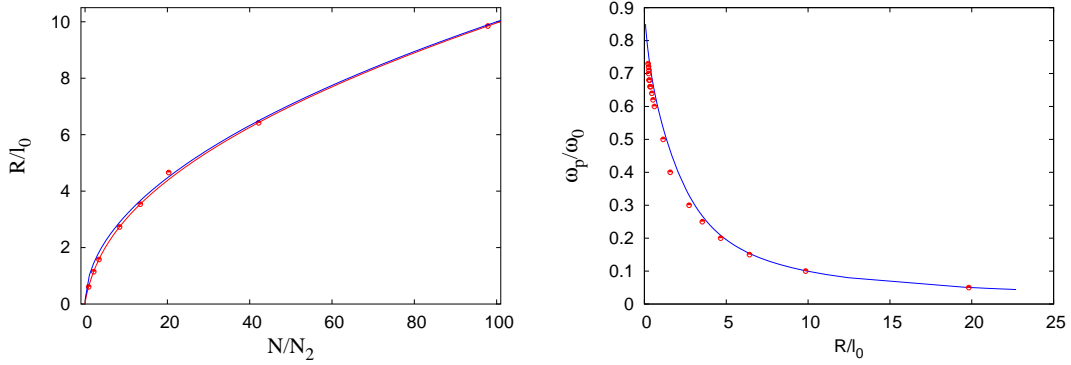


Abbildung 4.7: **Links:** Radius des Solitons als Funktion der Anzahl der gebundenen Magnonen. Die Punkte entsprechen den Simulationsergebnissen, die rote Linie ergibt sich aus der numerischen Lösung von Gleichung (4.25) im Kontinuumsmodell. Die blaue Linie entspricht der Gleichung (4.67).

Rechts: Präzessionsfrequenz ω_p als Funktion von R . Die Punkte entsprechen den Simulationsergebnissen, die blaue Linie gibt das Ergebnis des Kontinuumsmodells wieder.

werten wir die diskrete Version von (4.9) aus: S_z zu berechnen ist somit sehr einfach:

$$S_z = \sum_n (S - S_n^z). \quad (4.66)$$

Die $R(N)$ -Abhängigkeit kann man in Abbildung 4.7 erkennen. Fast für den kompletten Parameterbereich ist die einfache Abhängigkeit

$$N \approx N_2 \left(\frac{R}{l_0} \right)^2 \quad (4.67)$$

gültig. Diese Abhängigkeit wurde auch in [35] bestätigt, jedoch nur für Radien mit $R/l_0 > 10$. Wir können die Gültigkeit von (4.67) also auf beliebige Radien ausweiten. Die eigentliche Hauptaufgabe der Simulationen für einparametrische Solitonen war die Überprüfung der theoretisch vorhergesagten, nur mit numerischen Werten aus [30] unterlegten $R(\omega_p)$ -Abhängigkeit. Diese Abhängigkeit konnten wir mit Simulationen bestätigen (siehe Abbildung 4.7). Verwenden wir (4.67) zusammen mit (4.40), so erhält man die Approximation

$$\omega_p(N) \approx \frac{\omega_0}{1 + \sqrt{N/N_2}}. \quad (4.68)$$

Dieser Zusammenhang konnte überzeugend mit den Simulationen bestätigt werden (siehe Abbildung 4.8). Damit sehen wir sofort, dass die Bedingung (4.21), also $\partial N/\partial \omega_p < 0$, gilt und damit die asymptotische Stabilität eines Solitons im Kontinuumsmodell gegeben ist.

Setzen wir diese Abhängigkeit in die Gleichung (4.28b) ein, so erhalten wir die Abhängigkeit der Energie von der Anzahl der im Soliton gebundenen Magnonen:

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{exc} + \omega_0 \frac{N}{1 + \sqrt{\frac{N}{N_2}}}. \quad (4.69)$$

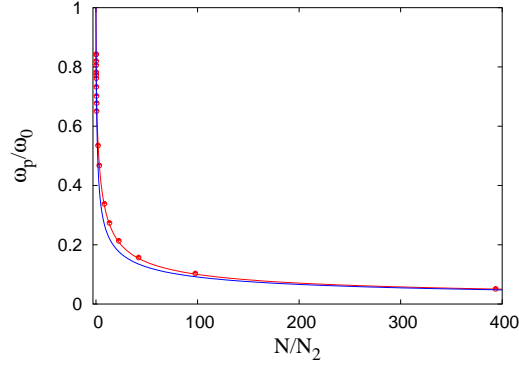


Abbildung 4.8: Präzessionsfrequenz als Funktion der Anzahl der gebundenen Magnonen. Die Punkte entsprechen den Simulationsergebnissen, die rote Linie ergibt sich aus der numerischen Lösung der Gleichung (4.25) im Kontinuumsmodell. Die blaue Linie gibt die Relation (4.68) wieder.

Wie wir sehen, steigt die Energie mit der Anzahl der gebundenen Magnonen N an, bzw. verschwindet, wenn $N \rightarrow 0$. Im Grenzfall großer N -Werte gilt dann für (4.69):

$$\lim_{N \gg N_2} \mathcal{E} = \mathcal{E}_{exc} + \omega_0 \sqrt{N_2 N}. \quad (4.70)$$

4.6.2 Simulationen für zweiparametrische Solitonen

Im vorherigen Abschnitt haben wir die Spindynamik-Simulationen für ein ungestörtes, zirkulärsymmetrisches Soliton vorgenommen, welches sich als Ganzes nicht bewegt hat. Wie schon in Abschnitt 4.5.1 erwähnt, müssen wir die Symmetrie des Solitons brechen, um es zu bewegen. Das haben wir dadurch realisiert, dass wir die Deformation als Initialisierungsbedingung in den Simulationen verwendet haben. Implementieren wir die internen Magnonenmoden aus Gleichung (4.46) für den Fall $m = -1$ in die Initialisierung für das Soliton, so erhalten wir:

$$\Theta = \Theta_0(\rho) + A \cos \chi [u(\rho) + v(\rho)], \quad (4.71a)$$

$$\Phi = \chi - \frac{A \sin \chi}{\sin \Theta_0(\rho)} [u(\rho) - v(\rho)], \quad (4.71b)$$

wobei Θ_0 der Näherung (4.42) genügt. Je nach Solitongröße wählen wir die Deformationsamplitudengröße A im Intervall $[0, 2.0]$. An einem größeren Soliton können wir eine größere Deformation vornehmen als an einem kleinen Soliton. Ein deformiertes Soliton ist leicht elliptisch verformt (siehe Abbildung 4.4). Da die den Simulationen zugrunde liegende Gleichung die diskrete Form der Landau-Lifshitz-Gleichung ist, und weil diese eine Differentialgleichung von erster Ordnung in der Zeit ist, reicht die Initialisierung (4.71) aus, das Soliton zu bewegen. Mit der Wahl von A können wir den Bahnradius der Kreisbahn (welche in Abbildung 4.2 zu sehen ist) beeinflussen.

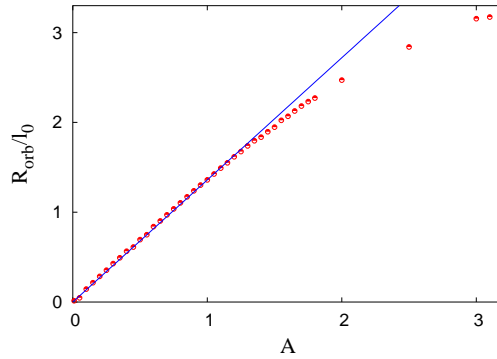


Abbildung 4.9: Der Radius der Kreisbahn R_{orb} als Funktion der Deformationsamplitude A . Die Punkte entsprechen den Simulationsergebnissen, die blaue Linie gibt die gemäß (4.53) bzw. (4.52) erhaltene Proportionalität zwischen R_{orb} und A an. Initialparameter des Solitons: $R = 4.87l_0$ und $\omega_p = 0.2\omega_0$.

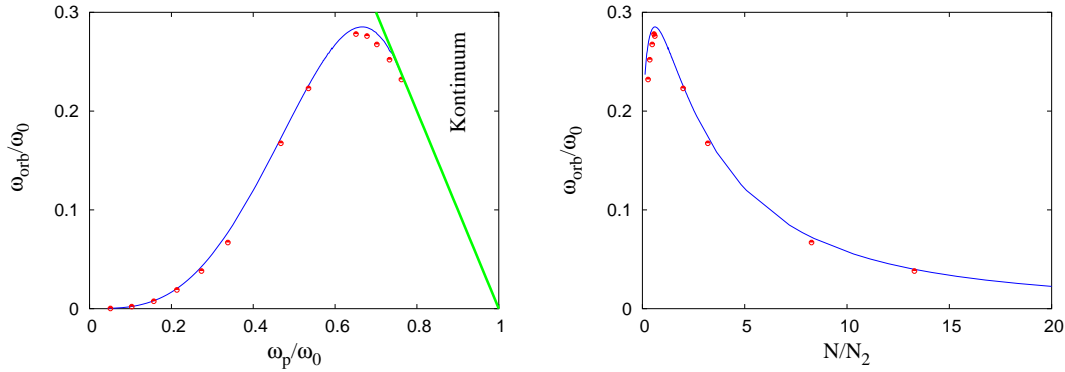


Abbildung 4.10: (**Links:**) die Frequenz der Orbitbewegung als Funktion der Präzessionsfrequenz, (**Rechts:**) als Funktion der Anzahl der gebundenen Magnonen. Die Punkte entsprechen den Simulationsergebnissen. Die blaue Kurve bezieht sich auf die Frequenz der Eigenmode mit $m = -1$, die sich aus der Lösung des Eigenwertproblems (4.47) ergibt, die grüne Kurve gibt die Grenze zum Kontinuum gemäß Gleichung (4.54b) wieder.

Diese Abhängigkeit des Kreisbahnradius R_{orb} von der Amplitude A ist in 4.9 dargestellt. Für nicht zu große A ist die Abhängigkeit $R(A)$ linear. Auch im nichtlinearen Bereich, für beispielsweise $A = 3$, erhalten wir immer noch eine schöne Kreisbewegung des Solitons. Wir haben festgestellt, dass die Frequenz ω_{orb} des Orbits stets unabhängig von A bzw. R_{orb} ist, aber von der Größe des Solitons, also von R und ω_p , entscheidend geprägt wird. Die Möglichkeit, das Soliton zu bewegen, motivierte, die Vorhersagen, die in [30] bezüglich der Abhängigkeit der internen Modenfrequenz ω_{-1} von der Präzessionsfrequenz der Spins gemacht wurden, zu überprüfen. In der Tat stimmt die Frequenz ω_{orb} , mit der das Soliton als Ganzes auf einer Kreisbahn rotiert, mit der vorhergesagten Magnonenfrequenz ω_{-1} überein, wie man in Abbildung 4.10 gut erkennen kann. Nun wollen wir auf diejenige Größe eingehen, deren Erhaltung wir zur Definition von zweiparametrischen Solitonen verwendet haben, nämlich L_z .

