



Faculteit Wetenschappen
Vakgroep Vastestofwetenschappen
Voorzitter: Prof. Dr. F. CALLENS

Gefrustreerde magnetische systemen als basis voor artificiële neurale netwerken

door

Pieter GYPENS

Promotor: Prof. Dr. B. VAN WAEYENBERGE

Scriptiebegeleider: Dr. J. LELIAERT

Scriptie ingediend tot het behalen van de academische graad van
MASTER IN DE FYSICA EN DE STERRENKUNDE

Academiejaar 2015–2016

Dankwoord

Uiteraard gaat mijn oprechte dank uit naar mijn promotor Bartel Van Waeyenberge en mijn begeleider Jonathan Leliaert. Ik heb het enorm gewaardeerd hoe jullie mij het afgelopen jaar hebben bijgestaan bij het maken van deze masterscriptie. Jullie beantwoordden mijn vragen, gaven nuttige feedback en stimuleerden me om net dat tikkeltje extra uit me te halen. Bedankt hiervoor.

Verder zijn er heel wat mensen die me onbewust geholpen of gesteund hebben. Ook hen wil ik bedanken. Een bijzondere vermelding gaat naar mijn ouders en mijn broer. Ouders, bedankt voor al jullie inspanningen waardoor deze thesis mijn enige bekommernis was. Broer, je hebt me gemotiveerd om me vanaf dag 1 volop in te zetten.

Tot slot bedank ik de ontwerpers van alle gebruikte software (Go, LaTeX, gnuplot ...) en iedereen die vragen over deze software online beantwoordt. Deze heldere antwoorden hebben me enorm geholpen.

Pieter Gypens, juni 2016

Toelating tot bruikleen

“De auteur geeft de toelating deze scriptie voor consultatie beschikbaar te stellen en delen van de scriptie te kopiëren voor persoonlijk gebruik.

Elk ander gebruik valt onder de beperkingen van het auteursrecht, in het bijzonder met betrekking tot de verplichting de bron uitdrukkelijk te vermelden bij het aanhalen van resultaten uit deze scriptie.”

Pieter Gypens, juni 2016

Voorwoord

Traditionele computers zijn geprogrammeerd volgens strikte algoritmes en zijn hierdoor niet geschikt om bijvoorbeeld patronen of gezichten te herkennen. Nochtans hebben wij in het dagelijkse leven geen moeite bij het uitvoeren van zulke taken. Dit inspireerde wetenschappers dan ook om de werking van onze hersenen na te bootsen via zogenaamde artificiële neurale netwerken. In deze masterscriptie onderzoeken we numeriek of gefrustreerde magnetische systemen kunnen gebruikt worden om deze artificiële neurale netwerken (ANN) te maken.

In Hoofdstuk 1 bespreken we de fundamentele concepten van een ANN. We leggen ook het verband met magnetische systemen die bestaan uit een aantal gekoppelde macrospins met een afmeting van enkele nanometer. Aangezien dit verband het uitgangspunt van dit onderzoek is, is het van belang om de theorie achter zulke magnetische systemen te begrijpen. De theorie en de gebruikte methodes worden daarom toegelicht in respectievelijk Sectie 1.3 en Sectie 1.4.

In Hoofdstuk 2 buigen we ons over de vraag hoe we magnetische systemen op een fysisch correcte en numeriek efficiënte manier kunnen modelleren. We bespreken de implementatie van de theorie en van de methodes in Sectie 2.1. Deze implementatie wordt vervolgens getest. Eerst worden niet-interagerende systemen behandeld (Sectie 2.3), daarna komen de interagerende systemen aan bod waarbij er specifiek naar *aging*-effecten gekeken zal worden (Sectie 2.4) en tot slot wordt de thermodynamica besproken (Sectie 2.5). In deze laatste sectie van dit hoofdstuk worden de resultaten gebruikt om een theoretisch model op te stellen dat voorspelt hoe vaak het magnetisch moment $\mathbf{m}$ van macrospin van oriëntatie verandert.

In Hoofdstuk 3 besteden we aandacht aan de manier waarop magnetische netwerken gebruikt kunnen worden als binaire logische componenten. Deze componenten kunnen immers beschouwd worden als een eerste stap richting een artificieel neurale netwerk. Verschillende onderzoeksgroepen hebben reeds gewerkt rond deterministische logica (Sectie 3.1). Omdat de werking van deze logica enkele nadelen heeft, zullen wij proberen een nieuw type logica te ontwikkelen. Onze logica is stochastisch in plaats van deterministisch. In een eerste poging is de logica thermodynamisch gedreven (Sectie 3.2). De bijhorende tekortkomingen zullen we verhelpen bij de ontwikkeling van een tweede methode. De werking daarvan is gebaseerd op *simulated annealing* (Sectie 3.3).

In Hoofdstuk 4 geven we tot slot een overzicht van de behaalde resultaten en bespreken we waar er nog vooruitgang geboekt kan worden en welke uitdagingen er nog zijn.

Inhoudsopgave

Dankwoord	ii
Toelating tot bruikleen	iii
Voorwoord	iv
Inhoudsopgave	vi
1 Inleiding, theorie en methodes	1
1.1 Artificiële neurale netwerken (ANN)	1
1.2 Verband tussen magnetische netwerken en ANN's	5
1.3 Theorie: energiebijdrages	8
1.4 Methodes: energiebarrière	10
2 Implementatie en validatie	15
2.1 Implementatie	15
2.2 Simulatieconstanten	18
2.3 Niet-interagerende systemen	18
2.4 Dynamica van interagerende systemen: <i>aging</i>	25
2.5 Thermodynamica: aantal ompolingen per macrospin	36
3 Magnetische logica	49
3.1 Deterministische logica	49
3.2 Thermodynamisch gedreven logica	54
3.3 Logica via simulated annealing	68
4 Conclusies en outlook	75
Bibliografie	79

Hoofdstuk 1

Inleiding, theorie en methodes

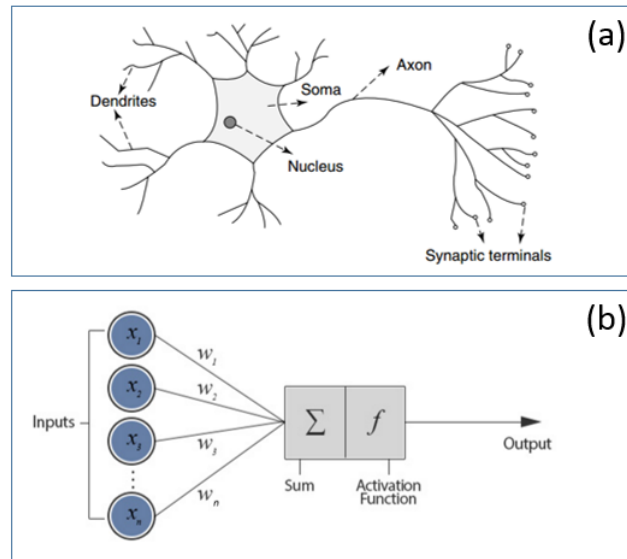
In dit hoofdstuk geven we een inleiding over artificiële neurale netwerken (Sectie 1.1) en leggen we het verband met magnetische netwerken die bestaan uit een aantal gekoppelde macrospins (Sectie 1.2). Vervolgens bespreken we de theorie achter magnetische netwerken: welke energitermen spelen een rol? (Sectie 1.3). Tot slot vergelijken we twee methodes die gebruikt kunnen worden om de dynamica van de macrospins te beschrijven (Sectie 1.4).

1.1 Artificiële neurale netwerken (ANN)

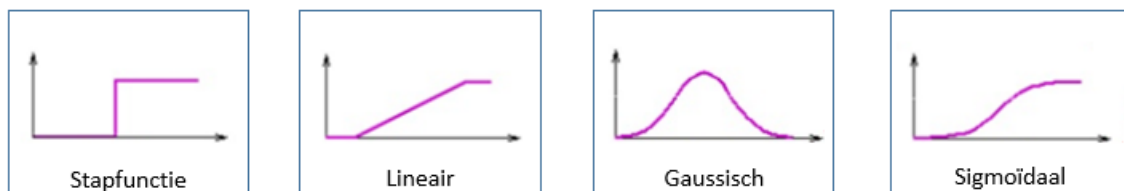
1.1.1 McCulloch-Pitts model

McCulloch en Pitts [1] bedachten een model voor een artificieel neuron (Figuur 1.1(b)), ook wel *perceptron* of *unit* genoemd, dat sterke gelijkenissen vertoont met een echt neuron (Figuur 1.1(a)). Een neuron krijgt zijn input via dendrieten. De input wordt vervolgens gesommeerd in de soma en activeert het neuron als een grenswaarde overschreden wordt. In dat geval vuurt het neuron een elektrische puls doorheen het axon naar de synapsen, die in contact staan met een volgend neuron. De sterkte van die verbinding kan doorheen de tijd veranderen en bepaalt bijvoorbeeld hoe makkelijk men zich iets herinnert.

In het McCulloch-Pitts model worden de axonen en dendrieten vervangen door connecties en vervullen de gewichtsfactoren w de rol van de synapsen. De input Σ is nu een gewogen som: $\Sigma = w_1x_1 + w_2x_2 + \dots + w_nx_n$. De gewichtsfactor w_i kan zowel een versterkend als een dempend effect hebben. De output van het *perceptron* wordt gegeven door $f(\Sigma)$. De activatiefunctie f is in het model van McCulloch en Pitts een stapfunctie (naar analogie met een echt neuron) maar tegenwoordig worden ook andere vormen gebruikt (Figuur 1.2) waarvan de sigmoïdale vorm $f(\Sigma) = 1/(1 + \exp(-\Sigma))$ omwille van zijn *smoothness* en asymptoten de meest courante is [2].



Figuur 1.1: McCulloch-Pitts model. Het artificieel neuron (b) vertoont sterke gelijkenissen met een echt neuron (a). Figuur (a) werd overgenomen uit [5].



Figuur 1.2: Vier activatiefuncties.

1.1.2 Architecturen

De connecties tussen de verschillende *units* vormen samen een complexe structuur. De manier waarop de *units* met elkaar verbonden zijn, bepaalt de architectuur van dit artificieel neurale netwerk (ANN). Er zijn diverse architecturen mogelijk (Figuur 1.3).

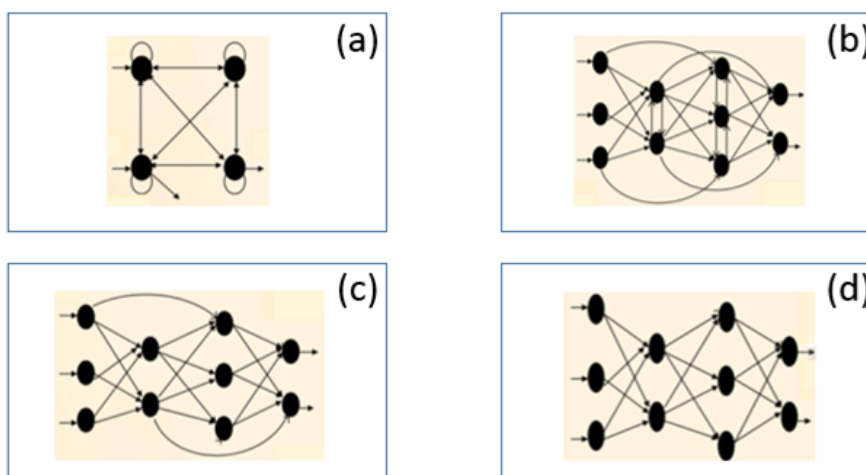
De eenvoudigste architectuur is het *single-layer*-netwerk, dat in feite niets anders is dan het *perceptron* van het McCulloch-Pitts model. Minsky en Papert [3] hebben echter aangetoond dat deze structuur een beperking heeft: een *single-layer perceptron* kan met een monotone activatiefunctie enkel lineair separabele¹ patronen onderscheiden [2]. Daarom is een typisch

¹Lineair separabel betekent dat er in een D-dimensionale ruimte minstens één (D-1)-dimensionaal hypervlak bestaat zodat alle objecten met eigenschap A zich langs de ene kant van het hypervlak bevinden en alle objecten met eigenschap B zich aan de andere kant bevinden.

ANN een *multi-layer*-netwerk met een input-laag, een output-laag en daartussen één of meerdere verborgen lagen. De gewichtsfactor w_{ij} bepaalt in welke mate de uitkomst van een *unit* in laag i wordt doorgegeven aan een *unit* in laag j . In Tabel 1.1 en in Figuur 1.3 staat een overzicht van enkele (*multi-layer*-)netwerken.

Tabel 1.1: Overzicht van enkele (*multi-layer*-)netwerken.

Naam	Uitleg	w_{ij}	Figuur 1.3
<i>Fully connected</i>	Alle <i>units</i> zijn verbonden	/	(a)
Gelaagd	Geen informatie van volgende lagen	$j \geq i$	(b)
Acyclisch	Enkel informatie van vorige lagen	$j > i$	(c)
<i>Feed-forward</i>	Enkel informatie van de vorige laag	$j = i + 1$	(d)



Figuur 1.3: Overzicht van enkele (*multi-layer*-)netwerken: *fully connected* (a), *gelaagd* (b), *acyclisch* (c) en *feed-forward* (d).

1.1.3 Leren

Een kenmerkende eigenschap van ANN's is dat ze in staat zijn om te leren. In een biologische context betekent leren dat ervaring of training (Sectie 1.1.4) helpt om een bepaalde taak steeds beter uit te voeren. Dit leerproces komt bij een ANN neer op het aanpassen van de gewichtsfactoren w totdat de optimale set gevonden is. Om een leerproces op te stellen moet men weten welke informatie men voor handen heeft (leerparadigma), hoe men de gewichtsfactoren w gaat updaten (leerregel) en hoe men deze leerregel gaat implementeren (leeralgoritme). Het leerparadigma, de leerregel en het leeralgoritme bepalen samen met de architectuur van het netwerk welke taken uitgevoerd kunnen worden door een ANN [2].

Leerparadigma

Er bestaan drie leerparadigma's:

1. Bij *supervised learning* beschikt men over een aantal voorbeelden waarvan men zowel de input als de gewenste output kent. Bij de optimale gewichtsfactoren w benaderen de reële en de gewenste output elkaar het best. Een variant op dit leerparadigma is *reinforcement learning* waarbij het netwerk wel een indicatie krijgt over hoe goed de output was, maar de gewenste output zelf niet kent.
2. Bij *unsupervised learning* heeft men enkel een set van inputs. Het is aan het netwerk om onderliggende verbanden en correlaties in deze data te ontdekken om zo patronen te herkennen en in categorieën in te delen.
3. *Hybrid learning* is een combinatie van bovenstaande leerparadigma's: een deel van de gewichtsfactoren wordt aangepast via *supervised learning*, een ander deel via *unsupervised learning*.