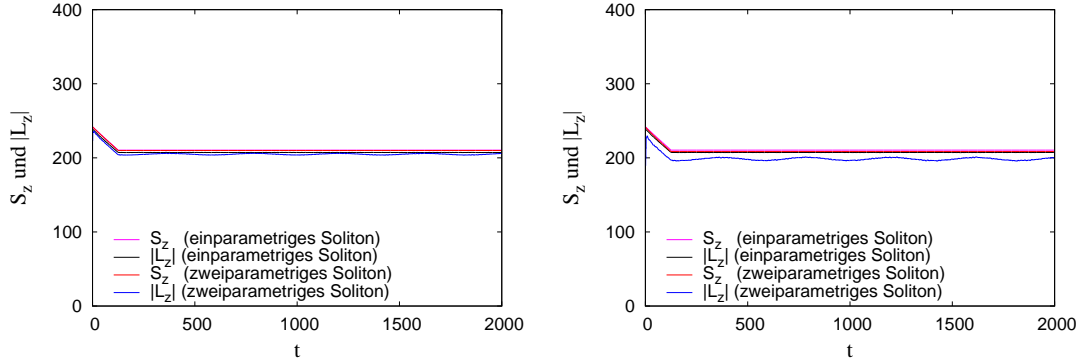


Abbildung 4.11: Die z -Komponente des Bahndrehimpulses L_z und die der Gesamtmagnetisierung S_z als Funktion der Zeit für unterschiedliche Deformationsamplituden: (**Links:**) $A = 0.4$, (**Rechts:**) $A = 0.8$. Initialisierungsparameter: $\omega_p = 0.25$, $R = 3.82$.

Diskret berechnen wir L_z folgendermaßen:

$$\begin{aligned}
L_z(t) &= S \sum_{\vec{n}} (1 - S_n^z) \left[(x_n - x_c) (\Phi_{n,n} - \Phi_{n,n-1}) - (y_n - y_c) (\Phi_{n,n} - \Phi_{n-1,n}) \right] \\
&= S \sum_{\vec{n}} (1 - s_{z,n}) \left[(x_n - x_c) \right. \\
&\quad \cdot \text{ATAN2} \left(S_{n,n}^y S_{n,n-1}^x - S_{n,n-1}^y S_{n,n}^x, S_{n,n}^x S_{n,n-1}^x + S_{n,n}^y S_{n,n-1}^y \right) \\
&\quad \left. - (y_n - y_c) \text{ATAN2} \left(S_{n,n}^y S_{n-1,n}^x - S_{n-1,n}^y S_{n,n}^x, S_{n,n}^x S_{n-1,n}^x + S_{n,n}^y S_{n-1,n}^y \right) \right].
\end{aligned} \tag{4.72}$$

Dabei verwenden wir die Fortran *ATAN2*-Funktion, die den arctan darstellt, nur mit dem Unterschied, dass die Sprünge von $-\pi$ bis π , und nicht wie bei der arctan-Funktion von $-\pi/2$ bis $\pi/2$ stattfinden. Um den Phasenunterschied $\Phi_{n,n} - \Phi_{n,n-1}$ bzw. $\Phi_{n,n} - \Phi_{n-1,n}$ aus der Simulation zu bestimmen, verwenden wir wie in Abschnitt 4.72 die Relationen $\cos(\Phi_{n,n} - \Phi_{n,n-1}) = \cos(\Phi_{n,n}) \cos(\Phi_{n,n-1}) + \sin(\Phi_{n,n}) \sin(\Phi_{n,n-1})$ und $\sin(\Phi_{n,n} - \Phi_{n,n-1}) = \sin(\Phi_{n,n}) \cos(\Phi_{n,n-1}) - \cos(\Phi_{n,n}) \sin(\Phi_{n,n-1})$.

In Abbildung 4.12 können wir erkennen, dass, nachdem die Dämpfungszeit t_d abgelaufen ist, alle Größen erhalten sind. Ohne Solitondeformation, d.h. bei $A = 0$, $|L_z| = S_z = \text{const}$, gilt, wie vorhergesagt, $J = S_z + L_z = S_z - S_z = 0$, sodass wir tatsächlich ein zirkulärsymmetrisches Soliton vorliegen haben. Bei kleinen Amplituden A erkennt man bereits einen Unterschied zwischen ein- und zweiparametrischen Solitonen. L_z ist dann immer noch näherungsweise konstant (angesichts von Fluktuationen, die ca 2% des Absolutwertes betragen, kann man das rechtfertigen), jedoch ist J von Null verschieden, was bedeutet, dass die Symmetrie des Solitons gebrochen ist und es eine Kreisbewegung ausführt (siehe Abbildung 4.2).

4.6.3 Konsequenzen der Kreisbewegung

Die auftretende Kreisbewegung, deren Frequenz unabhängig vom Bahnradius ist, steht in Analogie zu der (Lamor-)Präzessionsbewegung eines geladenen Teilchens in einem Magnetfeld. In unserem Fall wird ein effektives Magnetfeld $G\hat{e}_z$ durch das Soliton selbst gebildet und mit diesem mitgeführt. Da das Soliton eine topologische Ladung besitzt, erfährt es bei Bewegung eine sogenannte *gyroskopische Kraft*, die geschwindigkeitsabhängig ist, in Analogie zur Lorentzkraft. Wir können nun die Dynamik mit einer Newtonschen Bewegungsgleichung beschreiben:

$$M \frac{d^2 \vec{X}}{dt^2} = \vec{F}_g, \quad \vec{F}_g = G \left[\vec{e}_z \times \frac{d\vec{X}}{dt} \right], \quad (4.73)$$

wobei $G = 4\pi S/a^2$ die Gyrokonstante und M die Masse des Solitons ist (siehe [6]). Formal hat die Gleichung (4.73) zwei Lösungen. Eine der Lösungen, $\vec{X} = \text{const}$, entspricht der Translationsbewegung des Solitons, angeregt durch die Mode mit $m = +1$. In einem unendlichen System hat diese Mode eine verschwindende Frequenz (siehe Gleichung (4.50)). Die andere Lösung beschreibt die Kreisbewegung mit der Frequenz $\omega_{orb} = G/M$, welche durch das Auftreten der lokalen Mode mit $m = -1$ zurückzuführen ist. Deswegen können wir die effektive Masse des Solitons berechnen, indem wir die Simulationsdaten der Rotationsfrequenz verwenden.

Die Tatsache, dass wir den topologischen, zweidimensionalen Solitonen unseres Systems eine endliche Masse zuordnen können, ist keine Selbstverständlichkeit und resultiert aus der Charakteristik des Dispersionsgesetzes (4.2) bzw. (4.8).

Die Eigenfrequenzen der gebundenen Moden liegen in der Dispersionslücke $\omega < \omega_{gap}$. Dagegen ist in isotropen Ferromagneten wegen einer fehlenden Dispersionslücke das Magnonenspektrum ausschließlich kontinuierlich, was eine stärkere Wechselwirkung des Solitons mit den Rändern zur Folge hat. Nimmt man im isotropen Modell eine endliche Masse des Solitons zusammen mit einer gyroskopischen Kraft an, so bewirkt letztere eine Lamorpräzession des Solitons, wodurch wiederum Magnonen angeregt werden. Diese Magnonenmoden sind, Dissipationseffekte seien vernachlässigt, wegen der fehlenden Dispersionslücke über den ganzen Magneten verteilt. Bildlich spricht man von einer „Magnonenwolke“, die mit dem Soliton gekoppelt ist. Die Position des Solitonenzentrums fungiert dann ähnlich einem Massenmittelpunkt als kollektive Variable der Position (vergleiche Kapitel 3.4 ff.). Im Falle eines räumlich unbegrenzten Magneten würde die Solitonmasse divergieren.

Dies ist aber im Easy-Axis-Modell nicht der Fall, so dass wir hier eine phänomenologische Beschreibung des Solitons als ein Teilchen endlicher Masse in einem Magnetfeld rechtfertigen können. Die effektive Solitonmasse berechnet sich dann zu

$$M = \frac{G}{\omega_{orb}} = M_0 \frac{1}{\omega_{orb}/\omega_0}, \quad (4.74)$$

wobei $M_0 = \frac{G}{\omega_0} = \frac{\pi}{Ja^2\delta}$ der charakteristische Wert der Masse ist (siehe dazu [40]).

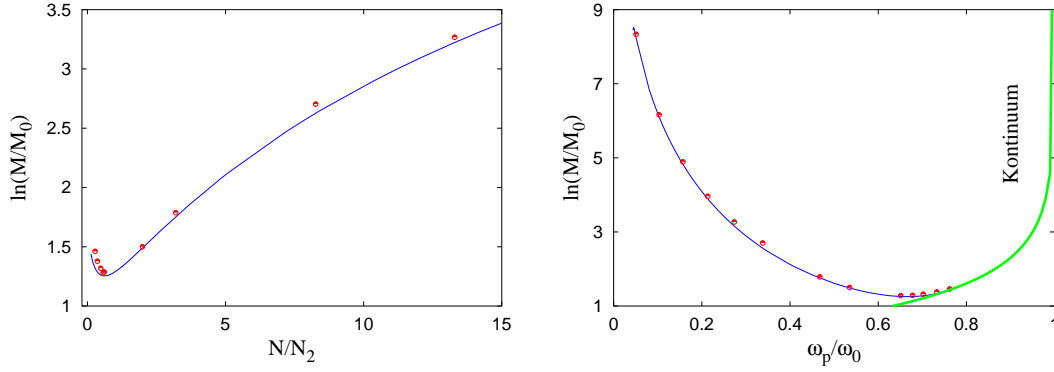


Abbildung 4.12: **(Links):** Der Logarithmus der Solitonmasse in Abhängigkeit von der Anzahl der gebundenen Magnonen N .

(Rechts): Der Logarithmus der Solitonmasse in Abhängigkeit der Präzessionsfrequenz ω_p . Die Punkte entsprechen den Simulationsergebnissen. Die blaue Kurve gibt den Zusammenhang $\ln(M/M_0) = \ln(1/\omega_{orb})$ wieder, wobei sich ω_{orb}/ω_0 aus der numerischen Lösung des Eigenwertproblems (4.47) ergibt. Die grüne Kurve gibt die Grenze zum Kontinuum mit dem Zusammenhang $\ln(1/(\omega_0 - \omega_p))$ (gemäß Gleichung (4.54b)) wieder.