Leerregel

Er bestaan vier leerregels:

1. Bij *error correction* gebeurt het aanpassen van de gewichtsfactoren w op basis van de fout tussen de reële en de gewenste output.
2. Bij *Boltzmann learning* worden de gewichtsfactoren w gewijzigd zodat de zichtbare *units*, dit zijn de *units* die interageren met de omgeving, voldoen aan de gewenste probabiliteitsdistributie. Deze leerregel wordt toegepast op Boltzmann-machines, feedback-netwerken met binaire *units* en met symmetrische gewichtsfactoren ($w_{ij} = w_{ji}$) waarbij de output van iedere *unit* gebaseerd is op een Boltzmann-distributie.
3. De oudste leerregel is *Hebbian learning*, opgesteld door Hebb [4] en geïnspireerd op de werking van een neurale netwerk. De gewichtsfactor w_{ij} wordt vergroot wanneer *unit j* geactiveerd wordt door het vuren van *unit i*. Aangezien er telkens maar twee *units* betrokken zijn bij het updaten van w , zegt men dat het leren lokaal gebeurt.
4. *Competitive learning* werkt volgens het *winner-take-all*-principe, waarbij slechts één output-*unit* zal vuren (de winnaar). Enkel de gewichtsfactor van deze winnaar zal worden aangepast.

Leeralgoritme

De implementatie van de leerregel is afhankelijk van de architectuur van het netwerk. We geven twee voorbeelden die vallen binnen het kader van *supervised learning* met *error correction* als leerregel:

1. De *perceptron rule* kan gebruikt worden voor het eenvoudige *single-layer*-netwerk (Figuur 1.1(b)). De gewichtsfactoren w worden aangepast via $\Delta w_i = \eta E x_i$, waarbij E het verschil is tussen de gewenste en de reële output en η het leertempo. De waarde van η moet goed gekozen worden [5]: met een te kleine η gaat het leerproces (te) langzaam, met een te grote η kunnen de optimale gewichtsfactoren w gemist worden tijdens het leren.
2. *Back-propagation* is een leeralgoritme voor *multi-layer feed-forward*-netwerken (Figuur 1.3(d)), dat gepopulariseerd werd door Rumelhart en McClelland [6]. Het algoritme werkt via *gradient descent* waardoor de initiële keuze van w van groot belang is [5]: $\Delta w_i = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_{i,\text{vorig}}}$. E is het gekwadrateerde verschil tussen de gewenste en de reële output. Het updaten van w gebeurt laag per laag, waarbij er begonnen wordt met de laatste laag van het netwerk. Dit verklaart de naam van het leeralgoritme.

1.1.4 Trainen

Van zodra het leerproces is opgesteld, kan men beginnen met het trainen van het netwerk [5]. De trainingset bestaat uit een aantal voorbeelden die alle karakteristieken van het probleem bevatten. Hoe complexer het probleem, hoe groter de trainingset. Men kan aan de trainingset ook voorbeelden met ruis toevoegen om het netwerk vertrouwd te maken met echte data. Op die manier krijgt men een robuust en betrouwbaar netwerk.

Trainen kan in de *online-mode* of in de *batch-mode*. In de *online-mode* worden de gewichtsfactoren na ieder voorbeeld aangepast, in de *batch-mode* worden ze pas aangepast na één *epoch*, met andere woorden nadat alle voorbeelden overlopen zijn. De aanpassing gebeurt dan op basis van een soort gemiddelde.

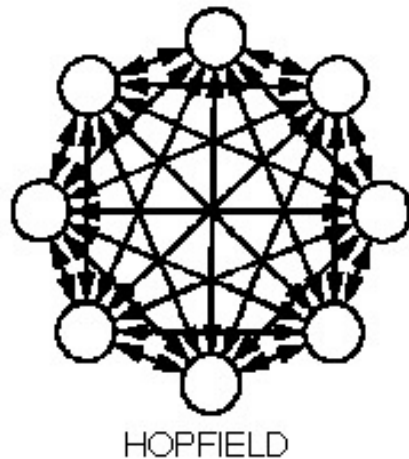
De training stopt wanneer een vooropgesteld aantal *epochs* gerealiseerd is of wanneer de fout kleiner is dan een bepaalde grens. Te weinig trainen leidt tot een onvoorspelbaar en onbetrouwbaar netwerk. Bij overmatig trainen treedt dan weer gewenning op: het netwerk is té vertrouwd met de voorbeelden van de trainingset waardoor het faalt bij nieuwe voorbeelden.

1.2 Verband tussen magnetische netwerken en ANN's

In dit werk onderzoeken we via simulaties twee- en driedimensionale magnetische netwerken die bestaan uit N interagerende macrospins. Met macrospins worden ellipsoïdale nanodeeltjes bedoeld waarvan de lengte van één hoofdas groot is in vergelijking met de lengte van de andere twee hoofdassen. Op die manier wordt een anisotropie-richting $\mathbf{u}$ gedefinieerd; in het Engels gebruikt men de term *easy axis*. Deze as, die voor elke macrospin een verschillende oriëntatie kan hebben, speelt een cruciale rol bij het beschrijven van de magnetische systemen

die we bestuderen. Zo zal er verondersteld worden dat het magnetisch moment $\mathbf{m}$ van iedere macrospin (bij benadering) volgens zijn anisotropie-richting ligt. Een macrospin kan zich met andere woorden in twee toestanden bevinden: $\mathbf{m}$ volgens de zin van $\mathbf{u}$, of $\mathbf{m}$ tegengesteld aan de zin van $\mathbf{u}$. Op die manier kan men een macrospin i beschouwen als een binaire *unit* x_i van een ANN.

In een magnetisch netwerk interageert iedere macrospin i met elke andere macrospin $j \neq i$. Bovendien is de interactie tussen macrospin i en j symmetrisch. De interacties zijn het analogon van de gewichtsfactoren w . Een ANN moet met andere woorden volgende gewichtsfactoren hebben: $w_{ij} = w_{ji}$ en $w_{ii} = 0$. Een architectuur die aan deze voorwaarde voldoet is het Hopfield-netwerk [7] met binaire *units*² ($x_i = \pm 1$) (Figuur 1.4).



Figuur 1.4: Hopfield-netwerk met binaire *units*.

De twee mogelijke toestanden van een macrospin komen overeen met de twee niet-equivalente minima in het energielandschap van dat deeltje, gescheiden door een energiebarrière ΔE . Een macrospinsysteem evolueert naar een configuratie waarbij ook de totale energie van het systeem zich in een minimum bevindt: onder invloed van alle andere macrospins en van een eventueel extern aangelegd veld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$, zullen de macrospins ompolen van de ene naar de andere toestand. De ompoelfrequentie f_i van iedere macrospin i wordt gegeven door [8]

$$f_i = f_0 \exp\left(\frac{-\Delta E_i}{k_B T}\right), \quad (1.1)$$

²De *units* van het Hopfield-netwerk kunnen ook continu zijn ($0 \leq x_i \leq 1$).

waarin f_0 de *attempt frequency*³ is (er zal steeds gewerkt worden met $f_0 = 10^8$ Hz), k_B de Boltzmann-constante ($1,3806 \cdot 10^{-23}$ J/K), T de temperatuur en ΔE_i de energiebarrière⁴ die i moet overwinnen om van toestand 1 naar toestand 2 te gaan. De ompoolfrequentie f zal in onze implementatie gebruikt worden om te bepalen welk deeltje i zal ompolen en na hoeveel tijd (zie Sectie 2.1.2). Dit is een stochastisch proces waarbij er nooit meer dan één macrospin op hetzelfde moment zal ompolen. In de context van een ANN komt dit neer op asynchroon updaten wat betekent dat nooit meer dan één *unit* op hetzelfde moment van waarde zal veranderen.

Net als bij een magnetsich netwerk is de drijvende kracht achter de dynamica van een Hopfield-netwerk het minimaliseren van een energiefunctie. Tijdens het (asynchroon) update-proces gaat de energiefunctie

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j w_{ij} x_i x_j \quad (1.2)$$

naar een minimum of attractor. Door de factor $\frac{1}{2}$ wordt de interactie tussen i en j slechts één keer in rekening gebracht. Wanneer men in deze attractoren patronen opslaat, kan het netwerk dienen als associatief geheugen [2]. Het aantal minima van E bepaalt hoeveel patronen opgeslagen kunnen worden in dit associatief geheugen. Aangezien frustratie leidt tot de ontanding van de grondtoestand, zullen we ons in dit werk voornamelijk toeleggen op gefrustreerde magnetische systemen.

Samenvatting

In Tabel 1.2 worden de verbanden tussen een magnetisch netwerk en een ANN opgelijst. Magnetische netwerken, en meer bepaald de bepaling van de energiebarrière ΔE uit Formule (1.1), worden in de volgende secties besproken.

Tabel 1.2: Overzicht van het verband tussen een magnetisch netwerk en een ANN.

Magnetisch netwerk	Hopfield-netwerk
Macrospin	Binaire <i>unit</i>
Interacties	Gewichtsfactoren
Stochastisch ompolen	Asynchroon updaten

³De *attempt frequency* f_0 is de frequentie waarmee een macrospin probeert om te polen. Gedurende een simulatie wordt deze vaak constant gehouden.

⁴In Sectie 1.3 geven we een overzicht van de energiebijdrages die in rekening moeten worden gebracht om ΔE te bepalen. In Sectie 1.4 bespreken we vervolgens twee methodes om de energiebarrière effectief uit te rekenen.

1.3 Theorie: energiebijdrages

De energie van een macrospin met magnetisch moment $\mathbf{m}$ wordt bepaald door de som van drie energiecontributies:

1. De anisotropie-energie E_{anis} die de relatieve oriëntatie van $\mathbf{m}$ ten opzichte van de voorkeursrichting $\mathbf{u}$ beschrijft. $\mathbf{u}$ wordt bepaald door de vorm van het deeltje of door het kristalrooster van het materiaal.
2. De Zeeman-energie E_{ext} die de invloed van een extern magneetveld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ op $\mathbf{m}$ beschrijft.
3. De dipool-energie E_{dip} die de invloed van het dipool-veld $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ op $\mathbf{m}$ beschrijft. $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ vindt zijn oorsprong in de interacties tussen de macrospins onderling.

1.3.1 Anisotropie-energie

De eerste - en in ons model grootste - energiebijdrage is de uniaxiale anisotropie-energie E_{anis} , die berekend wordt via [8]

$$E_{\text{anis}} = K_{u1}V[1 - (\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{u})^2]. \quad (1.3)$$

Hierin is K_{u1} de anisotropie-constante, V het volume van een deeltje (in onze simulaties is $K_{u1} = 10\,000 \text{ J/m}^3$ en $V = 1000 \text{ nm}^3$), $\mathbf{e}_m$ de zin van het magnetisch moment en $\mathbf{u}$ de anisotropie-richting. De laagste anisotropie-energie verkrijgt men dus in de situatie waarbij $\mathbf{m}$ evenwijdig is aan de *easy axis* $\mathbf{u}$; de maxima ($E_{\text{anis}} = K_{u1}V$) bevinden zich loodrecht op deze as. Deze richtingen worden de *hard axes* genoemd.

De anisotropie-richting $\mathbf{u}$ wordt bepaald door het kristalrooster van het materiaal (materiaal-anisotropie) of door de vorm van het deeltje (vorm-anisotropie).

Materiaal-anisotropie

De microscopische interactie die verantwoordelijk is voor materiaal-anisotropie is de *spin-orbit*-koppeling. Uniaxiale materiaal-anisotropie wordt veroorzaakt door een hexagonaal rooster: de *easy axis* is evenwijdig aan de c-as van het kristal. De energie $E_{\text{anis}}^{\text{mat}}$ is gelijk aan

$$E_{\text{anis}}^{\text{mat}} = K_{u1}V\sin^2\delta + K_{u2}V\sin^4\delta + \dots,$$

waarbij δ de hoek is tussen $\mathbf{e}_m$ en $\mathbf{u}$. De hogere-ordeterminen zijn verwaarloosbaar in vergelijking met de K_{u1} -term, zodat we Formule (1.3) terugvinden.

Vorm-anisotropie

De dieperliggende oorsprong van vorm-anisotropie ligt in de lange dracht dipool-koppelingen tussen de magnetische momenten binnenin een deeltje. In feite zijn de deeltjes reeds een uitmiddeling van magnetische momenten die zich binnen een volume V bevinden en samen een magnetisch moment $\mathbf{m}$ veroorzaken met grootte $M_{\text{sat}}V$ en zin volgens $\mathbf{e}_{\mathbf{m}}$. Uniaxiale vorm-anisotropie komt voor bij ellopsoïdale deeltjes met één dominante hoofdas (uniaxiaal). In dat geval is de energetisch meest voordelige configuratie die waarbij $\mathbf{e}_{\mathbf{m}}$ volgens de dominante hoofdas ligt omdat de demagnetiserende velden dan het kleinst zijn. Ligt de dominante hoofdas volgens de z-as, dan is de energie $E_{\text{anis}}^{\text{vorm}}$ gelijk aan

$$E_{\text{anis}}^{\text{vorm}} = \frac{1}{2}\mu_0 M_{\text{sat}}^2 V (N_x \sin^2 \delta + N_z \cos^2 \delta),$$

waarbij N_z en $N_x = N_y$ de demagnetiserende factoren zijn. Stellen we $K_{u1} = \frac{1}{2}\mu_0 M_{\text{sat}}^2 (N_x - N_z)$ dan vinden we Formule (1.3) terug op een constante na $(\frac{1}{2}\mu_0 M_{\text{sat}}^2 V N_z)$.

Voor sferische deeltjes is $N_x = N_y = N_z = \frac{1}{3}$ [8]: de vorm-anisotropie is nul en $\mathbf{e}_{\mathbf{m}}$ heeft geen voorkeursrichting. Sferische deeltjes kunnen wel materiaal-anisotropie hebben.

1.3.2 Zeeman-energie

De tweede energieterm die men in rekening moet brengen, is de interactie tussen een macrospin met magnetisch moment $\mathbf{m}$ en een extern magneetveld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$. Deze energiebijdrage wordt de Zeeman-energie genoemd en zullen we noteren als E_{ext} :

$$E_{\text{ext}} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}} = -M_{\text{sat}}V(\mathbf{e}_{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{B}_{\text{ext}}), \quad (1.4)$$

waarin M_{sat} de saturatie-magnetisatie is (in onze simulaties is $M_{\text{sat}} = 400\,000$ A/m). Het magnetisch moment van het deeltje zal zich dus richten volgens de zin van het aangelegde veld dat zowel tijds- als plaatsafhankelijk kan zijn. Het totale B-veld dat deeltje i ondervindt is namelijk de som van het globale B_{glob} -veld (dat voor elk deeltje hetzelfde is) en het lokale B_{lok} -veld (dat voor elk deeltje anders kan zijn): $\mathbf{B}_{\text{ext},i} = \mathbf{B}_{\text{glob}} + \mathbf{B}_{\text{lok},i}$.

1.3.3 Dipool-energie

De derde energiecontributie resulteert uit de dipool-dipool-interacties tussen de verschillende macrospins. Een deeltje i ondervindt een dipool-veld $\mathbf{B}_{\text{dip},i}$ dat veroorzaakt wordt door de $N-1$ andere deeltjes j [8]:

$$\mathbf{B}_{\text{dip},i} = \mu_0 M_{\text{sat}} V \sum_{j \neq i}^{N-1} \left[3 \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{m}j} \cdot \mathbf{r}_{ij}) \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^5} - \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{m}j}}{r_{ij}^3} \right], \quad (1.5)$$

waarin μ_0 de vacuümpermeabiliteit is ($4\pi \cdot 10^{-7}$ Tm/A) en $\mathbf{r}_{ij}$ de plaatsvector tussen deeltje i en deeltje j .

De dipool-energie E_{dip} bekomt men via

$$E_{\text{dip}} = -M_{\text{sat}} V(\mathbf{e}_{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{B}_{\text{dip}}). \quad (1.6)$$

1.4 Methodes: energiebarrière

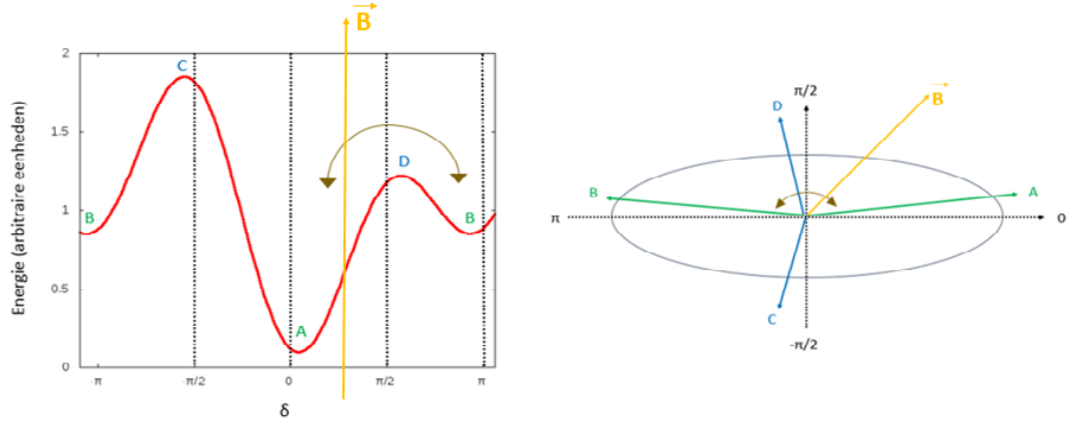
Om te bepalen welk deeltje zal ompolen is het nodig om de energiebarrière ΔE_i , die overwonnen moet worden voor $\mathbf{e}_{\mathbf{m}i} \rightarrow -\mathbf{e}_{\mathbf{m}i}$, te kennen. Een macrospin kan dit via diverse paden doen. Het pad dat gevolgd zal worden is in onze benadering steeds het makkelijkste pad waarvoor ΔE minimaal is. Een ander pad met een grotere ΔE is door de lagere ompoolfrequentie (Formule (1.1)) namelijk minder waarschijnlijk. We besluiten dat ΔE_i het energieverval is tussen E_{min} (dit is de energie van de (oude) toestand waarin i zich bevindt) en die E_{max} (die zich ergens tussen de oude en de nieuwe toestand bevindt) waarvoor ΔE_i minimaal is. Dit wordt geschetst in Figuur 1.5: een deeltje zal van A naar B gaan via het pad ADB (en omgekeerd).

A priori is het niet duidelijk waar E_{min} en E_{max} exact liggen. Aangezien er in ons model steeds gewerkt wordt met E_{anis} als belangrijkste energiebijdrage (door de gemaakte keuze van K_{u1} en V), kan men in eerste benadering stellen dat:

1. E_{min} ligt bij $\mathbf{m}$ evenwijdig aan $\mathbf{u}$, m.a.w. volgens de *easy axis*.
2. E_{max} ligt bij $\mathbf{m}$ loodrecht op $\mathbf{u}$, m.a.w. volgens een *hard axis*.

Deze methode noemen we in het vervolg de benaderingsmethode.

Figuur 1.5 toont het ééndimensionaal energielandschap van een deeltje waarop een extern magnetisch veld inwerkt met grootte $B = 0,125$ T en een hoek $\theta = \widehat{\mathbf{uB}} = 40^\circ$ maakt met de anisotropie-richting $\mathbf{u}$. Hieruit leert men dat de aannames van de benaderingsmethode niet helemaal correct zijn. Zo ligt $E_{\text{min},A}$ bijvoorbeeld bij $\delta = \widehat{\mathbf{um}} \neq 0$. Het eenvoudige beeld van de benaderingsmethode moet dus enigszins bijgesteld worden.



Figuur 1.5: Ééndimensionaal energielandschap voor $\theta = \widehat{\mathbf{uB}} = 40^\circ$. Een spin in toestand A zal naar toestand B gaan via het pad ADB (en omgekeerd). De extrema (A,B,C en D) wijken lichtjes af van wat de aannames van de benaderingsmethode voorspellen (stippellijn).

Om de minimale energie te verkrijgen zal $\mathbf{m}$ door de invloed van een extern veld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ namelijk wat afwijken van de richting van de *easy axis*: $\mathbf{m}$ richt zich wat naar het extern veld toe. Hoe sterker het veld, hoe groter deze afwijking. Voor $0 < \theta < \pi$ ligt $E_{\min}$ dus bij $\delta > 0$ of bij $\delta < \pi$ (zie Figuur 1.5), voor $\pi < \theta < 2\pi$ ligt $E_{\min}$ dus bij $\delta < 0$ of bij $\delta > \pi$. Wegens de symmetrie van het probleem hoeven we enkel naar de eerste situatie te kijken. De overgang van het ene naar het andere minimum verloopt bovendien zodanig dat $\mathbf{m}$ kortstondig evenwijdig is aan $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ omdat via dit pad de energiebarrière het kleinst zal zijn. In Figuur 1.5 is $E_{\max,D}$ dus het relevante maximum.

De maximale energie verkrijgt men in de situatie waarbij $\mathbf{m}$ wat afwijkt van de richting van een *hard axis*: $\mathbf{m}$ richt zich wat weg van het extern veld. Voor $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ ligt $E_{\max}$ bij $\delta > \frac{\pi}{2}$ (zie Figuur 1.5), voor $\frac{\pi}{2} < \theta < \pi$ ligt $E_{\max}$ bij $\delta < \frac{\pi}{2}$.

Indien deze verschuivingen van $E_{\min}$ en $E_{\max}$ niet in rekening worden gebracht, zal ΔE foutief worden berekend. De grootte van deze fout zal later onderzocht worden. Daarom gebruiken we een andere methode voor het bepalen van $E_{\min}$ en $E_{\max}$:

De energie-extrema $E_{\min}$ en $E_{\max}$ worden expliciet gezocht.

Deze methode noemen we in het vervolg de expliciete methode.

De ompoling van een deeltje i zal gebeuren in het vlak gevormd door $\mathbf{u}_i$ en $\mathbf{B}_{\text{eff},i}$ zodat het beeld van een ééndimensionaal energielandschap behouden blijft. Met de reeds gebruikte notatie $\theta = \widehat{\mathbf{u}\mathbf{B}}$ en $\delta = \widehat{\mathbf{u}\mathbf{m}}$ (zie Figuur 1.6) wordt de totale energie E van een deeltje gegeven door

$$E = K_{u1}V\sin^2\delta - M_{\text{sat}}VB_{\text{eff}}\cos(\theta - \delta). \quad (1.7)$$

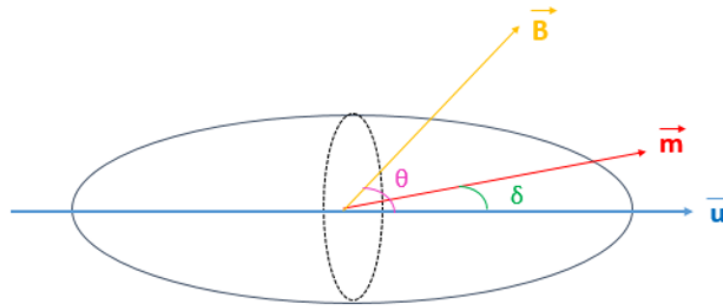
De eerste term van Vergelijking (1.7) is de anisotropie-energie E_{anis} , de tweede term is de energie van $\mathbf{m}$ in een effectief veld. $\mathbf{B}_{\text{eff}}$ (het subscript eff zal in het vervolg niet meer geschreven worden) is de som van het externe veld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ en het dipool-veld $\mathbf{B}_{\text{dip}}$. Formule (1.7) kan herschreven worden als

$$\frac{E}{K_{u1}V} = \sin^2\delta - \frac{M_{\text{sat}}B}{K_{u1}}\cos(\theta - \delta) = f(\delta). \quad (1.8)$$

De drie extrema (A, B en D uit Figuur 1.5) die nodig zijn voor de berekening van de energiebarrières voldoen aan $f'(\delta) = 0$. Via een iteratieve methode (zie Sectie 2.1.4) kan men hieruit (voor verschillende combinaties van θ en $\frac{M_{\text{sat}}B}{K_{u1}}$) δ_A , δ_B en δ_D bepalen en op die manier de energiebarrières berekenen:

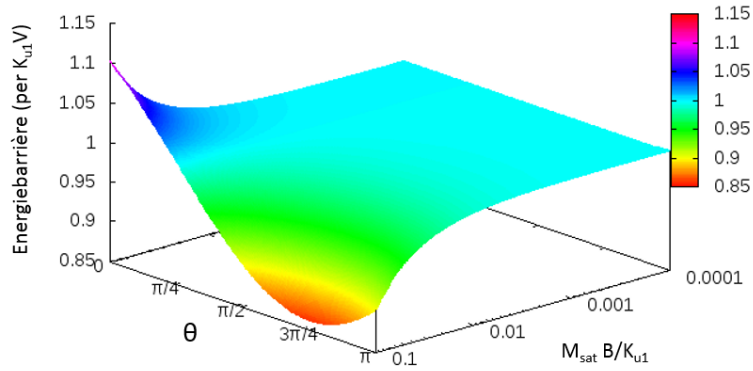
$$\Delta E_{A \rightarrow B} = K_{u1}V[f(\delta_D) - f(\delta_A)], \quad (1.9)$$

$$\Delta E_{B \rightarrow A} = K_{u1}V[f(\delta_D) - f(\delta_B)]. \quad (1.10)$$



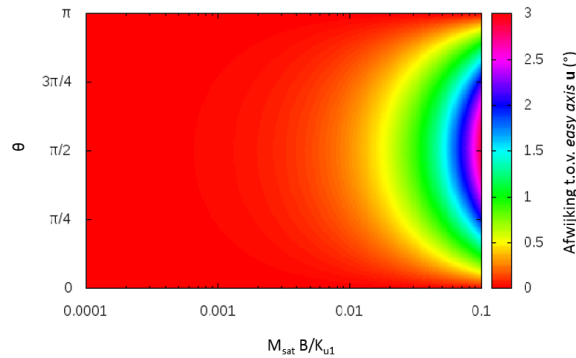
Figuur 1.6: Schematische voorstelling van een (ellipsoïdale) macrospin. $\delta = \widehat{\mathbf{u}\mathbf{m}}$ is de hoek tussen de anisotropie-as $\mathbf{u}$ en het magnetisch moment $\mathbf{m}$ van de macrospin. $\theta = \widehat{\mathbf{u}\mathbf{B}}$ is de hoek tussen de anisotropie-as $\mathbf{u}$ en het magneetveld $\mathbf{B}$ dat inwerkt op de macrospin.

De resultaten worden weergegeven in Figuur 1.7. In de limiet $B \rightarrow 0$ is E_{anis} de enige energiecontributie en zal de energiebarrière dus gelijk zijn aan $K_{u1}V$, of $\frac{\Delta E}{K_{u1}V} = 1$ (lichtblauw in Figuur 1.7). Wanneer $\mathbf{m}$ en $\mathbf{B}$ parallel liggen, dit is wanneer θ klein is, ondervindt het deeltje een grote energiebarrière: de macrospin bevindt zich in het absoluut E_{min} en moet naar een minder voordelige energieconfiguratie ompolen (Figuur 1.5, A $\rightarrow$ B). Andersom, wanneer $\mathbf{m}$ en $\mathbf{B}$ antiparallel liggen, dit is wanneer θ groot is, ondervindt het deeltje een kleine energiebarrière: de macrospin bevindt zich in een lokaal E_{min} en moet naar de meest voordelige energieconfiguratie ompolen (Figuur 1.5, B $\rightarrow$ A).



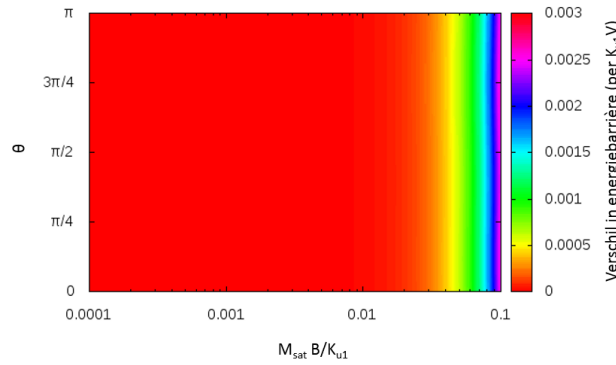
Figuur 1.7: Energiebarrière (per $K_{u1}V$) als functie van $\frac{M_{\text{sat}}B}{K_{u1}}$ en van de hoek θ tussen $\mathbf{u}$ en $\mathbf{B}$.

Volgens de benaderingsmethode is de energie minimaal als het magnetisch moment $\mathbf{m}$ van een macrospin evenwijdig is aan de anisotropie-as $\mathbf{u}$. Figuur 1.8 toont echter dat de minimale energie bekomen wordt als $\mathbf{m}$ afwijkt van deze as. De afwijking is, zoals reeds vermeld, groter bij een sterker extern veld: bij een extern veld van 25 mT bedraagt de afwijking maximaal 3 graden.



Figuur 1.8: Bij minimale energie wijkt het magnetisch moment $\mathbf{m}$ af ten opzichte van de *easy axis*. De afwijking wordt gegeven als functie van $\frac{M_{\text{sat}}B}{K_{u1}}$ en van de hoek θ tussen $\mathbf{u}$ en $\mathbf{B}$.

Tot slot vergelijken we de energiebarrières (per $K_{u1}V$) bekomen met de benaderingsmethode en met de expliciete methode (Figuur 1.9). Opnieuw blijkt hieruit het nut van de expliciete methode bij grotere externe velden. Hoewel de verschillen tussen beide methodes klein lijken (orde promilles), is het wegens de exponentiële afhankelijkheid van ΔE (Formule (1.1)) toch cruciaal om de energiebarrières zo accuraat mogelijk uit te rekenen. In de simulaties van de komende hoofdstukken zullen we daarom steeds de expliciete methode gebruiken om de energiebarrières uit te rekenen, tenzij anders vermeld.