Die Masse hängt von der Frequenz ω_{orb} ab, die selbst asymptotisches Verhalten für große bzw. kleine Solitonen zeigt. Diese Asymptotik haben wir in den vorherigen Kapiteln behandelt und geben diese nochmals an, um dementsprechende Aussagen über die Masse treffen zu können:

$$\frac{\omega_{orb}}{\omega_0} = \begin{cases} \stackrel{(4.54a)}{=} 2 \left(\frac{l_0}{R}\right)^3 \stackrel{(4.36)}{=} 2 \left(\frac{\omega_p}{\omega_0}\right)^3 = 2 \left(\frac{N_2}{N}\right)^{3/2}, & \text{wenn } \frac{R}{l_0} \gg 1 \\ \stackrel{(4.54b)}{=} 1 - \frac{\omega_p}{\omega_0} \stackrel{(4.38)}{=} \frac{1}{\ln(e\gamma^2 \frac{N_2}{N})} \stackrel{(4.36)}{=} \frac{1}{\ln e\gamma^2 \frac{l_0^2}{R^2}}, & \text{wenn } \frac{R}{l_0} \ll 1. \end{cases} \quad (4.75)$$

Damit besitzt die Masse folgendes asymptotisches Verhalten:

$$\frac{M}{M_0} = \begin{cases} = \frac{1}{2} \left(\frac{R}{l_0}\right)^3 = \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_0}{\omega_p}\right)^3 = \frac{1}{2} \left(\frac{N}{N_2}\right)^{3/2}, & \text{wenn } \frac{R}{l_0} \gg 1 \\ = \ln(e\gamma^2 \frac{N_2}{N}) = \ln\left(e\gamma^2 \frac{l_0^2}{R^2}\right), & \text{wenn } \frac{R}{l_0} \ll 1. \end{cases} \quad (4.76)$$

Die Solitonmasse divergiert in den Grenzfällen $R \rightarrow 0$ und $R \rightarrow \infty$ (siehe Abbildung 4.12). Der Minimalwert $M_c \approx 3.51M_0$ wird für ein Soliton mit $R_c \approx 0.547l_0$ angenommen, was genau dem Soliton mit der größten Beweglichkeit entspricht.

Damit ist die Dynamik eines zweiparametrischen Solitons mit der Bewegungsgleichung (4.73) und der effektiven Masse M vollständig beschrieben und durch Simulationen getestet. Dabei ist das asymptotische Verhalten der Masse für große und kleine Solitonradien analytisch bekannt.

4.7 Zusammenfassung

In Kapitel 4 haben wir die Dynamik eines topologischen Solitons in einem zweidimensionalen Easy-Axis-Modell untersucht. Die Untersuchungen haben wir sowohl in der Kontinuumsapproximation analytisch, als auch im diskreten System mit Spindynamik-Simulationen, in denen wir die Landau-Lifshitz-Gleichung numerisch lösten, durchgeführt. Dabei dämpften wir das System nur eine gewisse Zeit, um einerseits Einflüsse von freien Magnonen zu minimieren und andererseits das Soliton nicht zu zerstören. Insbesondere haben wir Solitonen mit großen als auch kleinen Radien untersucht und kleine Anisotropien verwendet, um die Aussagen aus der Kontinuumsapproximation möglichst genau zu überprüfen. Daraus ergaben sich Zusammenhänge zwischen der Anzahl der im Soliton lokalisierten Magnonen, der Präzessionsfrequenz und dem Solitonradius. Wir stellten eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den theoretischen Vorhersagen und den Simulationsergebnissen fest. Weiterhin haben wir aus diesen Ergebnissen die Stabilität eines einparametrischen Solitons sowohl im diskreten, als auch im kontinuierlichen Modell explizit nachgewiesen.

Das Hauptziel unserer Untersuchungen war die Bewegung eines Solitons. So haben wir, motiviert durch die Vorhersagen in [30], einen Weg gefunden, die Bewegung des Solitons als Ganzes sowohl analytisch zu beschreiben, als auch in den Simulationen zu realisieren. Insbesondere haben wir analytisch gezeigt, welche der gebundenen Magnonenmoden zur Solitongeschwindigkeit beiträgt, und dann diese als Initialisierung in den Simulationen verwendet. Dies resultierte in einer Kreisbewegung des Solitons mit konstanter Geschwindigkeit um ein festes Zentrum. Nach unserer Kenntnis ist es *das erste Mal*, dass eine Bewegung von zweidimensionalen magnetischen Solitonen beobachtet werden konnte. Aus den Simulationen konnten wir die Stabilität dieses zweiparametrischen Solitons im diskreten und folglich auch im Kontinuumsmodell folgern. Ferner fanden wir einen linearen Zusammenhang zwischen dem Radius R_{orb} der Kreisbahn und der Amplitude A , um welche das Soliton elliptisch deformiert wurde. Ab einer gewissen Größe von A ist dieser Zusammenhang nicht mehr linear. Die Kreisbewegung konnte aber auch für große A -Werte, welche sich bereits im nichtlinearen $R_{orb}(A)$ -Bereich befinden, beobachtet werden. Ferner zeigte sich, dass die Frequenz der Bahnbewegung unabhängig vom Bahnradius ist, und ω_{orb} die in [30] vorhergesagte Abhängigkeit von der Präzessionsfrequenz der Spins sehr genau wiedergibt. Diese zirkulierende Bewegung des Solitons findet ihre Analogie in der Larmorpräzession eines geladenen Teilchens in einem Magnetfeld. Aus der erhaltenen Kreisbewegung konnten wir eine Newtonsche Bewegungsgleichung aufstellen und damit Abhängigkeiten einer *effektiven Solitonmasse* von der Größe des Solitonradius und der Anisotropie finden. Die Masse M hat ein Minimum für ein Soliton der Größenordnung $R \approx 0.5l_0$. Nimmt R stetig ab, so wächst M und divergiert schließlich bei dem Grenzwert $R = 0$. Andererseits wächst M auch mit

zunehmendem R und divergiert bei dem Grenzübergang $R \rightarrow \infty$. Ergebnisse aus den Simulationen bestätigen die Abnahme der Solitonmobilität mit kleiner werdendem Radius. Dies ist ebenfalls eine neue Erkenntnis. In [40] sagen die Autoren aber eine endliche Masse für $R \rightarrow 0$ voraus, was im Gegensatz zu unseren Ergebnissen steht.

Ferner glauben wir, dass die Kreisbewegung eines Solitons auch experimentell realisiert werden kann, wenn man die internen Magnonen durch ein wechselndes Magnetfeld anregt. Unsere Untersuchungen können auch wichtig für Hall-Systeme sein, wo den Skymionen ähnliche Solitonen eine große Bedeutung haben [53].

Das Gebiet der zweidimensionalen Solitonen im anisotropen Heisenbergmodell ist hinsichtlich vieler Fragestellungen noch unerforscht. Bedeutsame Aspekte sind hier die Fragestellungen nach anderen Möglichkeiten, das Soliton zu bewegen. Dabei spielen äußere statische und rotierende Magnetfelder gewiss eine wichtige Rolle. Weiterhin finden wir das Verhalten von Solitonen unter dem Einfluss von thermischem Rauschen sehr interessant. Vor allem hinsichtlich der Diffusionsergebnisse aus Kapitel 3 stellt sich die Frage, inwieweit die Eigenschaften eindimensionaler Solitonen sich auf den zweidimensionalen Fall übertragen lassen.

Anhang A

Die exakte Lösung der anisotropen Landau-Lifshitz-Gleichung

Die Landau-Lifshitz-Gleichung (2.29) beschreibt ein integrables System und besitzt Solitonlösungen. Ivanov und Kosevich [6] entdeckten und diskutierten die lokalisierte Einlösung von (2.29), welche folgendes Verhalten zeigt: Der Schwerpunkt der lokalisierten ungleichförmigen solitären Anregung bleibt stationär, wobei die Spins selbst mit einer konstanten Frequenz um die Anisotropieachse (z -Achse) präzedieren. Die Amplitude ist durch den Winkel $\Theta(\xi)$ gegeben. Um nichtlineare Wellen dieser Form zu erhalten, beginnen wir mit dem Ansatz

$$\begin{aligned}\Psi(r, t) &= \Psi_S \underbrace{(r - Vt - X_0)}_{-X(t)} \\ \Phi(r, t) &= \omega t + \Phi_S(r - Vt - X_0)\end{aligned}\tag{A.1}$$

in (3.9). Dabei ist ω die Präzessionsfrequenz der Spins, und die Konstante X_0 legt die Solitonposition zur Zeit $t = 0$ fest. Der Ansatz (A.1) wurde gewählt, da wir fortlaufende Wellen von konstanter Geschwindigkeit und Form suchen, also Lösungen, die im wesentlichen nur durch $r - Vt$ von r und t abhängen. Dabei wählen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Solitongeschwindigkeit V als positiv, sodass das Soliton die Kette von links nach rechts durchläuft. Verwendet man $\xi = r - Vt - X_0$, so ergibt sich, wenn wir beide Systeme, sowohl (3.10a) und (3.10b), als auch (3.12a) und (3.12b) berücksichtigen:

$$-V \frac{d}{d\xi} \Psi_S = JS \frac{d}{d\xi} \left[(1 - \Psi_S^2) \frac{d\Phi_S}{d\xi} \right],\tag{A.2}$$

bzw. in Winkelkoordinaten

$$-V \frac{d}{d\xi} \cos \Theta = JS \frac{d}{d\xi} \left[\sin^2 \Theta \frac{d\Phi_s}{d\xi} \right].\tag{A.3}$$

Integriert man von $-\infty$ bis ξ und benutzt die Randbedingung $\lim_{|\xi| \rightarrow \infty} \Psi = 1$, so finden wir

$$V [1 - \Psi_S(\xi)] = JS [1 - \Psi_S(\xi)^2] \frac{d\Phi_S}{d\xi}(\xi), \quad (\text{A.4})$$

bzw.

$$V [1 - \cos \Theta] = JS [1 - \cos^2 \Theta] \frac{d\Phi_s}{d\xi}, \quad (\text{A.5})$$

wobei wir $\lim_{|\xi| \rightarrow \infty} \frac{d\Phi}{d\xi} < \infty$ verwenden. Die gewählte Randbedingung für Ψ legt die Grundzustandskonfiguration fest, gegen die das Spinfeld im Unendlichen strebt. Hier ist dies $(S^x, S^y, S^z) = (0, 0, S)$. Aus (A.4) folgt sodann:

$$\frac{d\Phi_S}{d\xi} = \frac{V}{JS} \frac{1 - \Psi_S}{1 - \Psi_S^2} = \frac{V}{JS} \frac{1}{1 + \Psi_S} = \frac{V}{JS} \frac{1}{1 + \cos \Theta} = \frac{V}{JS} \frac{1}{2 \cos^2(\frac{\Theta}{2})}. \quad (\text{A.6})$$

Benutzt man (A.6) in der Gleichung (3.12a), so erhält man

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} - \left[\frac{\beta}{J} + \left(\frac{V}{JS} \frac{1}{1 + \cos \Theta} \right)^2 \right] \sin \Theta \cos \Theta + \frac{\sin \Theta}{JS} \left(-\omega + V \frac{V}{JS} \frac{1}{1 + \cos \Theta} \right) = 0, \quad (\text{A.7})$$

was sich nach Multiplikation mit $\frac{d\Theta}{d\xi}$ und Umordnen schreiben lässt als:

$$\begin{aligned} \frac{d\Theta}{d\xi} \frac{d^2 \Theta}{d\xi^2} - \frac{d\Theta}{d\xi} \frac{\beta}{J} \cos \Theta \sin \Theta &= \frac{d\Theta}{d\xi} \frac{\omega}{SJ} \sin \Theta - \frac{d\Theta}{d\xi} \frac{V^2}{J^2 S^2} \left[\frac{\sin \Theta}{1 + \cos \Theta} - \frac{\sin \Theta \cos \Theta}{(1 + \cos \Theta)^2} \right] \\ \Leftrightarrow \frac{1}{2} \frac{d}{d\xi} \left[\left(\frac{d\Theta}{d\xi} \right)^2 + \frac{\beta}{J} \cos^2 \Theta \right] &= -\frac{\omega}{JS} \frac{d}{d\xi} (\cos \Theta) + \left(\frac{V}{JS} \right)^2 \frac{d}{d\xi} \left[\frac{\cos \Theta}{1 + \cos \Theta} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Nach Integration von $-\infty$ bis ξ ergibt sich