Figuur 1.9: Verschil tussen de energiebarrières (per $K_{u1}V$) bekomen met de benaderingsmethode en met de expliciete methode als functie van $\frac{M_{\text{sat}} B}{K_{u1}}$ en van de hoek θ tussen $\mathbf{u}$ en $\mathbf{B}$.

Hoofdstuk 2

Implementatie en validatie

In dit hoofdstuk bespreken we in Sectie 2.1 de implementatie van de concepten uit het vorige hoofdstuk. Vervolgens gaan we de implementatie testen: in Sectie 2.3 behandelen we niet-interagerende systemen, in Sectie 2.4 onderzoeken we de dynamica van interagerende systemen waarbij we specifiek naar *aging* zullen kijken, en in Sectie 2.5 bestuderen we tot slot de thermodynamica van magnetische systemen.

2.1 Implementatie

2.1.1 (Willekeurige) anisotropie-richting

De anisotropie-richting $\mathbf{u}_i$ van elk deeltje i kan geïnitieerd worden volgens een specifieke of volgens een willekeurige oriëntatie. Om een willekeurige richting te genereren zijn er twee willekeurige getallen (p en q), uniform verdeeld in het interval $[0,1)$, nodig. Hiermee kunnen de twee (willekeurige) poolhoeken θ en ϕ bepaald worden [9]:

$$\theta = 2\pi p \tag{2.1}$$

$$\phi = 2\arcsin(\sqrt{q}). \tag{2.2}$$

Deze poolhoeken kunnen worden omgezet naar carthesische coördinaten via

$$u_x = \sin(\theta)\cos(\phi) \tag{2.3}$$

$$u_y = \sin(\theta)\sin(\phi) \tag{2.4}$$

$$u_z = \cos(\theta). \tag{2.5}$$

2.1.2 Stochastische ompoling

Op basis van de ompoolfrequentie f_i van een deeltje i (Formule (1.1)) kan een ompooltijd $t_{s,i}$ bepaald worden. Dit is de tijd waarna deeltje i zou ompolen. Anders gezegd, gedurende het tijdsinterval Δt_i ($[0, t_{s,i}]$) is deeltje i niet omgepoold. De kans P_{niet} hierop wordt gegeven door integratie van de evenwichtsvergelijking $\frac{dP_{\text{niet}}}{dt} = -fP_{\text{niet}}$ [11, 12], waarbij we het subscript i voor de eenvoud niet meer hebben geschreven:

$$\begin{aligned}\ln(P_{\text{niet}}) &= \int_0^{\Delta t} -f dt \\ \rightarrow P_{\text{niet}} &= \exp(-f\Delta t) \\ \rightarrow P &= 1 - \exp(-f\Delta t).\end{aligned}$$

We vinden dat

$$t_{s,i} = -\frac{1}{f_i} \ln(1 - P_i) = -\frac{1}{f_0} \exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right) \ln(1 - P_i), \quad (2.6)$$

waarbij P_i een willekeurig getal is uniform verdeeld in het interval $[0,1)$. Voor elke macrospin i zal deze $t_{s,i}$ bepaald worden. Enkel het deeltje met de kleinste $t_{s,i}$ zal ook daadwerkelijk omgepoold worden: $\mathbf{e}_{\mathbf{m}i} \rightarrow -\mathbf{e}_{\mathbf{m}i}$. Op die manier wordt een nieuw macrospinsysteem bekomen waarvoor men wederom alle $t_{s,i}$'s dient te bepalen. De dipool-energie E_{dip} van elke macrospin is immers veranderd (en dus ook ΔE_i) aangezien er één macrospin is omgepoold.

Deze procedure herhaalt zich totdat een vooropgesteld aantal ompolingen gerealiseerd is. Dit staat in rechtstreeks verband met de rekentijd en is voor ons de beperkende factor. Men kan ook opteren om de simulatie te stoppen wanneer de som van alle minimale t_s 'en een welbepaalde tijd t bereikt heeft. t is de tijd die men in een labo moet meten om hetzelfde macrospinsysteem (afmetingen, temperatuur, velden, aantal ompolingen ...) experimenteel te onderzoeken.

2.1.3 $\mathcal{O}(N)$ -benadering van het dipool-veld

We rekenen alleen bij de start van de simulatie $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ uit met Formule (1.5): voor alle N deeltjes zal de sommatie over de andere $N-1$ deeltjes expliciet worden doorgevoerd. We moeten $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ niet na elke ompoling helemaal opnieuw berekenen met dit tijdsintensieve $\mathcal{O}(N^2)$ -algoritme¹, indien we benaderen dat de ompoling van macrospin f betekent dat $\mathbf{e}_{\mathbf{m}f} \rightarrow -\mathbf{e}_{\mathbf{m}f}$ (het magnetisch moment ligt hetzij parallel hetzij antiparallel aan $\mathbf{u}$). Als macrospin f ompoold, zal $\mathbf{B}_{\text{dip},f}$ onveranderd blijven en zal $\mathbf{B}_{\text{dip},i \neq f}$ enkel wijzigen door de term $j = f$ in de sommatie van Formule (1.5). We kunnen dit samenvatten als (het subscript dip wordt voor de eenvoud niet meer geschreven):

¹Een $\mathcal{O}(N^2)$ -algoritme houdt in dat elke verdubbeling van het aantal deeltjes N zorgt voor een verviervoudiging van de rekentijd.

$$\mathbf{B}_f^{\text{nieuw}} = \mathbf{B}_f^{\text{oud}} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{B}_i^{\text{nieuw}} = \mathbf{B}_i^{\text{oud}} - \mathbf{B}_{if}^{\text{oud}} + \mathbf{B}_{if}^{\text{nieuw}} \quad (2.8)$$

met

$$\mathbf{B}_{if}^{\text{oud}} = \mu_0 M_{\text{sat}} V \left[3 \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{m}f} \cdot \mathbf{r}_{if}) \mathbf{r}_{if}}{r_{if}^5} - \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{m}f}}{r_{if}^3} \right] \quad (2.9)$$

$$\mathbf{B}_{if}^{\text{nieuw}} = \mu_0 M_{\text{sat}} V \left[3 \frac{(-\mathbf{e}_{\mathbf{m}f} \cdot \mathbf{r}_{if}) \mathbf{r}_{if}}{r_{if}^5} - \frac{-\mathbf{e}_{\mathbf{m}f}}{r_{if}^3} \right]. \quad (2.10)$$

Vergelijking (2.8) is door de gemaakte benadering ($\mathbf{e}_{\mathbf{m}f} \rightarrow -\mathbf{e}_{\mathbf{m}f}$) te herschrijven als $\mathbf{B}_i^{\text{nieuw}} = \mathbf{B}_i^{\text{oud}} - 2\mathbf{B}_{if}^{\text{oud}}$. Het updaten van $\mathbf{B}_{\text{dip},i}$ komt op die manier neer op het berekenen van $\mathbf{B}_{if}^{\text{oud}}$. Dit is een $\mathcal{O}(N)$ -algoritme.

Bovenstaande redenering geldt enkel door de benadering $\mathbf{e}_{\mathbf{m}} \rightarrow -\mathbf{e}_{\mathbf{m}}$: het magnetisch moment ligt hetzij parallel hetzij antiparallel aan $\mathbf{u}$. In Sectie 1.4 is er echter aangetoond dat deze configuraties niet overeenstemmen met een (lokaal) energiminimum. Het alternatief - na iedere ompoling $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ uitrekenen met de fysisch correcte $\mathbf{e}_{\mathbf{m}i}$'s - heeft een zodanig grote computationele meerkost dat dit niet opweegt tegen de (kleine) fout die we door deze benadering maken. Figuur 1.8 toont inderdaad dat de afwijking ten opzichte van de anisotropie-as klein is (maximaal 3°). Dit rechtvaardigt onze keuze om het dipool-veld $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ te benaderen met het $\mathcal{O}(N)$ -algoritme.

2.1.4 Iteratieve methode ter bepaling van de energie-extrema

In Sectie 1.4 werd Formule (1.8) afgeleid waarbij $\theta = \widehat{\mathbf{u}\mathbf{B}}$ en $\delta = \widehat{\mathbf{u}\mathbf{m}}$:

$$\frac{E}{K_{u1}V} = \sin^2\delta - \frac{M_{\text{sat}}B}{K_{u1}} \cos(\theta - \delta) = f(\delta). \quad (2.11)$$

De drie extrema (A, B en D uit Figuur 1.5) die nodig zijn voor de berekening van de energiebarrières, voldoen aan $f'(\delta) = 0$ en kunnen via de (iteratieve) Newton-Raphson methode bepaald worden [10]:

$$\delta_{n+1} = \delta_n - \frac{f'(\delta_n)}{f''(\delta_n)}. \quad (2.12)$$

De iteratie stopt wanneer een gekozen convergentiecriterium bereikt is, dit is wanneer $\frac{\delta_{n+1}}{\delta_n} \approx 1$. De snelheid van deze methode is sterk afhankelijk van hoe dicht de initiële gok δ_0 bij de echte waarde ligt. Als initiële gok kunnen nu de aannames van de benaderingsmethode gebruikt worden: $\delta_{0,A} = 0$, $\delta_{0,B} = \pi$ en $\delta_{0,D} = \frac{\pi}{2}$.

Deze strategie zal toegepast worden om de extrema te vinden voor verschillende combinaties van θ en $\frac{M_{\text{sat}}B}{K_{u1}}$. θ ligt in het interval $[0^\circ, 180^\circ]$ dat we per graad verdelen. Gezien de symmetrie van het probleem volstaat het om enkel $\Delta E_{A \rightarrow B}$ te berekenen. $\frac{M_{\text{sat}}B}{K_{u1}}$ bestrijkt het interval $[10^{-4}, 10^{-1}]$ dat we in 1000 logaritmisch verdeelde stappen overlopen. De bovengrens is gekozen om zeker te voldoen aan de hoofdaanname die we hebben opgelegd, namelijk dat E_{anis} de dominante energiebijdrage is. De bovengrens is equivalent met $B = 2,5$ mT.

De resultaten worden vervolgens opgeslagen in een *look-up-table* die in de code aangeroepen kan worden. Indien tijdens een simulatie een waarde optreedt die tussen twee *look-up-table*-punten valt, wordt er voor het dichtsbijzijnde punt gekozen (zowel voor θ als voor $\frac{M_{\text{sat}}B}{K_{u1}}$).

2.2 Simulatieconstanten

In Tabel 2.1 wordt een overzicht gegeven van de simulatieconstanten. Deze waarden zullen gebruikt worden voor alle simulaties die in dit werk voorkomen, tenzij anders vermeld.

Tabel 2.1: Overzicht van de simulatieconstanten.

Volume deeltje	V	10^{-24} m^3
Saturatie-magnetisatie	M_{sat}	400 000 A/m
Anisotropie-constante	K_{u1}	10 000 J/m ³
<i>Attempt frequency</i>	f_0	10^8 Hz
Vacuümpermeabiliteit	μ_0	$4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Tm/A}$
Boltzmann-constante	k_B	$1,3806 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$

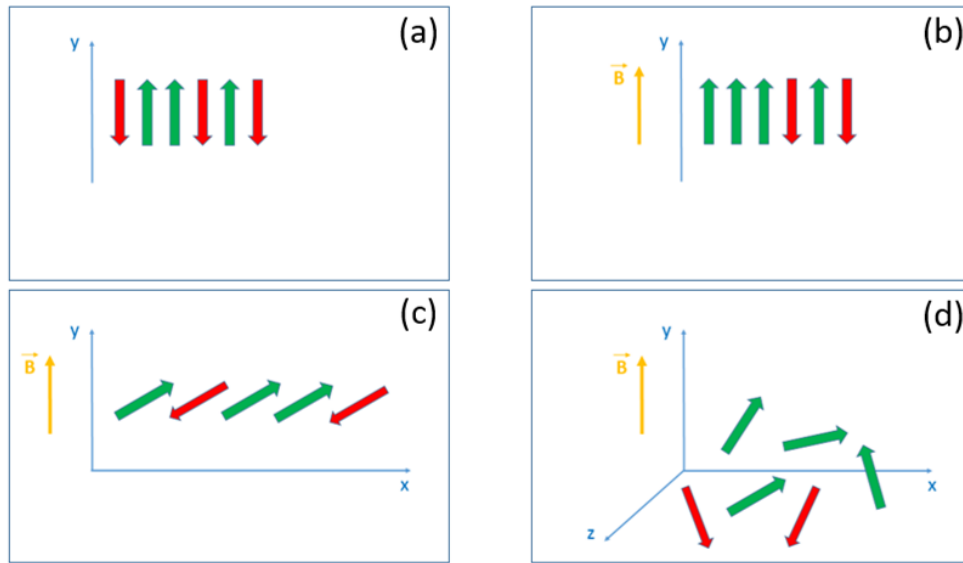
2.3 Niet-interagerende systemen

In deze sectie bestuderen we niet-interagerende systemen. Dit wil zeggen dat er geen interacties tussen de macrospins zijn. We moeten de dipool-energie E_{dip} niet in rekening brengen bij de bepaling van ΔE . De posities van de macrospins zijn dus onbelangrijk.

Voor niet-interagerende systemen bestaat er een eenvoudige analytische uitdrukking die de magnetisatie $\mathbf{m}$ geeft in functie van de temperatuur T , het externe veld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ en de simulatieconstanten van Tabel 2.1. Op die manier kan er getest worden of het opgestelde model en de implementatie van de code correct zijn: we zullen $\mathbf{m}$ numeriek bepalen met onze code en deze vergelijken met de analytisch bepaalde $\mathbf{m}$.

We zullen vier situaties onderzoeken (zie Figuur 2.1):

1. de relaxatie van $\mathbf{m}$ in afwezigheid van een extern veld.
2. de evenwichtsmagnetisatie m wanneer alle $\mathbf{u}_i$'s volgens het extern veld liggen.
3. de evenwichtsmagnetisatie m wanneer alle $\mathbf{u}_i$'s eenzelfde hoek maken met het extern veld.
4. de evenwichtsmagnetisatie m bij een willekeurige configuratie van $\mathbf{u}_i$.



Figuur 2.1: Schets van de vier onderzochte gevallen: in afwezigheid van een extern veld (a), alle $\mathbf{u}_i$'s volgens het extern veld (b), alle $\mathbf{u}_i$'s onder eenzelfde hoek met het extern veld (c) en bij een willekeurige configuratie (d).

2.3.1 Relaxatie bij afwezigheid van een extern veld

In afwezigheid van een extern veld ($\mathbf{B}_{\text{ext}} = \mathbf{0}$) wordt de energiebarrière enkel bepaald door de anisotropie-energie. Het energieminimum ($E_{\text{anis}} = 0$) bevindt zich exact bij $\mathbf{e}_m$ parallel aan de *easy axis*, het energiemaximum ($E_{\text{anis}} = K_{u1}V$) bevindt zich exact bij $\mathbf{e}_m$ parallel aan een *hard axis*. Er kan dus gewerkt worden met de benaderingsmethode (zie Sectie 1.4).

Veronderstel dat alle N macrospins hun *easy axis* volgens de y -as hebben. De magnetisatie $\mathbf{m}$ heeft dus enkel een y -component: m_y (Figuur 2.1(a)). Het subscript y zal verder niet geschreven worden. Initieel bevinden alle macrospins zich in de *up*-toestand met positieve m zodat m_0 maximaal is. We normeren dit maximum voor de eenvoud op 1.

De magnetisatie daalt doordat er netto gezien een aantal macrospins van *up* naar *down* zullen ompolen. Deze daling stopt wanneer m gelijk is aan nul, dit is wanneer er evenveel *up*- als *down*-macrospins zijn. In dat geval is de kans dat m daalt ($up \rightarrow down$) immers even groot als de kans dat m stijgt ($down \rightarrow up$). Netto gezien zal m dus niet meer veranderen, het systeem is in (dynamisch) evenwicht. Hoe sneller de macrospins ompolen, hoe sneller het systeem relaxeert naar dit evenwicht.

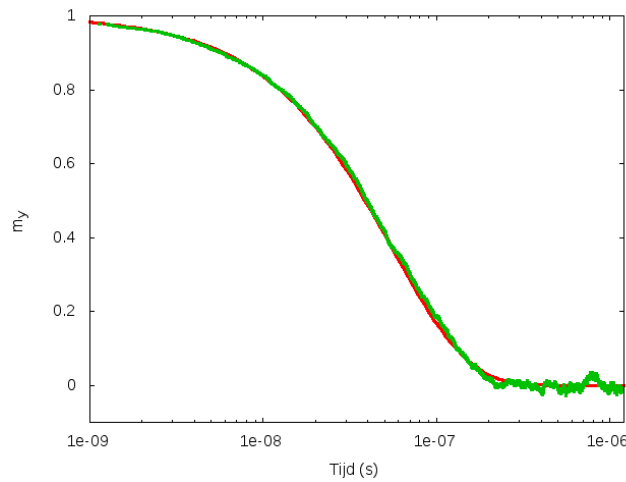
De magnetisatie $m(t)$ wordt gegeven door

$$m(t) = m_0 \exp(-t/\tau), \quad (2.13)$$

waarbij m_0 de magnetisatie op tijdstip 0 is (hier 1) en τ gelijk is aan

$$\tau = \frac{1}{2f_0} \exp(K_{u1}V/k_B T). \quad (2.14)$$

Relatie (2.13) kan nu gebruikt worden ter controle van onze code. Figuur 2.2 toont de overeenkomst tussen de theoretische curve en het numeriek resultaat voor een systeem van $N = 2000$ macrospins bij een temperatuur $T = 300$ K.



Figuur 2.2: Relaxatie van m_y in functie van de tijd voor een systeem met $N = 2000$ macrospins bij een temperatuur $T = 300$ K. Rood: de theoretische curve (2.13). Groen: het numeriek resultaat.

2.3.2 Evenwichtsmagnetisatie bij extern veld volgens anisotropie-richting

Beschouw hetzelfde macrospinsysteem als beschreven in voorgaande paragraaf, met dat verschil dat er een extern veld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ wordt aangelegd volgens de positieve y-as (dit is volgens de *up*-richting) (Figuur 2.1(b)). De magnetisatie m (er is opnieuw enkel een y-component) zal naar een evenwichtswaarde evolueren die afhankelijk is van de grootte B van het aangelegde veld. Hoe groter B , hoe groter deze waarde. Bij ompoling moeten deeltjes in de *up*-toestand namelijk een grotere energiebarrière overwinnen dan deeltjes in de *down*-toestand. De overgang van *up* naar *down* is dus minder waarschijnlijk dan de overgang van *down* naar *up*. In (dynamisch) evenwicht moeten er daarom meer *up*- dan *down*-macrospins zijn, zodat de kans dat m daalt/stijgt hetzelfde is. Hoe groter B , hoe groter het verschil in aantal *up*- en *down*-macrospins en dus hoe groter de evenwichtsmagnetisatie.

De energiebarrière ΔE wordt bepaald door de anisotropie-energie E_{anis} en de Zeeman-energie E_{ext} , en moet dus in principe berekend worden via de expliciete methode. Toch zullen ook de resultaten bekomen met de benaderingsmethode vermeld worden.

Legt men een extern veld aan met grootte B , dan wordt de evenwichtsmagnetisatie m gegeven door [8]

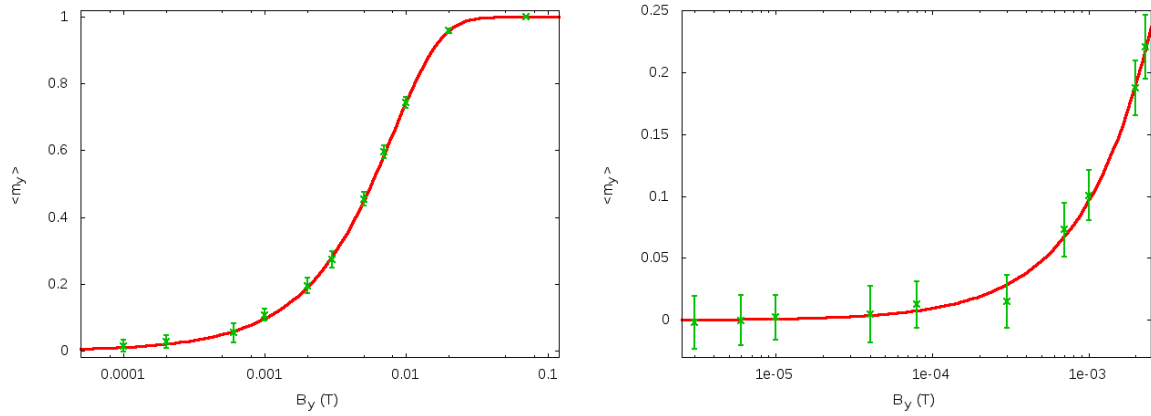
$$m = \tanh(M_{\text{sat}}VB/k_{\text{B}}T), \quad (2.15)$$

waarbij we de maximale m (alles *up*) opnieuw genormeerd hebben op 1. Deze vergelijking kan men bekomen door te kijken naar de partitiefunctie Z_N van het systeem bestaande uit N macrospins. Elk deeltje kan zich in slechts twee energietoestanden bevinden: *up* met een energie $E_u = -M_{\text{sat}}VB$ en *down* met een energie $E_d = +M_{\text{sat}}VB$. De partitiefunctie Z_1 van één deeltje is dan

$$Z_1 = \exp(E_u/k_{\text{B}}T) + \exp(E_d/k_{\text{B}}T) = 2\cosh(M_{\text{sat}}VB/k_{\text{B}}T). \quad (2.16)$$

Gebruikt men de gekende thermodynamische relatie $M = -\partial F/\partial B$ met $F = -k_{\text{B}}T\ln(Z)$ en het feit dat voor ongekoppelde macrospins $Z_N = Z_1^N$, dan vinden we Vergelijking (2.15) terug op een factor $NM_{\text{sat}}V$ na. Dit is net de normeringsfactor: $M \frac{1}{NM_{\text{sat}}V} = m$.

Formule (2.15) biedt nu een eerste test voor de correctheid van de implementatie van de Zeeman-energie. Voor verschillende waarden van B zal de evenwichtsmagnetisatie m bepaald worden via onze code. Dit is de gemiddelde magnetisatie $\langle m \rangle$, waarbij het gemiddelde berekend wordt vanaf de 25 000^{ste} ompoling van de in totaal 50 000 ompolingen. Deze numerieke waarde zal dan vergeleken worden met de theoretische verwachting (2.15). Er wordt opnieuw gewerkt met $N = 2000$ macrospins en bij $T = 300$ K. Figuur 2.3 toont de overeenkomst tussen theorie en simulatie.



Figuur 2.3: Evenwichtsmagnetisatie m_y in functie van B_y voor een systeem met $N = 2000$ macrospins bij een temperatuur $T = 300$ K. Bij de berekening van ΔE werd de benaderingsmethode (links) of de expliciete methode (rechts) gebruikt. Rood: de theoretische curve (2.15). Groen: het numeriek resultaat, waarbij het gemiddelde en de standaardafwijking berekend werden vanaf de 25 000^{ste} ompoling van de in totaal 50 000 ompolingen.

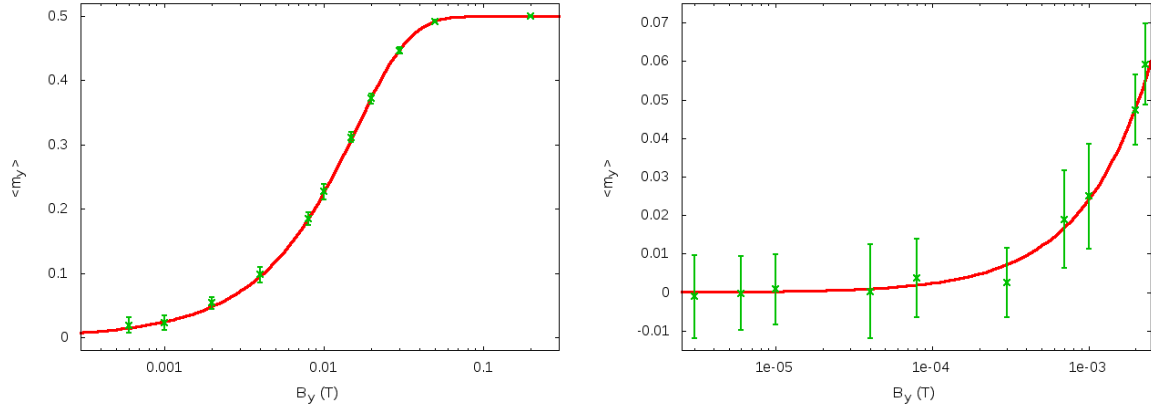
2.3.3 Evenwichtsmagnetisatie bij extern veld niet volgens anisotropie-richting

In de vorige paragraaf werden systemen besproken waarbij het extern veld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ volgens de *easy axis* lag. In deze paragraaf zal het extern veld een hoek θ maken met de *easy axis* van elk deeltje (Figuur 2.1(c)). We definiëren het assenstelsel zodanig dat $\mathbf{B}$ in de positieve y -richting wijst en het vlak gevormd door $\mathbf{B}$ en $\mathbf{u}$ het xy -vlak is. De magnetisatie $\mathbf{m}$ heeft nu twee componenten: m_x en m_y . De evenwichtsmagnetisatie m_y zal onderzocht worden.

Een analoge redenering als deze uit de vorige paragraaf kan worden opgebouwd. Twee aspecten dienen echter in rekening gebracht te worden. Ten eerste moet de maximale m geprojecteerd worden op de y -as: $\cos(\theta)$. Ten tweede hebben de *up*- en *down*-toestand nu een energie van respectievelijk $-M_{\text{sat}}VB\cos(\theta)$ en $+M_{\text{sat}}VB\cos(\theta)$. Op die manier kan Vergelijking (2.15) veralgemeend worden tot

$$m_y = \tanh\left(\frac{M_{\text{sat}}VB\cos(\theta)}{k_B T}\right)\cos(\theta). \quad (2.17)$$

Formule (2.17) biedt nu een tweede test voor de correctheid van de implementatie van de Zeeman-energie. Een systeem bestaande uit $N = 2000$ macrospins bij $T = 300$ K zal voor $\theta = 60^\circ$ worden onderzocht zoals beschreven in paragraaf 2.3.2. Figuur 2.4 toont de overeenkomst tussen theorie en simulatie.



Figuur 2.4: Evenwichtsmagnetisatie m_y in functie van B_y voor een systeem met $N = 2000$ macrospins bij een temperatuur $T = 300$ K. Het B-veld maakt een hoek θ van 60° met de *easy axis* van elk deeltje. Bij de berekening van ΔE werd de benaderingsmethode (links) of de expliciete methode (rechts) gebruikt. Rood: de theoretische curve (2.17). Groen: het numeriek resultaat, waarbij het gemiddelde en de standaardafwijking berekend werden vanaf de 25 000^{ste} ompoling van de in totaal 50 000 ompolingen.

2.3.4 Evenwichtsmagnetisatie bij een willekeurige configuratie

We beschouwen een systeem van N macrospins. Iedere macrospin i heeft zijn eigen willekeurige anisotropie-richting $\mathbf{u}_i$ (Figuur 2.1(d)). Naar analogie met de twee voorgaande paragrafen leggen we een extern B-veld aan volgens de positieve y-richting en onderzoeken we de evenwichtsmagnetisatie m_y in functie van de grootte B van het veld. De x- en z-component van de magnetisatie $\mathbf{m}$ worden buiten beschouwing gelaten. De theoretische waarde van m_y wordt ditmaal gegeven door

$$m_y = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{M_{\text{sat}} V B \cos(\frac{\pi}{4})}{k_B T}\right). \quad (2.18)$$

De factor $\frac{1}{2}$ in bovenstaande formule volgt uit de projectie van $\mathbf{m}$ op de y-as waarbij $\mathbf{m}$ weer genormeerd is op 1. m_y is maximaal als alle macrospins zich in de *up*-toestand met positieve m_y bevinden. Er moet dus enkel gekeken worden naar $0 < \phi < \pi$ en $0 < \theta < \pi/2$ waarvoor $y > 0$. Voor een willekeurige configuratie is de maximale y-component (2.4) dan gemiddeld

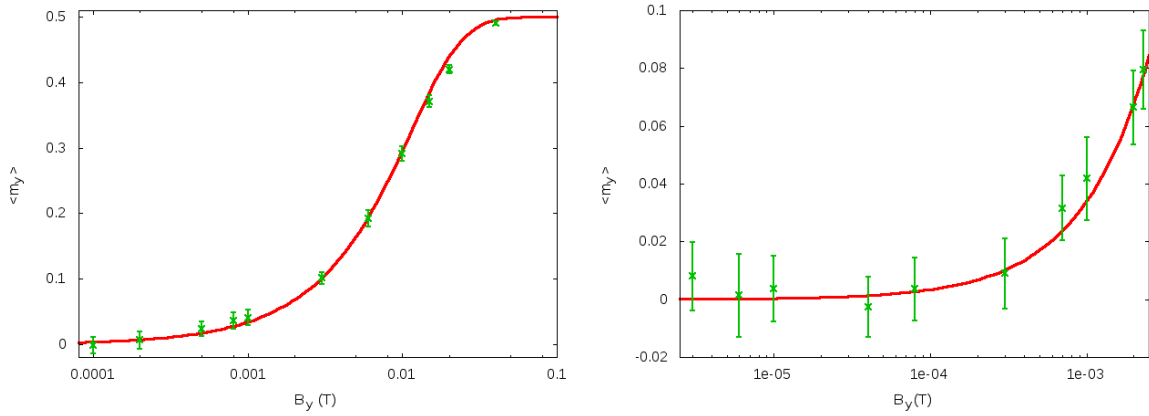
$$\frac{\int_0^\pi d\phi \int_0^{\pi/2} \sin(\theta) d\theta [\sin(\theta) \sin(\phi)]}{\int_0^\pi d\phi \int_0^{\pi/2} \sin(\theta) d\theta} = \frac{1}{2}. \quad (2.19)$$

De energie van de *up*-toestand (*down*-toestand) is gelijk aan $(-)M_{\text{sat}}VB\cos\theta_{mB}$. Om verwar-
ring met de poolhoek θ te vermijden, hebben we aan de hoek tussen $\mathbf{m}$ en $\mathbf{B}$ het subscript
 mB toegevoegd. De gemiddelde θ_{mB} vindt men door projectie in het xy -vlak:

$$\theta_{mB} = \frac{\int_0^\pi \sin(\theta) d\theta [\sin(\theta)]}{\int_0^\pi \sin(\theta) d\theta} = \frac{\pi}{4}. \quad (2.20)$$

Dit verklaart de factor $\cos(\frac{\pi}{4})$ in Formule (2.18).