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\Theta}{d\xi} \right)^2 + \frac{\beta}{J} (\cos^2 \Theta - 1) &= \left(\frac{V}{JS} \right)^2 \left[\frac{2 \cos \Theta}{1 + \cos \Theta} - 1 \right] + \frac{2\omega}{JS} [1 - \cos \Theta] \\ \Leftrightarrow \left(\frac{d\Theta}{d\xi} \right)^2 &= \frac{2\omega}{JS} \frac{1 - \cos \Theta}{1 + \cos \Theta} \left[(1 + \cos \Theta) - \frac{V^2}{2\omega JS} + \frac{S}{2\omega} \beta (1 + \cos \Theta)^2 \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Schreiben wir $\alpha = \Theta/2$ und benutzen $1 + \cos \Theta = 2(\cos \alpha)^2$, sowie $1 - \cos \Theta = 2(\sin \alpha)^2$, so lautet die Gleichung

$$\left(\frac{d\alpha}{d\xi} \right)^2 = \frac{\omega}{JS} \frac{(\sin \alpha)^2}{(\cos \alpha)^2} \left[(\cos \alpha)^2 - \frac{V^2}{4\omega JS} + \frac{S}{\omega} \beta \cos^4 \alpha \right]. \quad (\text{A.10})$$

Nach Multiplikation mit $\cos^2 \alpha$ erhält man:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{d\xi} \sin \alpha \right)^2 &= \frac{\omega}{JS} \sin^2 \alpha \left[\cos^2 \alpha - \frac{V^2}{4\omega JS} + \frac{S\beta}{\omega} \cos^4 \alpha \right] \\ \Leftrightarrow \left(\frac{d}{d\xi} \sin \alpha \right)^2 &= \frac{\omega}{JS} \sin^2 \alpha \left[(1 - \sin^2 \alpha) - \frac{V^2}{4\omega JS} + \frac{S\beta}{\omega} (1 - \sin^2 \alpha)^2 \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Wir führen nun die Bezeichnung $v = \sin \alpha$ ein. Gleichung (A.11) schreibt sich damit wie folgt:

$$\left(\frac{d}{d\xi}v\right)^2 = \frac{\omega}{\omega JS}v^2 \left[1 - v^2 - \frac{V^2}{4\omega JS} + \frac{\beta JS}{\omega}(1 - v^2)^2\right]. \quad (\text{A.12})$$

Diese Gleichung lösen wir mittels der Methode „Trennung der Variablen“:

$$\frac{dv}{\pm\sqrt{1 - \frac{V^2}{4\omega JS} - v^2 + \frac{\beta JS}{\omega}(1 - v^2)^2}} = 2\sqrt{\frac{\omega}{JS}}d\xi. \quad (\text{A.13})$$

Nach der Substitution $v^2 = u$ erhält man

$$\begin{aligned} \frac{du}{\pm u\sqrt{1 - \frac{V^2}{4\omega JS} - u + \frac{\beta JS}{\omega}(1 - u)^2}} &= \sqrt{\frac{\omega}{JS}}d\xi \\ \Leftrightarrow \frac{du}{\pm u\sqrt{\frac{\beta JS}{\omega}u^2 + 2u\left(-\frac{1}{2} - \frac{\beta JS}{\omega}\right) + 1 - \frac{V^2}{4\omega JS} + \frac{\beta JS}{\omega}}} &= 2\sqrt{\frac{\omega}{JS}}d\xi. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Um die Gleichung übersichtlicher zu machen, wählen wir:

$$\begin{aligned} a &= \frac{\beta JS}{\omega}, \\ b &= -\frac{1}{2} - \frac{\beta JS}{\omega}, \\ c &= 1 - \frac{V^2}{4\omega JS} + \frac{\beta JS}{\omega}. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Dann modifiziert sich (A.13) wie folgt:

$$\frac{du}{u\sqrt{au^2 + 2bu + c}} = \pm 2d\xi. \quad (\text{A.16})$$

Nach unbestimmter Integration erhalten wir die Gleichung

$$\frac{1}{\sqrt{c}} \ln \left[-\frac{\sqrt{acu^2 + 2bcu + c^2} + bu + c}{u} \right] = \pm 2\xi, \quad (\text{A.17})$$

welche wir umschreiben können, wie folgt [52]:

$$\frac{1}{\sqrt{c}} \operatorname{arccosh} \left[\frac{\frac{c}{u} + b}{\sqrt{b^2 - ac}} \right] = \pm 2\xi. \quad (\text{A.18})$$

Lösen wir (A.18) nach u auf, so ergibt sich

$$u = \frac{c}{\sqrt{b^2 - ac} \cosh(\pm\sqrt{c}2\xi) - b}. \quad (\text{A.19})$$

Jetzt müssen wir noch rücksostituieren und aus [4]

$$\begin{aligned} V &= \frac{2JS}{\Gamma} \sqrt{\frac{2-A}{A}}, \\ \omega &= \frac{2JS}{A\Gamma^2} \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

verwenden, wobei A die Amplitude und Γ die Breite des Solitonpulses in der isotropen Heisenbergkette [4] darstellen. Schließlich können wir noch mit Hilfe von $\cos \Theta = 1 - 2 \sin^2 \left(\frac{\Theta}{2} \right) = 1 - 2v^2 = 1 - 2u$ die 1-Solitonlösung folgendermaßen schreiben:

$$\frac{S^z}{S} = \cos \Theta = 1 - \frac{2A(1 + \beta\Gamma^2)}{1 + A\beta\Gamma^2 + \sqrt{1 + (2 - A)A\beta\Gamma^2} \cosh(2\sqrt{\beta + 1/\Gamma^2}\xi)}. \quad (\text{A.21})$$

Daraufhin wollen wir die interne Phase Φ berechnen. Dazu verwenden wir die Beziehung (A.6):

$$\begin{aligned} d\Phi_S &= \frac{V}{JS} \frac{d\xi}{1 + \cos \Theta} \\ &\stackrel{(\text{A.21})}{=} \frac{1}{\Gamma} \sqrt{\frac{2 - A}{A}} \frac{1 + A\beta\Gamma^2 + \sqrt{1 - (-2 + A)A\beta\Gamma^2} \cosh \left[2\sqrt{\beta + \Gamma^{-2}}\xi \right]}{1 - A + \sqrt{1 - (-2 + A)A\beta\Gamma^2} \cosh \left[2\sqrt{\beta + \Gamma^{-2}}\xi \right]} d\xi. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Nach unbestimmter Integration erhalten wir:

$$\begin{aligned} \Phi_S(\xi) - \Phi_0 &= \frac{V}{2}\xi + \arctan \left[\frac{A - 1 + \sqrt{1 - (-2 + A)A\beta\Gamma^2}}{\sqrt{2(2 - A)}\sqrt{A + \beta\Gamma^2}} \tanh \left[\sqrt{\beta + \Gamma^{-2}} \right] \right] \\ &= \frac{V}{2}\xi + \arctan \left[\frac{\sqrt{2(2 - A)}\sqrt{A + \beta\Gamma^2}}{1 - A + \sqrt{1 - (-2 + A)A\beta\Gamma^2}} \tanh \left[\sqrt{\beta + \Gamma^{-2}}\xi \right] \right] \\ &= \frac{1}{\Gamma} \sqrt{\frac{2 - A}{A}} \xi + \\ &\quad \arctan \left[\frac{\sqrt{2(2 - A)}\sqrt{A + \beta\Gamma^2}}{1 - A + \sqrt{1 - (-2 + A)A\beta\Gamma^2}} \tanh \left[\sqrt{\beta + \Gamma^{-2}}\xi \right] \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Anhang B

Störterme in der Landau-Lifshitz-Gleichung

B.1 Geometrische Betrachtungen

In diesem Kapitel wollen wir die geometrischen Betrachtungen von Kapitel zwei ausführlich berechnen. Ausgehend von dem ursprünglichen Orthonormalsystem $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$, führen wir erst eine Drehung D_1 um die \vec{e}_2 -Achse um den Winkel Θ aus und drehen diese Anordnung im Anschluss um Φ um die soeben neu erhaltene \vec{e}_3' -Achse. Insgesamt bilden wir also einen beliebigen Vektor \vec{X} mit $D_2 D_1 X = X'$ ab.

$$D = \begin{pmatrix} \cos \Phi & -\sin \Phi & 0 \\ \sin \Phi & \cos \Phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \Theta & 0 & \sin \Theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \Theta & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \Theta \cos \Phi & -\sin \Phi & \sin \Theta \cos \Phi \\ \cos \Theta \sin \Phi & \cos \Phi & \sin \Theta \sin \Phi \\ -\sin \Theta & 0 & \cos \Theta \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

Multipliziert man jetzt z.B. \vec{e}_3 von rechts an D, so erhält man genau $\frac{\vec{S}_n}{S} = \vec{e}_{3,n}$. Es gilt nun offensichtlich:

$$\begin{aligned} \cos \Theta \cos \Phi \vec{e}_1 + \cos \Theta \sin \Phi \vec{e}_2 - \sin \Theta \vec{e}_3 &= \vec{e}_{1,n} \\ -\sin \Phi \vec{e}_1 + \cos \Phi \vec{e}_2 &= \vec{e}_{2,n} \\ \sin \Theta \cos \Phi \vec{e}_1 + \sin \Theta \sin \Phi \vec{e}_2 + \cos \Theta \vec{e}_3 &= \vec{e}_{3,n}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Nun müssen wir dieses lineare Gleichungssystem lösen. Dazu vernachlässigen wir nun die vektorielle Notation. Somit können wir schreiben:

$$\begin{pmatrix} \cos \Theta \cos \Phi & \cos \Theta \sin \Phi & -\sin \Theta \\ -\sin \Phi & \cos \Phi & 0 \\ \sin \Theta \cos \Phi & \sin \Theta \sin \Phi & \cos \Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{1,n} \\ e_{2,n} \\ e_{3,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.3})$$

Daraus ergibt sich die Darstellung für $\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix}$:

$$\begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \Theta \cos \Phi & -\sin \Phi & \cos \Phi \sin \Theta \\ \sin \Phi \cos \Theta & \cos \Phi & \sin \Phi \sin \Theta \\ -\sin \Theta & 0 & \cos \Theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{1,n} \\ e_{2,n} \\ e_{3,n} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

Damit erhält man also für \vec{e}_3

$$\vec{e}_3 = -\vec{e}_{1,n} \sin \Theta + \vec{e}_{3,n} \cos \Theta. \quad (\text{B.5})$$