De overeenkomst tussen theorie en simulatie, voor een systeem met $N = 2000$ macrospins bij
 $T = 300$ K, wordt weergegeven in Figuur 2.5.



Figuur 2.5: Evenwichtsmagnetisatie m_y in functie van B_y voor een willekeurig systeem met $N = 2000$ macrospins bij een temperatuur $T = 300$ K. Bij de berekening van ΔE werd de benaderingsmethode (links) of de expliciete methode (rechts) gebruikt. Rood: de theoretische curve (2.18). Groen: het numeriek resultaat, waarbij het gemiddelde en de standaardafwijking berekend werden vanaf de 25 000^{ste} ompoling van de in totaal 50 000 ompolingen.

2.3.5 Conclusie

We hebben aangetoond dat niet-interagerende systemen correct werden geïmplementeerd. De implementatie van de stochastische ompoling en van de anisotropie-energie werd gecontroleerd in Sectie 2.3.1, de implementatie van de Zeeman-energie in Sectie 2.3.2 en 2.3.3, en de implementatie van willekeurige systemen in Sectie 2.3.4.

2.4 Dynamica van interagerende systemen: *aging*

In Sectie 2.3 werden vier soorten niet-interagerende systemen bestudeerd. Voor elk type konden we de simulatie vergelijken met een theoretisch model. Dit was mogelijk omdat er geen interacties tussen de deeltjes waren.

In deze sectie worden interagerende systemen besproken. Dit betekent dat de volledige geometrie van het systeem in rekening moet worden gebracht: ook alle posities van de macrospins moeten nu gekend zijn. Om het dipool-veld $\mathbf{B}_{\text{dip},i}$ inwerkend op deeltje i te berekenen (Formule (1.5)), heeft men namelijk de plaatsvectoren $\mathbf{r}_{ij}$ nodig. $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ vormt samen met het externe veld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ een effectief veld $\mathbf{B}_{\text{eff}}$ dat zal worden gebruikt om met de expliciete methode (zie Sectie 1.4) de energiebarrières ΔE_i te bepalen.

Men kan interagerende systemen onderverdelen in twee soorten op basis van de verhouding tussen de dipool-energie E_{dip} en de thermische energie. Is $E_{\text{dip}} \ll k_B T$, dan kan men spreken van een zwak-interagerend systeem; zo niet is het systeem sterk-interagerend. Er is echter geen eenduidige overgang tussen beide regimes.

Met sterk-interagerend bedoelen we hier systemen waarbij de interacties zorgen voor een waarneembaar effect in het gedrag van het systeem, zoals bijvoorbeeld *aging* [13]. *Aging* treedt op wanneer een macrospinsysteem, met willekeurige en gefrustreerde interacties, zich in de zogenaamde *spin glass*-toestand bevindt. Daarvoor moet de temperatuur kleiner zijn dan de *glass*-temperatuur T_g . Bij T_g ondergaat het systeem namelijk een fasetransitie die beschouwd kan worden als de overgang tussen zwak- en sterk-interagerend.

In Sectie 2.4.2 gaan we dit *aging*-effect nader onderzoeken: na een zekere wachttijd t_w leggen we een extern veld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ aan en vanaf dat moment onderzoeken we de magnetisatie $m(t)$. Het verloop van $m(t)$ blijkt afhankelijk te zijn van de wachttijd die ook wel de *age* of de leeftijd van het (random) sample wordt genoemd. Het is de bedoeling om op basis van de $S(t)$ -curve de gebruikte wachttijd af te schatten, waarbij $S(t)$ gedefinieerd is als $S(t) = \frac{dm(t)}{d\ln(t)}$.

Bij zwak-interagerende systemen is *aging* niet mogelijk. Toch zullen twee $S(t)$ -curves voor niet-interagerende systemen onderzocht worden. Men kan niet-interagerende systemen immers beschouwen als zwak-interagerend in de limiet $\mathbf{B}_{\text{dip}} \rightarrow 0$. Dit is equivalent met de afstand r tussen de deeltjes naar oneindig te laten gaan. Het voordeel van expliciet te werken met niet-interagerende systemen is dat voor zulke systemen een eenvoudig theoretisch model opgesteld kan worden (zie Sectie 2.4.1).

2.4.1 Zwak-interagerende systemen

Theoretisch model

We beschouwen een systeem zoals beschreven in Sectie 2.3.2. De *easy axis* van elke macrospin is parallel aan de y-as en ook het aangelegde externe veld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ ligt volgens de y-as. Er zijn U *up*-toestanden waarbij $\mathbf{e}_m$ gericht is volgens de zin van $\mathbf{B}$ en D *down*-toestanden waarbij $\mathbf{e}_m$ tegengesteld is aan de zin van $\mathbf{B}$. *up* heeft een positieve magnetisatie, *down* een negatieve. Voor een systeem met N macrospins geldt dan dat

$$\begin{aligned} U + D &= N \\ UM_{\text{sat}}V - DM_{\text{sat}}V &= M \end{aligned}$$

met M de magnetisatie van het systeem. Naar analogie met Sectie 2.3 normeren we de magnetisatie via de normeringsfactor: $M \frac{1}{NM_{\text{sat}}V} = m$.

We stellen $u = U/N$ en $d = D/N$ zodat

$$\begin{aligned} u + d &= 1 \\ u - d &= m \end{aligned}$$

of

$$\begin{aligned} u &= \frac{1+m}{2} \\ d &= \frac{1-m}{2}. \end{aligned}$$

De tijdsevolutie van u en van d worden gegeven door

$$\begin{aligned} \dot{u} &= dR_{d \rightarrow u} - uR_{u \rightarrow d} \\ \dot{d} &= uR_{u \rightarrow d} - dR_{d \rightarrow u} \end{aligned}$$

waarbij $R_{d \rightarrow u}$ de ompoolfrequentie is waarmee een *down*-macrospin naar een *up*-macrospin ompoolt en waarbij $R_{u \rightarrow d}$ de ompoolfrequentie is waarmee een *up*-macrospin naar een *down*-macrospin ompoolt. Voeren we volgende dimensieloze variabelen in

$$\begin{aligned} \sigma &= -K_{u1}V/k_{\text{B}}T \\ \xi &= -M_{\text{sat}}VB/k_{\text{B}}T, \end{aligned}$$

dan geldt

$$\begin{aligned} R_{d \rightarrow u} &= f_0 \exp(\sigma - \xi) \\ R_{u \rightarrow d} &= f_0 \exp(\sigma + \xi). \end{aligned}$$

De tijdsevolutie van m ($\dot{m} = \dot{u} - \dot{d}$) kan zo geschreven worden als

$$\dot{m} = 2f_0 \left[\exp(\sigma - \xi)d - \exp(\sigma + \xi)u \right].$$

Substitueert men hierin de relaties $d = \frac{1-m}{2}$ en $u = \frac{1+m}{2}$, dan bekomt men uiteindelijk dat

$$\dot{m} = -2f_0 \exp(\sigma) \left[\cosh(\xi)m + \sinh(\xi) \right] = am + b. \quad (2.21)$$

Om de notaties te vereenvoudigen werden a en b ingevoerd als volgt:

$$\begin{aligned} a &= -2f_0 \exp(\sigma) \cosh(\xi) \\ b &= -2f_0 \exp(\sigma) \sinh(\xi). \end{aligned}$$

Vergelijking (2.21) kan geïntegreerd worden tot

$$\int_{m=m_0}^{m=m(t)} \frac{d(am + b)}{am + b} = a \int_0^t dt. \quad (2.22)$$

Met het oog op Sectie 2.4.2, waar een systeem gedurende een tijd t_w kan relaxeren naar de grondtoestand ($m \rightarrow 0$), kiezen we m_0 gelijk aan nul. De magnetisatie $m(t)$ op tijdstip t volgt uit Formule (2.22):

$$m(t) = \frac{b}{a} \left[\exp(at) - 1 \right]. \quad (2.23)$$

In de limiet $t \rightarrow \infty$ krijgt men dat $m = -\frac{b}{a} = -\tanh(\xi) = \tanh(M_{\text{sat}}VB/k_B T)$ in overeenkomst met Formule (2.15).

Bevinden alle macrospins zich aanvankelijk in de *up*-toestand ($m_0 = 1$) en werkt men in afwezigheid van een extern veld ($\xi = 0$ en dus $a = -2f_0 \exp(\sigma)$ en $b = 0$), dan wordt de magnetisatie op tijdstip t gegeven door $m(t) = \exp(at)$ wat gezien de definitie van a en σ neerkomt op Formule (2.13) en (2.14).

$S(t)$, de afgeleide van $m(t)$ naar $\ln(t)$, kan met (2.23) berekend worden:

$$S(t) = b \exp(at)t. \quad (2.24)$$

Het tijdstip t_{max} waarop $S(t)$ maximaal is, speelt een belangrijke rol bij *aging* (zie Sectie 2.4.2). Een eenvoudige berekening leert dat in dit geval $t_{\text{max}} = -\frac{1}{a} = \frac{1}{R_{d \rightarrow u} + R_{u \rightarrow d}}$.

Simulatie

Het opgestelde model voor $S(t)$ zal nu vergeleken worden met een numeriek resultaat. Er zal worden gewerkt bij een temperatuur $T = 300$ K. De helft van de N macrospins bevinden zich op $t = 0$ in de *up*-toestand, zodat $m_0 = 0$. Na een wachttijd t_w wordt een extern veld h aangelegd van 5 Oe^2 (Figuur 2.6, links) of van 20 Oe (Figuur 2.6, rechts). Voor niet-interagerende systemen heeft de wachttijd geen invloed op $m(t_h)$ (het subscript h wijst op het feit dat $m(t)$ pas gemeten wordt vanaf het moment dat er een extern veld is). Daarom mag t_w gelijk gesteld worden aan nul.

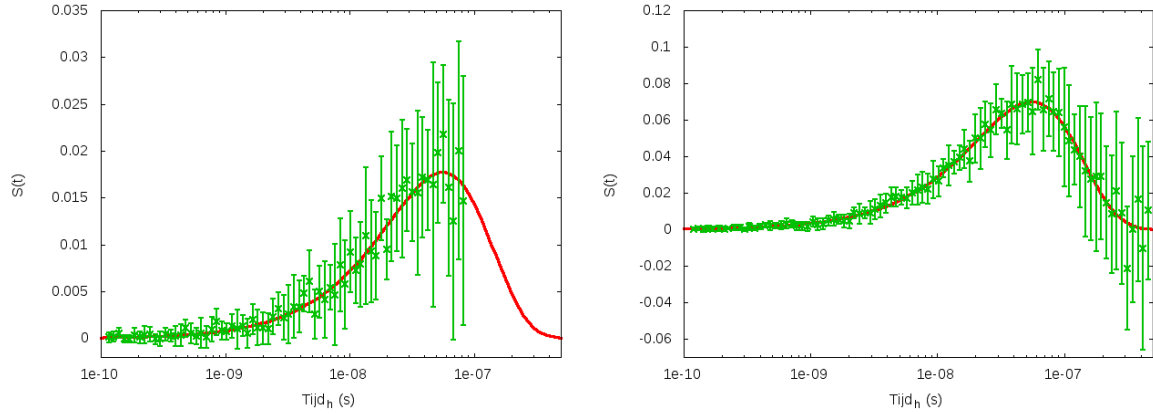
Het aantal deeltjes N in deze simulatie moet voldoende groot zijn zodat de $m(t)$ -curve *smooth* is. De onderzochte grootheid is immers $S(t)$, de afgeleide van $m(t)$ naar $\ln(t)$. Een kleine ruis op $m(t)$ vertaalt zich in sterke fluctuaties op $S(t)$. Om die reden zal er uitgemiddeld worden over tien simulaties en zal er met $N = 200\,000$ (Figuur 2.6, links) of met $N = 50\,000$ (Figuur 2.6, rechts) gewerkt worden. Het gevolg van een grote N -waarde is echter dat de rekentijd om één ompoling uit te voeren enorm toeneemt in vergelijking met deze van de simulaties uit Sectie 2.3.

De tijdstippen waarop $m(t)$ gemeten wordt, zal bovendien telkens met een bepaalde factor vermenigvuldigd worden. Uitgezet op een logaritmische tijdschaal liggen de meetpunten zo equidistant van elkaar. Bijgevolg zal de rekentijd tussen metingen exponentieel toenemen: er moeten steeds meer ompolingen gebeuren om een volgend meetpunt te genereren.

Figuur 2.6 toont de overeenkomst tussen de theoretische en numerieke $S(t)$ -curve. $S(t)$, met $t = \frac{1}{2}(t_n + t_{n+1})$, werd berekend via

$$S(t) = \frac{m(t_{n+1}) - m(t_n)}{\ln(t_{n+1}) - \ln(t_n)}. \quad (2.25)$$

²1 Oe is gelijk aan $\frac{1000}{4\pi} \text{ A/m}$ of 10^{-4} T .



Figuur 2.6: $S(t)$ -curve in functie van de tijd t_h bij een temperatuur $T = 300$ K voor een systeem met $N = 200\,000$ (links) en $N = 50\,000$ (rechts) deeltjes. Op $t_h = 0$ wordt een extern veld h aangelegd met grootte 5 Oe (links) en 20 Oe (rechts). Rood: de theoretische curve (2.24). Groen: het numeriek resultaat waarbij uitgemiddeld werd over tien simulaties. De foutenvlaggen tonen de standaardafwijking.