Bei der nächsten Transformation, die $\{\vec{e}_{1,n}, \vec{e}_{2,n}, \vec{e}_{3,n}\}$ auf $\{\vec{e}_{1,n+1}, \vec{e}_{2,n+1}, \vec{e}_{3,n+1}\}$ abbildet, ist die Polarachse durch den Spin \vec{S}_n gelegt, sodass S_{n+1} gegenüber \vec{S}_n um die Winkel θ_{n+1} bzw. ϕ_{n+1} gedreht ist. Dreht man nach derselben Abbildungsvorschrift weiter, so erhält man das Orthonormalsystem $\{\vec{e}_{1,n+2}, \vec{e}_{2,n+2}, \vec{e}_{3,n+2}\}$. Die folgenden Berechnungen beschreiben im Detail die Gesamtbewegung, die das Orthonormalsystem $\{\vec{e}_{1,n}, \vec{e}_{2,n}, \vec{e}_{3,n}\}$ auf $\{\vec{e}_{1,n+2}, \vec{e}_{2,n+2}, \vec{e}_{3,n+2}\}$ abbildet:

$$\vec{S}_{n+1} = S \sin \theta_{n+1} \cos \phi_{n+1} \vec{e}_{1,n} + S \sin \theta_{n+1} \sin \phi_{n+1} \vec{e}_{2,n} + S \cos \theta_{n+1} \vec{e}_{3,n}. \quad (\text{B.6})$$

Folglich ergibt sich :

$$\vec{S}_{n+2} = S \sin \theta_{n+2} \cos \phi_{n+2} \vec{e}_{1,n+1} + S \sin \theta_{n+2} \sin \phi_{n+2} \vec{e}_{2,n+1} + S \cos \theta_{n+2} \vec{e}_{3,n+1}. \quad (\text{B.7})$$

Um $\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+2}$ zu berechnen, ersetzen wir die Basisvektoren zum Index $n+1$ durch die Basisvektoren zum Index n . Mit (B.6) ist $\vec{e}_{3,n+1} = \vec{S}_{n+1}/S$ bereits festgelegt. Wir wählen ferner $\vec{e}_{1,n+1} := -\sin \phi_{n+1} \vec{e}_{1,n} + \cos \phi_{n+1} \vec{e}_{2,n}$, sowie $\vec{e}_{2,n+1} := \vec{e}_{3,n+1} \times \vec{e}_{1,n+1}$. Zusammenfassend gilt also:

$$\begin{aligned} \vec{e}_{1,n+1} &= -\sin \phi_{n+1} \vec{e}_{1,n} + \cos \phi_{n+1} \vec{e}_{2,n} \\ \vec{e}_{2,n+1} &= -\cos \theta_{n+1} \cos \phi_{n+1} \vec{e}_{1,n} - \cos \theta_{n+1} \sin \phi_{n+1} \vec{e}_{2,n} + \sin \theta_{n+1} \vec{e}_{3,n} \\ \vec{e}_{3,n+1} &= \sin \theta_{n+1} \cos \phi_{n+1} \vec{e}_{1,n} + \sin \theta_{n+1} \sin \phi_{n+1} \vec{e}_{2,n} + \cos \theta_{n+1} \vec{e}_{3,n}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

B.2 Stochastische Zeitentwicklung der Energie im Ito-Kalkül

Wir gehen nun auf die Berechnung der Energie im Ito-Kalkül ein:

$$dE = -J \sum_{n=1}^{N-1} \left[\vec{S}_{n+1} \cdot d\vec{S}_n + \vec{S}_n \cdot d\vec{S}_{n+1} + d\vec{S}_n \cdot d\vec{S}_{n+1} \right] \quad (\text{B.9})$$

ein. Setzt man (3.39) in (3.36) ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} d\vec{S}_n = & \frac{1}{1 + \varepsilon^2 S^2} \left\{ \left[-\vec{S}_n \times (\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1} + \beta S (-\vec{e}_{1,n} \sin \Psi_n + \vec{e}_{3,n} \cos \Psi_n)) \right] + \right. \\ & \varepsilon (\vec{S}_n (\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1} + \beta S \cdot 1 \cdot (-\vec{e}_{1,n} \sin \Psi_n + \vec{e}_{3,n} \cos \Psi_n))) \\ & - S^2 (\vec{S}_{n-1} + \vec{S}_{n+1} + \beta S (-\vec{e}_{1,n} \sin \Psi_n + \vec{e}_{3,n} \cos \Psi_n)) - \sigma^2 \vec{S}_n \Big] dt \\ & \left. - \sigma \vec{S}_n \times d\vec{W}_n + \varepsilon \sigma [\vec{S}_n (\vec{S}_n \cdot d\vec{W}_n) - S^2 d\vec{W}_n] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

In der Ito-Form hat man Terme von linearer Ordnung (z.B. der Form $dW dW = dt$). Für die Inkremente W_i gelten folgende Beziehungen [17]:

$$\begin{aligned} dW_i(t) dW_j(t) &= \delta_{ij} dt, \quad [dW_i(t)]^{N+2} = 0 \quad (N > 0) \\ dW_i(t) dt &= 0, \quad dt^{1+N} = 0 \quad (N > 0). \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Weiterhin gilt im Ito-Kalkül [22]: $\langle d\vec{W}_i \vec{S}_j \rangle = 0$. Damit erhalten wir für den Mittelwert $\langle E \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{1}{1 + \varepsilon^2 S^2} \langle \vec{S}_{n+1} \cdot d\vec{S}_n + \vec{S}_n \cdot d\vec{S}_{n+1} \rangle = \\ &= \sum_{n=1}^{N-1} \frac{J}{1 + \varepsilon^2 S^2} \langle -J (\vec{S}_n \times \vec{S}_{n-1}) \vec{S}_{n+1} - J (\vec{S}_{n+1} \times \vec{S}_{n+2}) \vec{S}_n + \\ &+ \beta J (\sin \Theta_{n+1} \sin \Phi_{n+1} \sin \Psi_n + \sin \Theta_{n+1} \sin \Psi_{n+1}) + J \varepsilon [\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n-1} + \\ &+ 2 (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1})^2 + \vec{S}_{n+1} \cdot \vec{S}_n \vec{S}_{n+1} \vec{S}_{n+2} - S^2 \vec{S}_{n-1} \vec{S}_{n+1} - 2S^4 - \vec{S}_n \vec{S}_{n+2} + \\ &+ \beta S^4 \sin \Psi_n \sin \Theta_{n+1} \cos \Phi_{n+1}] - 2\sigma^2 \vec{S}_n \vec{S}_{n+1} \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

wobei wir alle Terme, deren Index größer als $N+1$ ist, gleich Null setzen. Bei Berechnung des anisotropen Anteils von (B.12) haben wir stets die Einheitsvektoren $\hat{e}_{n+1,i}$ gemäß der Beziehung (B.8) mit den Einheitsvektoren $\hat{e}_{n,i}$ ersetzt und die Bedingung $\vec{e}_{3,n+1} = \vec{S}_{n+1}/S$ benutzt. Vertauschen wir in Gleichung (B.12) im Kreuzprodukt der zweiten Summe \vec{S}_{n+2} mit \vec{S}_n , so sehen wir sofort, dass

$$\sum_{n=1}^{N-1} -J (\vec{S}_n \times \vec{S}_{n-1}) \vec{S}_{n+1} + J (\vec{S}_{n+1} \times \vec{S}_n) \vec{S}_{n+2} = 0 \quad (\text{B.13})$$

ist. Damit vereinfacht sich die Gleichung (B.12) zu

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle E \rangle = & -\frac{J}{1 + \varepsilon^2 S^2} \left\{ \sum_{n=1}^{N-1} \left[2J\varepsilon S^4 + \left\langle S^3 \beta (\sin \Psi_n \sin \Theta_{n+1} \sin \Phi_{n+1} + \sin \Psi_{n+1} \cdot \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. \sin \Theta_{n+1} + \varepsilon S \sin \Theta_{n+1} \sin \Psi_n \cos \Phi_{n+1}) \right\rangle - 2\sigma^2 \langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \rangle - 2J\varepsilon \langle (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1})^2 \rangle \right] - \\ & \left. - 2J\varepsilon \sum_{n=1}^{N-2} \left[\langle (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}) (\vec{S}_{n+1} \cdot \vec{S}_{n+2}) \rangle - S^2 \langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+2} \rangle \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Anhang C

Störungstheorie für schwaches Rauschen

Wir wollen hier die stochastische Bewegungsgleichung ohne Dämpfung

$$\begin{aligned}dX &= \frac{2JS}{\Gamma} \sqrt{\frac{2}{A} - 1} dt + \sigma \alpha(A, \Gamma) dW_X, \\dA &= \sigma \beta_1(A, \Gamma) dW_1, \\d\Gamma &= \sigma \gamma_1(A, \Gamma) dW_1 + \sigma \gamma_2(A, \Gamma) dW_2\end{aligned}\tag{C.1}$$

analytisch lösen. Dazu führen wir eine störungstheoretische Behandlung (*small noise expansion*) durch. Die Störungsrechnung führen wir nur für die erste Ordnung von σ durch, da wir Terme zweiter Ordnung (mögliche Zusatzterme zur Ito-Gleichung) bereits vernachlässigt haben. Daher setzen wir an:

$$\begin{aligned}X &= X_0 + \Delta X = X_0(t) + \sum_{n=1}^{\infty} X_n \sigma^n \approx X_0 + Vt + \sigma X_1, \\A &= A_0 + \Delta A = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sigma^n \approx A_0 + \sigma A_1, \\ \Gamma &= \Gamma_0 + \Delta \Gamma = \Gamma_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \Gamma_n \sigma^n \approx \Gamma_0 + \sigma \Gamma_1,\end{aligned}\tag{C.2}$$

wobei die Terme X_0 , A_0 und Γ_0 den Anfangswerten entsprechen, bzw. in den Simulationen den Initialisierungsdaten, d.h.

$$A_0(t) = A(0), \Gamma_0(t) = \Gamma(0), X_0(t) = X(0) + \frac{2JS}{\Gamma_0} \sqrt{\frac{2}{A_0} - 1} t.\tag{C.3}$$

Da wir zum Zeitpunkt $t = 0$ noch keine störungstheoretische Korrektur der kollektiven Variablen haben, gilt: $A_1(t) = \Gamma_1(0) = X_1(0) = 0$. Entwickeln wir nun die rechte Seite (C.1) nach $\Delta A = A_1(dt) - A_1(0) = A_1(dt)$ und $\Delta \Gamma = \Gamma_1(dt) - \Gamma_1(0) = \Gamma_1(dt)$

nach Taylor in erster Ordnung von σ , so können wir schreiben:

$$\begin{aligned} dX_1 = & -\frac{2JS}{\Gamma_0^2} \sqrt{\frac{2}{A_0} - 1} \Gamma_1 dt - \\ & \frac{2JS}{A_0^2 \Gamma_0} \left(\frac{2}{A_0} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}} A_1 dt + \alpha(A_0, \Gamma_0) dW_X. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Da A und Γ keine zeitabhängigen deterministischen Anteile haben, können wir direkt schreiben:

$$\begin{aligned} dA_1 &= \beta(A_0, \Gamma_0) dW_1, \\ d\Gamma_1 &= \gamma_1(A_0, \Gamma_0) dW_1 + \gamma_2(A_0, \Gamma_0) dW_2. \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