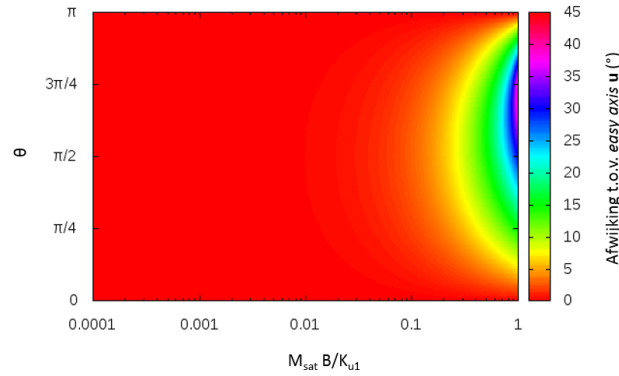
2.4.2 Sterk-interagerende systemen

In deze sectie worden sterk-interagerende systemen besproken. Voor zulke systemen zijn de interacties bepalend voor het gedrag van het systeem. De dipool-energie E_{dip} is niet verwaarloosbaar ten opzichte van de thermische energie $k_B T$ zoals bij zwak-interagerende systemen wel het geval was.

E_{dip} is begrensd doordat het effectieve veld B_{eff} maximaal 2,5 mT kan bedragen. Deze keuze hebben we in Sectie 1.4 gemaakt om zeker te voldoen aan de voorwaarde die stelde dat de anisotropie-energie E_{anis} de dominante energiebijdrage is. B_{eff} is bovendien de som van het externe veld B_{ext} en het dipool-veld B_{dip} . Zoals bij zwak-interagerende systemen zal er gewerkt worden met externe velden van enkele Oersted. Hierdoor mag B_{dip} hoogstens een grootte-orde van 0,1 mT hebben en is E_{dip} maximaal 4×10^{-23} J (Formule (1.6)).

Voor sterk-interagerende systemen kan de thermische energie $k_B T$ niet veel groter zijn dan deze $E_{\text{dip,max}}$. Anders zou het systeem zwak-interagerend zijn. We zouden dus moet werken bij maximaal 3 K. Bij die experimenteel moeilijk te realiseren temperaturen bedraagt de tijdschaal waarop het systeem reageert op externe veranderingen, enkele miljoenen jaren.

Om die reden kiezen we ervoor om de maximale waarde die B_{eff} mocht hebben (2,5 mT), te verhogen tot 25 mT³. Op die manier mag B_{dip} 1 mT zijn en kan er gewerkt worden bij temperaturen van 20 à 30 K. Een effectief veld van 25 mT is equivalent met $\frac{M_{\text{sat}} B_{\text{eff}}}{K_{u1}} = 1$. Dit betekent dat de anisotropie-energie ($= K_{u1} V$) even groot is als de som van de Zeeman- en de dipool-energie ($= M_{\text{sat}} V (B_{\text{ext}} + B_{\text{dip}})$). De aanname dat E_{anis} de dominante energiebijdrage is en $\mathbf{e}_m$ hierdoor bij benadering volgens de *easy axis* ligt, is bij hoge effectieve velden dus niet meer accuraat. Dit wordt ook getoond in Figuur 2.7: de afwijking ten opzichte van de *easy axis* bedraagt enkele tientallen graden.



Figuur 2.7: Bij minimale energie wijkt het magnetisch moment $\mathbf{m}$ af ten opzichte van de *easy axis*. De afwijking wordt gegeven als functie van $\frac{M_{\text{sat}} B}{K_{u1}}$ en van de hoek θ tussen $\mathbf{u}$ en $\mathbf{B}$.

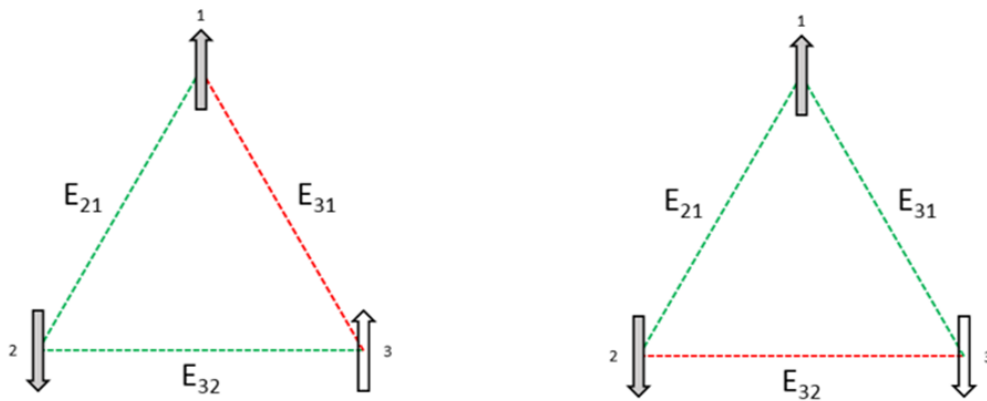
Het dipool-veld $\mathbf{B}_{\text{dip},i}$ inwerkend op deeltje i wordt gegeven door Formule (1.5): de eerste factor is gelijk aan $\mu_0 M_{\text{sat}} V = 16\pi \cdot 10^{-26} \text{ Tm}^3$, de tweede factor benaderen we als $\frac{1}{r^3}$ met r de afstand tussen de (naburige) macrospins. $B_{\text{dip},i}$ is dus $\approx 16\pi \cdot 10^{-26} / r^3 \text{ T}$. Bij een temperatuur van 20 K moet $B_{\text{dip},i} \approx 1 \text{ mT}$ zijn om een sterk-interagerend systeem te hebben. Hieruit kan men een schatting maken voor de afstand: $r \approx 79 \text{ nm}$.

³Bij een nog hogere bovengrens op B_{eff} kunnen er situaties optreden waarbij deeltjes slechts één minimale energieconfiguratie hebben: hun magnetisch moment $\mathbf{e}_m$ is gericht volgens $\mathbf{B}_{\text{eff}}$. Gezien de definitie van ΔE zouden zulke deeltjes een negatieve energiebarrière ondervinden, wat fysisch niet zinvol is.

Aging

We beschouwen een systeem met 64 000 deeltjes die geplaatst worden op een kubisch rooster (40x40x40) met een roosterconstante van 79 nm. Bij deze afstand heeft het dipool-veld $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ immers een grootte van de orde 1 mT en kan er gewerkt worden bij een temperatuur $T < T_g$ van 20 K. Onder de *glass*-temperatuur T_g bevindt een macrospinsysteem, met willekeurige en gefrustreerde interacties, zich in de *spin glass*-toestand en kan *aging* waargenomen worden. Om er voor te zorgen dat de interacties tussen de deeltjes daadwerkelijk willekeurig en gefrustreerd zijn, krijgt elk deeltje een willekeurige anisotropie-richting $\mathbf{u}$.

Frustratie betekent dat een deeltje i nooit de interactie-energie E_{ij} met elk ander deeltje j kan minimaliseren, ongeacht de toestand waarin het deeltje i zich bevindt. Een voorbeeld van frustratie is een antiferromagnetisch systeem met macrospins op een driehoekig rooster (Figuur 2.8). Plaatst men de eerste macrospin *up* en de tweede *down* om E_{21} te minimaliseren, dan kan de derde macrospin nooit E_{31} én E_{32} minimaliseren: is de toestand van de derde macrospin *up* dan is E_{31} maximaal (*up-up*-interactie), is de toestand van de derde macrospin *down* dan is E_{32} maximaal (*down-down*-interactie).

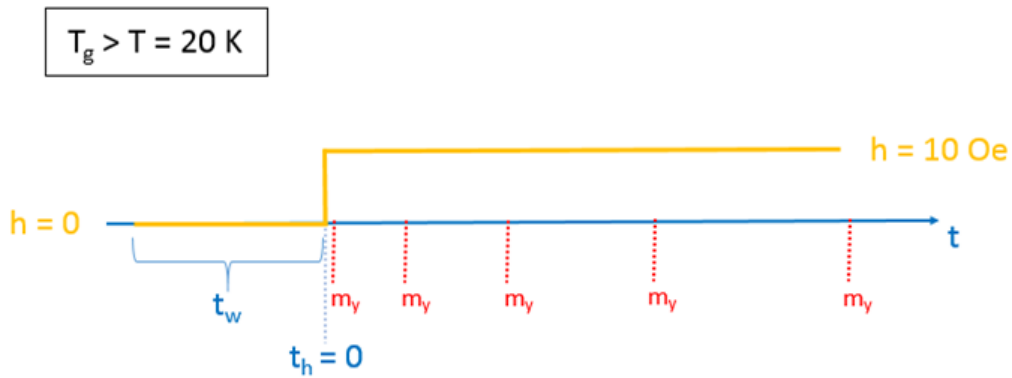


Figuur 2.8: Frustratie bij een antiferromagnetisch systeem met macrospins op een driehoekig rooster.

Methode

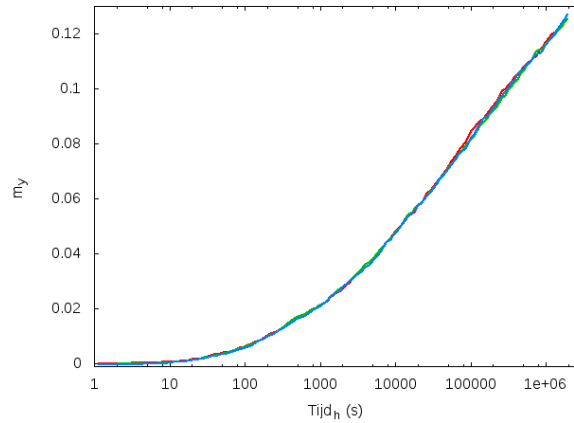
Om te onderzoeken of bovenstaand beschreven macrospinsysteem *aging* vertoont, gaan we als volgt te werk (zie ook Figuur 2.9):

1. We simuleren bij een temperatuur $T < T_g$ van 20 K. (In een experiment moet de temperatuur eerst langzaam verlaagd worden tot een gewenste temperatuur onder T_g bereikt is.) Het systeem bevindt zich (nu) in de *spin glass*-fase.
2. Het systeem relaxeert gedurende een wachttijd t_w naar een (lokaal) energiminimum. Hoe langer t_w , hoe lager de energie van het minimum. Er zal worden gewerkt met drie verschillende wachttijden: 100 s, 1000 s en 10 000 s. De tijd in de simulatie is echter discreet omdat ze de som is van de ompooltijden t_s (zie Sectie 2.1.2). Hierdoor is de wachttijd net iets langer dan de vooropgestelde waarde; de grootte-orde van t_w verandert evenwel niet. Bovendien zijn we vooral geïnteresseerd in de trend van $S(t)$ (zie 5.) en niet zo zeer in de exacte vorm ervan. We mogen dit effect dus verwaarlozen. (In de code wordt de echte t_w wel bijgehouden.)
3. Na de wachttijd t_w leggen we een extern veld aan volgens de positieve y-richting. De grootte h van het veld bedraagt 10 Oe. h moet voldoende groot zodat de evenwichtsmagnetisatie beduidend groter is dan $m(t < t_w)$. Als dit niet het geval is, worden de fluctuaties op m te groot waardoor *aging* niet waargenomen kan worden (zie 4. en 5.).



Figuur 2.9: Schets van de gebruikte methode om *aging* te onderzoeken. De wachttijd t_w bedraagt 100 s, 1000 s of 10 000 s.

4. Vanaf het moment waarop het externe veld wordt aangelegd, meten we de y-component van magnetisatie $m_y(t_h)$. Elke meting start bij $t_h = 0$, waardoor simulaties met een verschillende wachttijd t_w met elkaar vergeleken kunnen worden. Het subscript $_h$ zal verder niet meer geschreven worden. De tijden waarop $m(t)$ gemeten wordt, zijn zo dat op een logaritmische tijdschaal de meetpunten equidistant van elkaar liggen.
5. $m_y(t)$ blijkt afhankelijk te zijn van de gebruikte t_w . Deze afhankelijkheid wordt nog duidelijker als we $S(t) = \frac{dm(t)}{d\ln(t)}$ berekenen met Formule (2.25). Er zou namelijk een maximum optreden in de $S(t)$ -curve bij $t = t_w$ [14]. (Indien de wachttijd - ook wel de leeftijd of de *age* genoemd - niet gekend is, kan men deze dus schatten op basis van de $S(t)$ -curve.) Voor iedere wachttijd zal $S(t)$ uitgemiddeld worden over 50 simulaties.
6. Wegens de hoge computationele kost van deze simulaties ($N = 64\,000$, interagerend systeem, veel ompolingen) zal $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ niet na iedere ompoling geüpdatet worden. We zullen pas na tien ompolingen $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ opnieuw uitrekenen. Dit heeft weinig invloed op het verloop van $m_y(t)$, zoals in Figuur 2.10 getoond wordt, en halveert de rekentijd. Een verdere verhoging van dit aantal ompolingen (van bijvoorbeeld 10 naar 100) heeft geen merkbare impact op de $m(t)$ -curve maar leidt niet tot een noemenswaardige daling in de rekentijd.



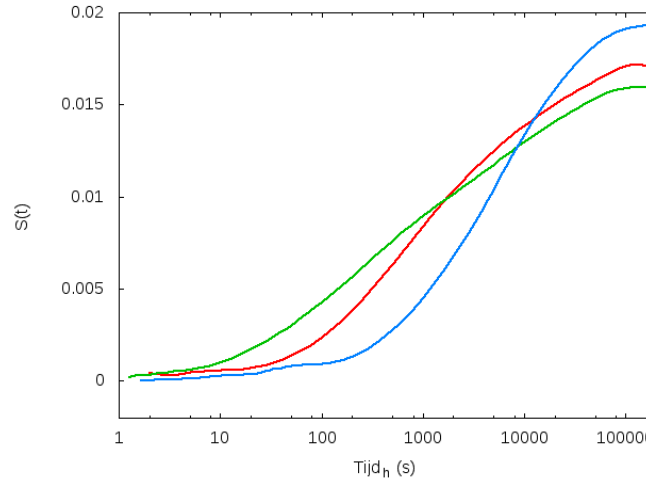
Figuur 2.10: De magnetisatie m_y als functie van de tijd t_h bij een temperatuur $T = 20$ K voor een systeem met $N = 64\,000$ deeltjes. Op $t_h = 0$ wordt een extern veld h aangelegd met grootte 10 Oe. Het dipool-veld $\mathbf{B}_{\text{dip}}$ wordt geüpdatet na 1 (rood), 10 (groen) of 100 (blauw) ompolingen. Er werd een wachttijd t_w van 100 s gebruikt.