(C.5) lässt sich sofort lösen:

$$\begin{aligned} A_1(t) &= \beta_1(A_0, \Gamma_0) [W_1(t) - W_1(0)], \\ \Gamma_1(t) &= \gamma_1(A_0, \Gamma_0) [W_1(t) - W_1(0)] + \gamma_2(A_0, \Gamma_0) [W_2(t) - W_2(0)]. \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

A_1 und Γ_1 setzen wir nun direkt in X_1 ein und erhalten

$$\begin{aligned} X_1(t) = & -\frac{2JS}{\Gamma_0^2} \sqrt{\frac{2}{A_0} - 1} \int_0^t \left\{ \gamma_1(A_0, \Gamma_0) [W_1(t') - W_1(0)] + \right. \\ & \left. \gamma_2(A_0, \Gamma_0) [W_2(t') - W_2(0)] \right\} dt' - \\ & \frac{2JS}{A_0^2 \Gamma_0} \left(\frac{2}{A_0} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}} \int_0^t \beta_1(A_0, \Gamma_0) [W_1(t') - W_1(0)] dt' + \\ & \alpha(A_0, \Gamma_0) [W_X(t) - W_X(0)]. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Es ergibt sich also bis einschließlich erster Ordnung in σ :

$$\begin{aligned} X(t) &= X_0(t) + \sigma X_1(t) \\ \langle X(t) \rangle &= X_0(t), \\ \text{Var}[X(t)] &= \sigma^2 \langle (X_1(t))^2 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit setzen wir $t_1 \geq t_2$ und erhalten mit Gleichung (C.7):

$$\begin{aligned}
\langle X_1(t_1)X_1(t_2) \rangle &= \alpha^2 t_2 + \\
&\frac{4J^2 S^2}{A_0^4 \Gamma_0^2} \left(\frac{2}{A_0} - 1 \right)^{-1} \beta^2 \left\langle \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} [W_1(t'_1) - W_1(0)] [W_1(t'_2) - W_1(0)] dt'_1 dt'_2 \right\rangle + \\
&\frac{4J^2 S^2}{\Gamma_0^4} \left(\frac{2}{A_0} - 1 \right) \left\langle \left\{ \gamma_1^2 \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} [W_1(t'_1) - W_1(0)] [W_1(t'_2) - W_1(0)] dt'_1 dt'_2 + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \gamma_2^2 \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} [W_2(t'_1) - W_2(0)] [W_2(t'_2) - W_2(0)] dt'_1 dt'_2 \right\} \right\rangle + \\
&2 \frac{4J^2 S^2}{A_0^2 \Gamma_0^3} \beta \gamma_1 \left\langle \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} [W_1(t'_1) - W_1(0)] [W_1(t'_2) - W_1(0)] dt'_1 dt'_2 \right\rangle. \quad (C.9)
\end{aligned}$$

Dazu müssen wir folgenden Ausdruck auswerten:

$$I := \left\langle \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} [W(t'_1) - W(0)] [W(t'_2) - W(0)] dt'_1 dt'_2 \right\rangle. \quad (C.10)$$

Unter Beachtung von $\langle W(t_1)W(t_2) \rangle = \min(t_1, t_2)$ erhalten wir

$$\begin{aligned}
I &= \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \langle [W(t'_1) - W(0)] [W(t'_2) - W(0)] \rangle dt'_1 dt'_2 = \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \min(t'_1, t'_2) dt'_1 dt'_2 = \\
&= \int_{t_2}^{t_1} dt'_1 \int_0^{t_2} t'_2 dt'_2 + \int_0^{t_2} dt'_2 \int_0^{t_2} dt'_1 t'_1 + \int_0^{t_2} dt'_1 \int_0^{t_2} dt'_2 t'_2 = \\
&= (t_1 - t_2) \frac{t_2^2}{2} + \frac{t_2^3}{6} + \frac{t_2^3}{6} = \frac{1}{2} t_2^2 \left(t_1 - \frac{1}{3} t_2 \right). \quad (C.11)
\end{aligned}$$

Damit lautet (C.9):

$$\begin{aligned}
\langle X_1(t_1)X_1(t_2) \rangle &= \alpha^2 t_2 + \frac{4J^2 S^2}{A_0^4 \Gamma_0^2} \left(\frac{2}{A_0} - 1 \right)^{-1} \beta_1^2 I + \\
&\frac{4J^2 S^2}{\Gamma_0^4} \left(\frac{2}{A_0} - 1 \right) (\gamma_1^2 + \gamma_2^2) I + 2 \frac{4J^2 S^2}{A_0^2 \Gamma_0^3} \beta \gamma_1 I. \quad (C.12)
\end{aligned}$$

Setzen wir nun $t_1 = t_2 = t$, so vereinfacht sich (C.12) zu:

$$\text{Var}[X(t)] = \sigma^2 \Sigma_{XX} t + \sigma^2 \frac{4J^2 S^2}{3\Gamma_0^2} \left[\frac{\Sigma_{AA}}{A_0^4} \left(\frac{2}{A_0} - 1 \right)^{-1} + \frac{\Sigma_{\Gamma\Gamma}}{\Gamma_0^2} \left(\frac{2}{A_0} - 1 \right) + \frac{2\Sigma_{A\Gamma}}{A_0^2 \Gamma_0} \right] t^3. \quad (C.13)$$

Mit (3.136) ergibt sich also bis einschließlich erster Ordnung in σ für X , A und Γ :

$$\begin{aligned}
X(t) &= X_0(t) + \sigma X_1(t), \\
\langle X(t) \rangle &= X_0(t), \\
\text{Var}[X(t)] &= \sigma^2 \langle (X_1(t))^2 \rangle, \\
&= \sigma^2 \Sigma_{XX} t + \sigma^2 \Sigma_{cub} t^3, \\
\text{Var}[A(t)] &= \sigma^2 \Sigma_{AA} t, \\
\text{Var}[\Gamma(t)] &= \sigma^2 \Sigma_{\Gamma\Gamma} t.
\end{aligned} \tag{C.14}$$

Anhang D

Die Solitongeschwindigkeit

Ausgehend von der Definition der Solitonposition (4.43) in Kapitel 4.5.1, die wir nochmals vorstellen

$$\vec{X} = \frac{\sum_{\vec{n}} \vec{n} (S - S_{\vec{n}}^z)}{\sum_{\vec{n}} S - S_{\vec{n}}^z}, \quad (\text{D.1})$$

berechnen wir folgendermaßen die Solitongeschwindigkeit $\dot{\vec{X}}$:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{X}}{dt} &= \frac{S}{a^2 N} \int d^2 r \vec{r} \sin \Theta \dot{\Theta} \stackrel{(4.5b)}{=} \frac{1}{N} \int d^2 r \vec{r} \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \Phi} \stackrel{(4.7)}{=} \\ &= -\frac{1}{N} \int JS^2 d^2 r \vec{r} \nabla \cdot (\sin^2 \Theta \nabla \Phi). \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Zur Einfachheit berechnen wir $\dot{\vec{X}}$ komponentenweise und benutzen den Zusammenhang

$$\nabla \cdot (x_i \sin^2 \Theta \nabla \Phi) = x_i \nabla \cdot (\sin^2 \Theta \nabla \Phi) + \sin^2 \Theta \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}. \quad (\text{D.3})$$

Damit folgt sofort:

$$\begin{aligned} \frac{dX_i}{dt} &= \frac{JS^2}{N} \int d^2 r x_i \nabla \cdot (\sin^2 \Theta \nabla \Phi) \stackrel{(D.3)}{=} - \underbrace{\frac{JS^2}{N} \int d^2 r \nabla \cdot (x_i \sin^2 \Theta \nabla \Phi)}_{=0} + \\ &+ \frac{JS^2}{N} \int d^2 r \sin^2 \Theta \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

Die Solitongeschwindigkeit lautet folglich

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \frac{JS^2}{N} \int d^2 r \sin^2 \Theta \nabla \Phi. \quad (\text{D.5})$$

Beziehen wir nun mathematisch kleine Störungen durch die Magnonenmoden, für die

$$\theta = \theta_0(\rho) + \sum_m A_m f_m(\rho) \cos(\Phi_m), \quad (\text{D.6a})$$

$$\phi = \varphi_0 + \chi - \omega_p t + \sum_m \frac{A_m}{\sin \theta_0} g_m(\rho) \sin \Phi_m \quad (\text{D.6b})$$

gilt, in die Berechnung der Geschwindigkeit mit ein, so erhalten wir für die Integranden in (D.5)

$$\sin^2 \Theta = \sin^2 \Theta_0 + \sin 2\Theta_0 \sum_m \frac{A_m}{\sin \Theta_0} g_m \sin(m\chi - \omega_m t) \quad (\text{D.7a})$$

$$\nabla \Phi = \frac{\hat{e}_\chi}{r} + \sum_m A_m \left[\left(\frac{g_m}{\sin \Theta_0} \right)' \sin(m\chi - \omega_m t) \hat{e}_r + \frac{g_m}{\sin \Theta_0} \frac{m}{r} \cos(m\chi - \omega_m t) \hat{e}_\chi \right], \quad (\text{D.7b})$$

wobei wir $\nabla \frac{g_m}{\sin \Theta_0} = \left(\frac{g_m}{\sin \Theta_0} \right)'$ gesetzt haben. Nun setzen wir noch

$$\hat{e}_r = \hat{e}_x \cos \chi + \hat{e}_y \sin \chi, \quad \hat{e}_\chi = -\hat{e}_x \sin \chi + \hat{e}_y \cos \chi \quad (\text{D.8})$$

und als Abkürzung $m\chi - \omega_m t := \Phi_m$. Berücksichtigen wir (D.7) und (D.8), so verwandelt sich \vec{X} zu:

$$\begin{aligned}
\frac{d\vec{X}}{dt} &= \frac{JS^2}{N} \int r dr d\chi \sin^2 \Theta_0 \left(-\frac{\sin \chi}{r} \hat{e}_x + \frac{\cos \chi}{r} \hat{e}_y \right) + \\
&+ \frac{2\pi JS^2}{N} \sum_m A_m \int r dr \left[\left[\sin^2 \Theta_0 \left(\frac{g_m}{\sin \Theta_0} \right)' \langle \sin \Phi_m \cos \chi \rangle - \frac{\sin \Theta_0 g_m}{r} \langle \cos(\Phi_m) \sin \chi \rangle - \right. \right. \\
&- \frac{\sin 2\Theta_0 f}{r} \langle \cos(\Phi_m) \sin \chi \rangle \left. \right] \hat{e}_x + \left[\sin^2 \Theta_0 \left(\frac{g_m}{\sin \Theta_0} \right)' \langle \sin \Phi_m \sin \chi \rangle + \right. \\
&+ \frac{\sin \Theta_0 g_m}{r} \langle \cos(\Phi_m) \cos \chi \rangle + \sin 2\Theta_0 \frac{f}{r} \langle \cos(\Phi_m) \cos \chi \rangle \left. \right] \hat{e}_y = \\
&= \frac{2\pi JS^2}{N} \sum_{m \in \{-1, +1\}} A_m \int r dr \left[\left[-\frac{1}{2} \sin^2 \Theta_0 \left(\frac{g_m}{\sin \Theta_0} \right)' \cdot \right. \right. \\
&\cdot \delta_{|m|,1} \sin \omega_m t - \frac{\sin \Theta_0 g m^2}{2r} \delta_{|m|,1} \sin \omega_m t - \frac{\sin 2\Theta_0 f m}{2r} \delta_{|m|,1} \sin \omega_m t \left. \right] \hat{e}_x + \\
&+ \left[\left(\frac{g}{\sin \Theta_0} \right)' \frac{\sin^2 \Theta_0 m}{2} \delta_{|m|,1} \cos \omega t + \frac{\sin \Theta_0 g m}{2r} \delta_{|m|,1} \cos \omega_m t + \frac{\sin 2\Theta_0 f}{2r} \delta_{|m|,1} \cos \omega t \right] \hat{e}_y \left. \right] = \\
&= \frac{\pi JS^2}{N} \left[A_1 (\hat{e}_y \cos \omega_1 t - \hat{e}_x \sin \omega_1 t) \underbrace{\int r dr \left(\sin^2 \Theta_0 \left(\frac{g}{\sin \Theta_0} \right)' + \frac{g \sin \Theta_0}{r} + \frac{\sin 2\Theta_0 f}{r} \right)}_{a_1} - \right. \\
&- A_{-1} (\hat{e}_y \cos \omega_{-1} t + \hat{e}_x \sin \omega_{-1} t) \underbrace{\int r dr \left(\sin^2 \Theta_0 \left(\frac{g}{\sin \Theta_0} \right)' + \frac{g \sin \Theta_0}{r} + \frac{\sin 2\Theta_0 f}{r} \right)}_{a_{-1}} \left. \right] \\
&= \frac{\pi JS^2}{N} \left[A_1 (-\hat{e}_x \sin \omega_1 t + \hat{e}_y \cos \omega_1 t) a_1 - A_{-1} (\hat{e}_x \sin \omega_{-1} t + \hat{e}_y \cos \omega_{-1} t) a_{-1} \right] \\
&= \frac{\pi JS^2}{N} \left[A_1 a_1 \left(\hat{e}_x \cos(\omega_1 t + \frac{\pi}{2}) + \hat{e}_y \sin(\omega_1 t + \frac{\pi}{2}) \right) - \right. \\
&- A_{-1} a_{-1} \left(-\hat{e}_x \cos(\omega_{-1} t + \frac{\pi}{2}) + \hat{e}_y \sin(\omega_{-1} t + \frac{\pi}{2}) \right) \left. \right] \\
&= \frac{\pi JS^2}{N} \left[A_1 a_1 \exp \left(i \left(\omega_1 t + \frac{\pi}{2} \right) \right) + A_{-1} a_{-1} \exp \left(i \left(-\omega_{-1} t - \frac{\pi}{2} \right) \right) \right] \\
&= \frac{i\pi JS^2}{N} \left[A_1 a_1 \exp(i\omega_1 t) - A_{-1} a_{-1} \exp(-i\omega_{-1} t) \right].
\end{aligned} \tag{D.9}$$

Setzen wir die Identität

$$f_1 = \frac{d}{dr} \Theta_0, \quad g_1 = -\frac{\sin \Theta_0}{r} \tag{D.10}$$

in \vec{X} ein, so verschwindet der Anteil mit $m = 1$ und die Solitongeschwindigkeit lautet:

$$\begin{aligned}\dot{\vec{X}} &= -\frac{i\pi JS^2 l_0}{N} A_{-1} a_{-1}(\rho) \exp(-i\omega_{-1}t) = \\ &= -\frac{i\omega_0 l_0 N_0}{2N} \underbrace{A_{-1} a_{-1}(\rho)}_{C_{-1}} \exp(-i\omega_{-1}t),\end{aligned}\tag{D.11}$$

wobei wir r mit $\rho = r/l_0$ ersetzt haben.

Anhang E

Parallele Programmierung

E.1 Vorteile eines Linuxclusters bzw. einer Shared-Memory-Maschine

Wie bereits in Kapitel (4.6.1) erwähnt, haben wir die Möglichkeit, mit Shared-Memory-Multiprozessormaschinen oder einem Clusterrechner, hier einen Linuxcluster, zu arbeiten. Abhängig von der Systemgröße gibt man einer der beiden Methoden die Präferenz. Der Grund hierfür ist die Tatsache, dass bei einem Clustersystem eine Kommunikation zwischen separaten Prozessen gewährleistet werden muss, die wiederum Zeit beansprucht, während bei einem Vektorrechner oder allgemein einer Shared-Memory-Multiprozessormaschine alle Prozessoren auf einen gemeinsamen Speicher zugreifen können. Für gegebene N Prozessoren gleicher Architektur wird immer eine Shared-Memory-Multiprozessormaschine die schnellere Variante sein. Der Grund, weshalb man aber bei größer werdenden Systemen $L \geq 800a$ auf einen Linuxcluster zurückgreifen sollte, ist die Tatsache, dass dieser leicht skalierbar (in der Rechenleistung erweiterbar) ist, und man in dem konkreten Beispiel mit bis zu 24 Prozessoren gleichzeitig rechnen kann, während die Shared-Memory-Multiprozessormaschinen hier auf acht Prozessoren beschränkt sind. Die zeitaufwendige Kommunikation fällt bei einem großen Gitter nicht mehr so sehr ins Gewicht, da die reine asynchrone Rechenzeit wesentlich größer ist als die für Synchronisation und den Datentransfer benötigte Zeit. Selbstverständlich gibt es bei dieser Art von Berechnung, die hier konkret mit dem Standard *message passing interface* realisiert wurde, eine optimale Anzahl von Prozessoren, für die die Berechnung des Gitters noch optimal verteilt ist und die Kommunikationsprozesse in einem gesunden Verhältnis zu den Zeitintervallen der asynchronen Berechnungen stehen. Bei einer Erhöhung der Prozessorenanzahl N verlangsamt sich dann der Arbeitsprozess, da die Kommunikation zwischen den Prozessoren mehr Zeit kostet, als durch die verteilte Berechnung eingespart werden kann. Erniedrigt man umgekehrt N , so sind die zu berechnenden Teilbereiche des Gitters größer und damit auch der Arbeitsprozess insgesamt langsamer, als durch die weniger gewordene Kommunikation eingespart

werden kann. Natürlich findet man in der Regel sehr selten die optimale Anzahl von Prozessoren, da man auf einem Linuxcluster durch andere Mitbenutzer in der Zahl der gerade freistehenden Prozessoren beschränkt ist. Obendrein können noch große Wartezeiten anfallen, um schließlich die optimale Anzahl von Prozessoren auszutesten. Zumal aber der Linuxcluster mit zwanzig Prozessoren trotzdem bei einem Lauf mit einer Spinsystemgröße von $L = 800$ und einer Gesamtheit von $t = 48000$ eine Rechenzeit von ca. 35 Stunden benötigt wird, ist es ratsam, sowohl den Cluster als auch die Shared-Memory-Multiprozessormaschinen für verschiedene Parametersätze gleichzeitig einzusetzen, um in erträglicher Zeit eine gewisse Anzahl von Simulationen durchführen zu können.

Bei den erheblichen Nachteilen, die ein Linuxcluster mit sich bringt, stellt sich die Frage, warum man nicht ausschließlich große Shared-Memory-Maschinen kauft. In Zeiten knapper Mittel werden sich Universitäten eher Linuxcluster zulegen, bzw. bereits bestehende erweitern, als auf den Kauf großer Shared-Memory-Maschinen zu setzen, welche wesentlich teurer sind.

E.2 Parallelisierung des Programmcodes

E.2.1 MPI

Im Folgenden werden wir nur ganz grundlegend erklären, was wir konzeptionell bei einer Parallelisierung machen. Wir beginnen dazu mit der Art von Parallelisierung, mit der man auf einem Linuxcluster arbeitet.

Auf jedem Knoten des Clusters wird ein eigenständiger Prozess ausgeführt. Diese einzelnen Prozesse kommunizieren über das Netzwerk, mit dem die einzelnen Knoten verbunden sind. Die einfachste Möglichkeit, ein Programm derart zu parallelisieren, bietet der sogenannte *MPI-Standard*. Eine hilfreiche Referenz hierzu ist [55]. Dabei gibt es einen Masterprozess, der sich um die Verwaltung, bzw. Ein- und Ausgabe der Daten kümmert (d.h. Daten initialisieren, einlesen und speichern) und ebenfalls etwas berechnet. Die anderen Prozesse (sogenannte Slaves) rechnen lediglich und senden berechnete Daten an den Masterprozess. Diese Konzept ist nötig, damit die Daten in der richtigen Reihenfolge in der Ausgabedatei erscheinen.

In unserem Fall unterteilen wir das Gitter in horizontale Streifen. Da wir aber noch die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung berücksichtigen müssen, ist es nötig, eine Kommunikation zu realisieren, die es den jeweiligen Prozessen ermöglicht, die Werte der Streifenränder auszutauschen. Dabei werden jeweils die beiden oberen und unteren Ränder der Streifen nach jedem zweiten Teilschritt des Runge-Kutta-Algorithmus ausgetauscht, um eine gute Balance zwischen Latenzzeit (Zeit, in der die Prozesse synchronisiert werden), Datentransfervolumen (Transferzeit), und der Rechenzeit zu erreichen.

Aus der Nächsten-Nachbar-Wechselwirkung folgt, dass die zwei Nachbarspinzeilen

von Streifen $i + 1$ und $i - 1$ zur Berechnung von Streifen i benötigt werden. Da wir keine fixen, sondern periodische Randbedingungen verwenden, muss der oberste Bereich (Streifen) mit dem untersten Bereich Daten austauschen, linke und rechte Ränder werden prozesslokal ausgetauscht

Weil bei jedem zweiten Teilschritt jeweils Daten zwischen immer den gleichen Knoten (Nodes) ausgetauscht werden, wählen wir den von den meisten MPI-Implementierungen unterstützten, persistenten Verbindungsmodus, um den Overhead (was an zusätzlicher Rechenzeit wegen des Verbindungsaufbaus anfällt) zu verkleinern. Diese Verbindungen werden vor Beginn der Integration aufgebaut und stehen dann zur schnellen Benutzung bereit. Der Transfer erfolgt im asynchronen, gepufferten Modus. Dabei werden die Daten, sobald ein Streifen fertig berechnet wurde, in einen Puffer gestellt, sodass diese Node nicht auf die Empfangsbereitschaft der anderen Nodes warten muss. Vor der weiteren Integration wird dann auf die Information der jeweiligen Nachbarn gewartet. Mit diesem Verfahren erreicht man die maximal mögliche Zeitspanne, in der die einzelnen Nodes asynchron rechnen können.

Nach einer gewissen Anzahl von Integrationsschritten werden Solitonposition und Radius bestimmt, wobei diese Berechnung auch möglichst auf allen Knoten verteilt erfolgt. Die berechneten Daten werden an den Masterprozess geschickt, welcher diese dann in einer Datei speichert. Es besteht auch die Möglichkeit, einzelne Spins zeitlich zu verfolgen. Diese Daten werden ebenfalls an den Masterprozess geschickt (falls sie sich nicht ohnehin in dem von ihm berechneten Bereich befinden) und ausgegeben.

Die Simulation kann abgebrochen werden, wenn der Masterprozess in seinem Arbeitsverzeichnis die Datei „VMDCANCEL“ findet. Daraufhin werden sämtliche Spindaten an den Masterprozess geschickt, welcher diese dann in eine Datei schreibt, um die Simulation gegebenenfalls fortsetzen zu können.

E.2.2 OPEN MP

Für die Parallelisierung auf Shared-Memory-Multiprozessormaschinen verwendet man sogenannte Parallelisierungsdirektiven, welche von speziellen Compilern für diese Maschinen verstanden werden. Eine systemunabhängige Version stellt *OPEN MP* dar. In diesem konkreten Fall wurde jedoch mit sogenannten Sun-style-Direktiven gearbeitet, da ohnehin auf einem Sun-System gearbeitet wurde, und damit die schnellsten Resultate zu erwarten sind. Beide Systeme sind sehr ähnlich und unterscheiden sich nur geringfügig in ihrer Syntax. Die jeweils äußeren Schleifen der Spinfeldintegration (sowie andere parallelisierbare Schleifen) werden mit diesen Direktiven versehen. Bei der Ausführung des Programms werden diese Schleifen für verschiedene Iterationsbereiche parallel auf den einzelnen Prozessoren berechnet. Je nach Abhängigkeit der Variablen müssen manche als *Private* bzw. *Reduction* deklariert werden. *Private*-Variablen nehmen in den verschiedenen Threads verschiedene

Werte (z.B. für Hilfsvariablen nötig) an (sozusagen kein Shared-Memory), *Reduction*-Variablen werden für Summen etc. verwendet, die in einer Schleife in verschiedenen Threads aufgeteilt summiert wird, um am Ende der parallelisierten Schleife das Gesamtergebnis vorliegen zu haben.

Somit wird das Programm hauptsächlich auf einem Prozessor ausgeführt und nur bei rechenintensiven Schleifen aufgespalten. Der große Vorteil dieser Methode liegt im schnellen Zugriff auf das Shared-Memory von allen Threads (parallele Ausführungsstränge) aus. Das macht latenzzeitintensive Kommunikation über Netzwerkgeräte überflüssig.

Abschließend möchten wir noch erwähnen, dass ein Programm zur Geschwindigkeitsoptimierung unbedingt erst in seiner Grundkonzeption zu minimalisieren ist, d.h., unnötige Rechenschritte vermieden und umfangreiche Schleifen nur die absolut notwendigen Rechenschritte enthalten sollten. Initialisierungen sind möglichst immer vor Schleifenanfang zu setzen. Der nächste Schritt besteht darin, einen zum jeweiligen Rechner passenden Compiler finden, der möglichst aktuell sein sollte. Geschwindigkeitsunterschiede zwischen einzelnen Compilern sind enorm (bis zu einem Faktor von ungefähr 2.5 – 3.0). Zuletzt sollte man sich über verschiedene Compileroptionen informieren, die auch geschwindigkeitsoptimierend wirken. Beispielsweise ist es ratsam, auf Rechnern mit Intel Prozessoren nicht den GNU-Compiler (bei Fortran 77: f77 oder g77), sondern den neuesten Intelcompiler (bei Fortran: ifort oder ifc) zu verwenden.

Sollte nach diesen Geschwindigkeitsoptimierungen das Programm immer noch zu langsam sein, dann kann man eine Parallelisierung des Programms verwenden, wobei eine Shared-Memory-Multiprozessormaschine meist die einfachere und schnellere Lösung darstellt. Ist dies nicht möglich, ist bei der Parallelisierung für einen Clusterrechner vor allem auf eine sinnvolle Aufgabenverteilung unter den einzelnen Prozessen zu achten, um möglichst große Abschnitte asynchron parallel berechnen zu können, da die Synchronisation der einzelnen Prozesse den geschwindigkeitsbegrenzenden Faktor darstellt.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Rubinstein 1970 *J. Math. Phys.* **11** 258
- [2] M. J. Ablowitz, D. J. Kaup and A. C. Newell and H. Segur 1973 *Phys. Rev. Lett.* **30** 1262
- [3] P. Lax 1968 *Comm. Pure and Applied Math.* **21** 467
- [4] M. Meister 2001, Dissertation *Zur Diffusion von Solitonen in der Heisenbergkette*
- [5] M. Meister and F. G. Mertens 2000, *J. Phys. A* **33** 2195
- [6] A. M. Kosevich, B. A. Ivanov and A. S. Kovalev 1990 *Phys. Rep.* **194** 117
- [7] N. R. Quintero, A. Sánchez and F. G. Mertens 2000 *Phys. Rev. E* **62** R60
- [8] N. R. Quintero, A. Sánchez and F. G. Mertens 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 871
- [9] N. R. Quintero, A. Sánchez and F. G. Mertens 2000 *Phys. Rev. E* **62** 5695
- [10] A. R. Bishop, J. A. Krumhansl and S. E. Trullinger 1980 *Physica D* **1** 1
- [11] N. R. Quintero, A. Sánchez and F. G. Mertens 1999 *Phys. Rev. E* **60** 222
- [12] N. R. Quintero, A. Sánchez and F. G. Mertens 2000 *Eur. Phys. J. B* **16** 361
- [13] P. Langevin 1908 *Comptes. Rendues* **146** 530
- [14] C. S. Gardner, J. M. Greene, M. D. Kruskal and R. M. Miura 1967 *Phys. Rev. Lett.* **19** 1095
- [15] T. Kamppeter 1999, Dissertation *Dynamik von Wirbeln im klassischen zweidimensionalen Heisenbergmodell bei endlichen Temperaturen*
- [16] B. A. Ivanov and A. K. Kolezhuk 1990 *Phys. Lett. A* **146** 190
- [17] C. W. Gardiner 1983 *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences* (Berlin: Springer)
- [18] M. San Miguel and R. Toral 1998 in *Nonequilibrium Structures VI* ed Tirapegui E (Dordrecht: Kluwer)

- [19] J. García-Ojalvo and J. M. Sancho 1999 *Noise in Spatially Extended Systems* (Berlin: Springer)
- [20] T. Kamppeter, F. G. Mertens, A. Sánchez, A. R. Bishop, F. Dominguez-Adame and N. Grønbech-Jensen 1999 *Eur. Phys. J. B* **7** 607
- [21] T. Kamppeter, F. G. Mertens, E. Moro, A. Sánchez and A. R. Bishop 1999 *Phys. Rev. B* **59** 11349
- [22] J. Honerkamp 1990 *Stochastische Dynamische Systeme* (Weinheim: VCH Verlagsgesellschaft)
- [23] F. G. Mertens, H. J. Schnitzer and A. R. Bishop 1997 *Phys. Rev. B* **56** 2510
- [24] A. M. Kosevich, B. A. Ivanov and A. S. Kovalev 1977 *Fiz. Nizk. Temp.* **3** 906
- [25] A. M. Kosevich., B. A. Ivanov and A. S. Kovalev 1977 *Pis'ma Zh. eksp. Teor. Fiz.* **25** 11, 516
- [26] J. Schliemann 1999, Dissertation *Nichtlineare Anregungen in quantenmechanischen Vielteilchensystemen*
- [27] W. Lenz 1920, *Phys. Zeitschrift* **21** 613
- [28] P. J. Pascual and L. Vázquez 1985 *Phys. Rev. B* **32** 8305
- [29] M. J. Rodríguez-Plaza and L. Vázquez 1990 *Phys. Rev. B* **41** 11437
- [30] D. D. Sheka and B. A. Ivanov and F. G. Mertens 2001, *Phys. Rev. B* **64** 024432
- [31] F. Kh. Abdullaev, R.M. Galimzyanov and A. S. Kirakosyan *Phys. Rev. B* **60**, **9** 6552
- [32] A. S. Kovalev and A. M. Kosevich and K. V. Maslov 1979, *JETP Letters* **30** 296
- [33] A. M. Kosevich and V. P. Voronov 1981, *Sov. J. Low Temp. Phys.* **7** 442
- [34] V. P. Voronov, B. A. Ivanov and A. K. Kosevich 1983 *Sov. Phys JETP* **84** 2235
- [35] T. Kamppeter, S. A. Leonel, F. G. Mertens, M. E. Gouvêa, A. S. T. Pires and A. S. Kovalev 2001 *EPJB* **21** 93
- [36] A. A. Belavin and A. M. Polyakov 1975 *JETP Letters* **22** 245
- [37] A. A. Zhmudskii and B. A. Ivanov 1997 *JETP Letters* **65** 945
- [38] A. A. Zhmudskii and B. A. Ivanov 1999 *JETP* **88** 833
- [39] B. A. Ivanov and V. A. Stephanovich 1986 *Sov. Phys. JETP* **64** 376
- [40] B. A. Ivanov and V. A. Stephanovich 1989 *Phys. Rev. Lett.* **A141** 89

- [41] V. G. Bar'yakhtar and B. A. Ivanov 1993 *Sov. Sci. Rev. Sec. A* 16 3
- [42] R. H. Hobard 1963 *Proc. Phys. Soc.* 82 201
- [43] G. H. Derrick 1964 *J. Math. Phys.* 5 1252
- [44] B. A. Ivanov 1992 *JETP Lett.* 56 118
- [45] N. Papanicolaou and W. J. Zakrzewski 1995 *Physica D* 80 225
- [46] H. Walliser and G. Holzwarth 2000 *Phys. Rev. B* 4 2819
- [47] R. E. Prange and S. M. Girvin 1990 in *The quantum Hall effect* (New York: Springer)
- [48] G. M. Wysin 1994 *Phys. Rev. B* 49 8780
- [49] B. A. Ivanov, C. E. Zaspel and I. A. Yastremsky 2001 *Phys. Rev. B* 63 134413
- [50] B. A. Ivanov, H. J. Schnitzer, F. G. Mertens and G. M. Wysin 1998 *Phys. Rev. B* 58 8464
- [51] Private Diskussion mit D. D. Sheka und B. A. Ivanov
- [52] A. Neuper 1991, Dissertation *Quasikontinuumsnäherung und Iterationsverfahren für Envelope-Solitonen auf monoatomaren Ketten*
- [53] N. R. Cooper 1998 *Phys. Rev. Lett.* 80 4554
- [54] R. H. Landau and M. J. P'aez 1997 *Computational Physics* (New York: John Wiley & Sons)
- [55] W. Gropp, E. Lusk, A. Skjellum 1994 *Using MPI* (Cambridge: The MIT Press)
- [56] Mathematica, Version 5.0 (Wolfram 2004)

Danksagung

Herrn Prof. Dr. Franz G. Mertens danke ich für seine hohe Diskussionsbereitschaft, Zeit und meiner Arbeit entgegengebrachtem Interesse. Herrn Dr. M. Meister und Herrn Dr. D. D. Sheka danke ich für die fruchtbare Zusammenarbeit, aus der jeweils eine Veröffentlichung hervorgegangen ist.

Herrn Stefan Karpitschka danke ich für seine Unterstützung bei der Parallelisierung meines Programmes.

Weiterhin danke ich Herrn Edgar Martin, Herrn Christian Brunhuber und meiner Freundin Christina Oesterhelt für das Probelesen meiner Dissertation.