Resultaten

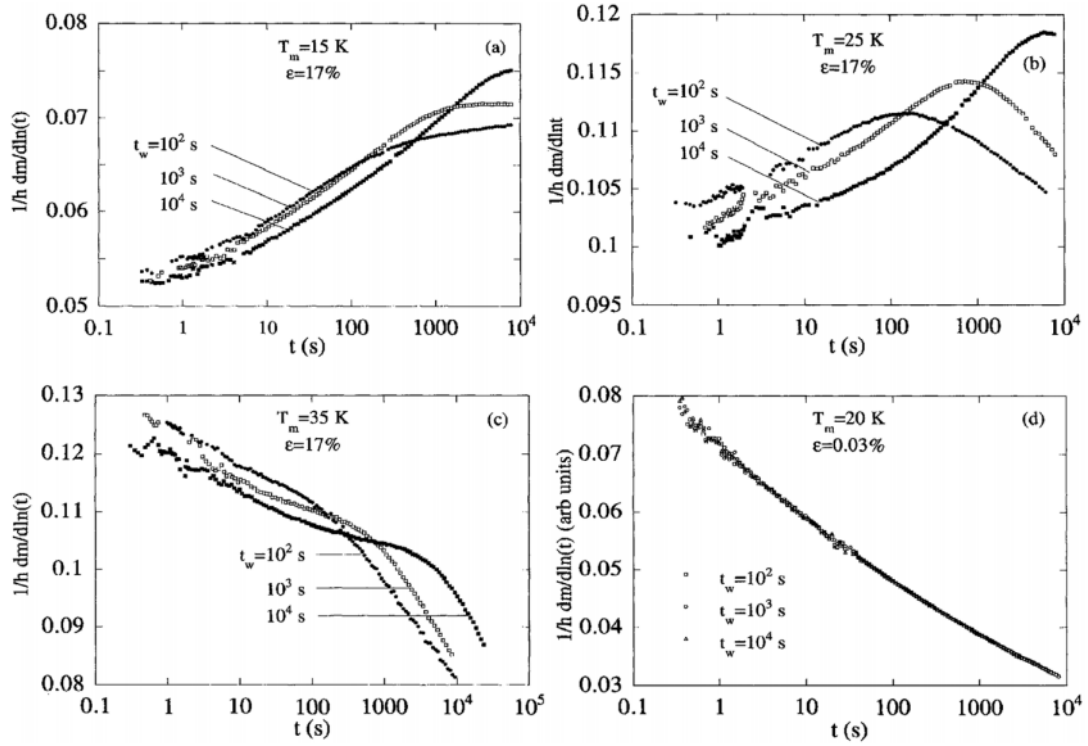
De $S(t)$ -curves vertonen een duidelijke t_w -afhankelijkheid (Figuur 2.11). Hoe groter t_w , hoe langer het duurt vooraleer $m(t)$ - en dus ook $S(t)$ - begint te stijgen. Dit kan men intuïtief als volgt verklaren. Bij een langere wachttijd heeft het systeem meer tijd om af te dalen in het energielandschap. De toestand waarnaar het systeem geëvolueerd is, zal hierdoor stabielere zijn. Men zegt ook dat het systeem vastgevroren is in deze toestand. Wanneer er dan een extern veld wordt aangelegd, moet het systeem zich aanpassen ($m_y \rightarrow m_{y,\text{sat}}$). Hiervoor moet het uit deze stabiele toestand proberen te geraken, wat uiteraard langer duurt voor een stabielere toestand.

De $S(t)$ -curves van Figuur 2.11 hebben geen maximum rond hun respectievelijke wachttijden. De experimenteel bekomen curves van [13] (Figuur 2.12) tonen aan dat het waarnemen van een maximum rond t_w bepaald wordt door de verhouding tussen de thermische energie $k_B T$ en de dipool-energie E_{dip} . Enkel wanneer $\frac{k_B T}{E_{\text{dip}}} \approx 1$ is het maximum bij t_w duidelijk zichtbaar (Figuur 2.12(b)).

Onze curves vertonen gelijkenissen met die van Figuur 2.12(a). Om het maximum waar te nemen, hadden we dus moeten simuleren bij hogere temperatuur T . Dit zou de duur van de simulaties echter drastisch hebben doen toenemen: de gemiddelde ompooltijd $t_{s,i}$ is bij hogere T kleiner, waardoor er meer ompolingen moeten gebeuren om dezelfde fysische tijd te simuleren.

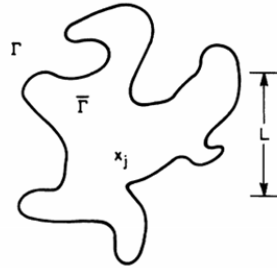


Figuur 2.11: Gesmoothe $S(t)$ als functie van de tijd t_h bij een temperatuur $T = 20$ K voor een systeem met $N = 64\,000$ deeltjes. Op $t_h = 0$ wordt een extern veld h aangelegd met grootte 10 Oe. Er werd een wachttijd t_w van 100 s (groen), 1000 s (rood) of 10 000 s (blauw) gebruikt.



Figuur 2.12: Experimentele $S(t)$ -curves voor $h = 2$ Oe als functie van de verhouding $\frac{k_B T}{E_{\text{dip}}}$: 15/28 (a), 25/28 (b) en 35/28 (c). In (d) is de verhouding gelijk aan 400: het systeem is zwak-interagerend en vertoont geen *aging*. De figuur werd overgenomen uit [13].

Wanneer een maximum in de $S(t)$ -curve waargenomen wordt, zoals in Figuur 2.12(b), wordt dit geïnterpreteerd aan de hand van het *droplet model* van Fisher en Huse [15]. In dit model wordt aangenomen dat er onder T_g een tweevoudig ontaarde grondtoestand bestaat: Γ en $\bar{\Gamma}$, die in elkaar omgezet kunnen worden door ompoling van alle macrospins (Figuur 2.13).



Figuur 2.13: *Droplet* van lengteschaal L . De macrospins binnen de *droplet*, zoals x_j , zijn georiënteerd volgens grondtoestand $\bar{\Gamma}$, de macrospins buiten de *droplet* volgens grondtoestand Γ . De figuur werd overgenomen van Fisher en Huse [15].

Gedurende de wachttijd zal het systeem zijn energie verlagen door de domeinmuren tussen Γ en $\bar{\Gamma}$ te minimaliseren: zowel de Γ - als de $\bar{\Gamma}$ -gebieden (de *droplets*) worden groter. De karakteristieke lengteschaal van de *droplets* R is een functie van de tijd t en is na een tijd $t_a = t + t_w$ gelijk aan [14]:

$$R(t_a) = [T \ln(t_a/\tau_0)/\Delta(T)]^{1/\psi}. \quad (2.26)$$

In bovenstaande vergelijking is τ_0 de microscopische ompooltijd, $\Delta(T)$ een maat voor de vrije energie van de barrière en ψ de barrière-exponent.

Wanneer het externe veld h wordt aangelegd, wordt het systeem onderzocht via de polarisatie van de *droplets* die groeien volgens [14]

$$L(t) = [T \ln(t/\tau_0)/\Delta(T)]^{1/\psi}. \quad (2.27)$$

Als $t \ll t_w$, is $L(t) \ll R(t_a)$: de onderzochte lengteschaal omvat geen domeinmuren, de *droplets* zijn in evenwicht. Als $t \gg t_w$, is $L(t) \approx R(t_a)$: de onderzochte lengteschaal omvat domeinmuren, de *droplets* zijn niet in evenwicht. De overgang tussen beide regimes uit zich in een maximum in de $S(t)$ -curve rond t_w [14].

2.4.3 Conclusie

We hebben zwak- en sterk-interagerende systemen besproken. Door de afstand tussen de macrospins oneindig groot te nemen, konden de zwak-interagerende opgevat worden als niet-interagerende systemen en was het mogelijk om een theoretisch model op te stellen voor de $S(t)$ -curve (Figuur 2.6). Bij de sterk-interagerende systemen waren de $S(t)$ -curves afhankelijk van de gebruikte wachttijd t_w (*aging*) maar ze vertoonden geen maximum rond hun respectievelijke wachttijden (Figuur 2.11).

2.5 Thermodynamica: aantal ompolingen per macrospin

We onderzoeken in deze sectie een theoretisch model dat voorspelt hoe vaak een bepaalde macrospin zal ompolen (relatief ten opzichte van de andere macrospins) in afwezigheid van een extern veld. Hiervoor onderzoeken we eerst de energieniveaus van een macrospinsysteem (Sectie 2.5.1), daarna bestuderen we de overgangen tussen deze niveaus (Sectie 2.5.2).

2.5.1 Energieniveaus

We onderzoeken de verschillende energieniveaus van een macrospinsysteem door na te gaan of er aan de wet van Boltzmann voldaan is:

$$t_E = \frac{N_E \exp(-E/k_B T)}{\sum_E N_E \exp(-E/k_B T)} \quad (2.28)$$

$$\sum_E N_E = 2^N, \quad (2.29)$$

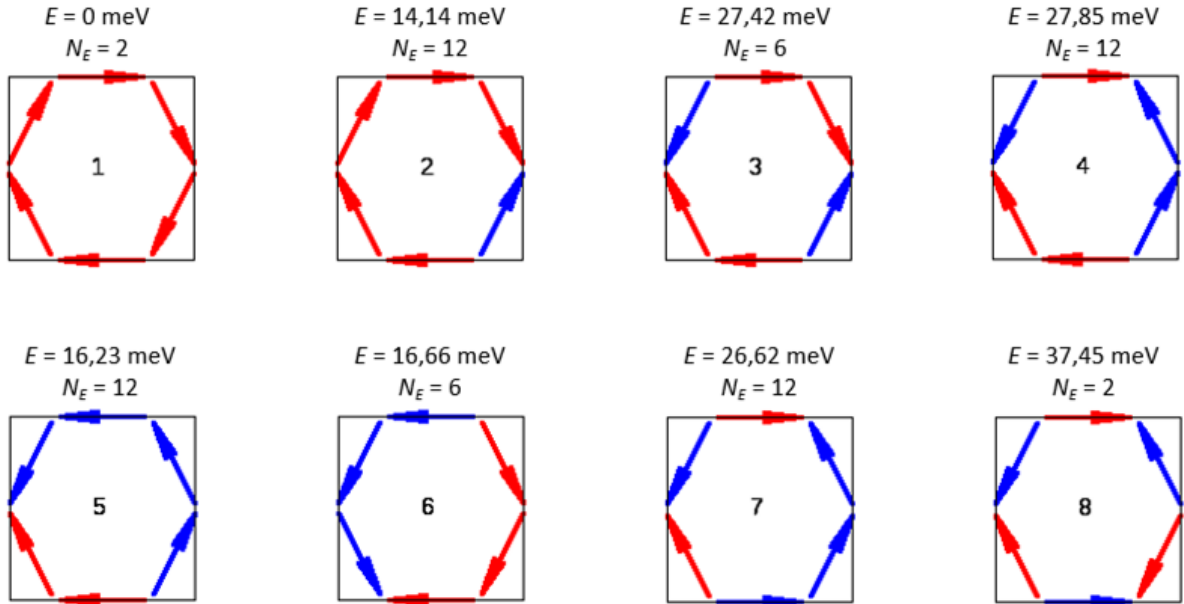
met t_E de fractie van de tijd (dit is de waarschijnlijkheid) dat een systeem met N deeltjes zich in een toestand bevindt met energie E en ontaarding N_E .

Voor de eenvoud beschouwen we een systeem dat bestaat uit zes macrospins die zich bevinden op een zeshoekig rooster, waarbij de afstand R tussen twee naburige macrospins 90 nm bedraagt. Zo'n systeem heeft acht energieniveaus. In Figuur 2.14 wordt van ieder niveau een voorbeeldconfiguratie getoond, alsook de ontaarding van elk niveau. De energie E kan men berekenen met

$$E = -\frac{1}{2} M_{\text{sat}} V \sum_{i=1}^{N=6} \mathbf{e}_{\mathbf{m}i} \cdot \mathbf{B}_{\text{dip},i} + \text{const}, \quad (2.30)$$

waarbij de constante zo gekozen wordt dat de grondtoestand $E = 0$ meV heeft.

Formules (2.28) en (2.29) hebben drie variabelen: t_E , E en N_E . Indien er twee gekend zijn, kan de derde berekend worden en vergeleken met een numeriek resultaat.



Figuur 2.14: Voorbeeldconfiguratie van elk niveau, met bijhorende energie E en ontaarding N_E .

E en N_E gekend

Voor ons eenvoudig systeem is het mogelijk om voor elk niveau de energie E en de ontaarding N_E te bepalen (zie Figuur 2.14). Via Formule (2.28) kan nu de fractie van de tijd dat het systeem doorbrengt in een toestand met energie E , berekend worden: $t_{E,\text{theor}}$. Deze waarde kan dan vergeleken worden met het numeriek resultaat dat volgt na een simulatie met onze code: $t_{E,\text{num}}$. We doen dit bij een temperatuur $T = 30$ K (Tabel 2.2) en $T = 60$ K (Tabel 2.3). De afwijkingen bedragen maximaal 3 procent.

Tabel 2.2: Vergelijking tussen $t_{E,\text{num}}$ en $t_{E,\text{theor}}$ bij $T = 30$ K.

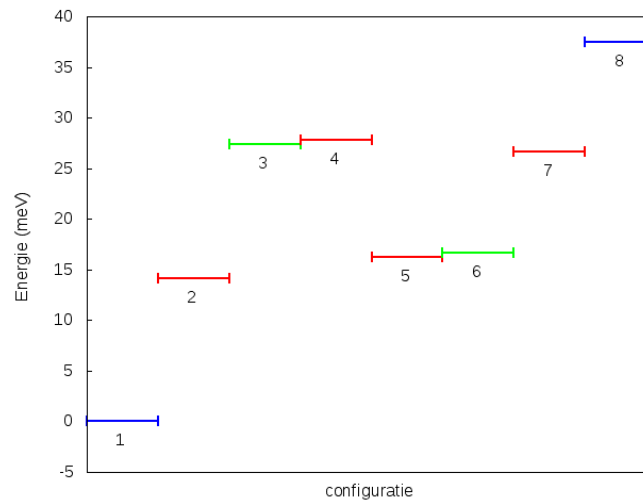
Configuratie	$t_{E,\text{num}}$	$t_{E,\text{theor}}$	Afwijking (%)
1	0,9604	0,9599	0,05
2	0,0240	0,0243	1,18
3	0,00007	0,00007	0,31
4	0,0001	0,0001	1,56
5	0,0107	0,0108	1,23
6	0,0045	0,0046	2,12
7	0,0002	0,0002	1,83
8	0,0000005	0,0000005	2,69

Tabel 2.3: Vergelijking tussen $t_{E,\text{num}}$ en $t_{E,\text{theor}}$ bij $T = 60$ K.

Configuratie	$t_{E,\text{num}}$	$t_{E,\text{theor}}$	Afwijking (%)
1	0,5424	0,5412	0,22
2	0,2102	0,2109	0,36
3	0,0081	0,0081	0,52
4	0,0149	0,0149	0,05
5	0,1406	0,1409	0,17
6	0,0646	0,0648	0,38
7	0,0189	0,0189	0,12
8	0,0004	0,0004	1,10

E en t_E gekend

We bepalen de energie E van de acht niveaus en via een simulatie kennen we ook de fractie van de tijd t_E dat het systeem doorbracht in ieder niveau. De ontarding N_E kan nu berekend worden met Vergelijking (2.28) en (2.29). Uit Figuur 2.15 blijkt dat we dezelfde waarden als die uit Figuur 2.14 bekomen. Voor complexere systemen, waarvan de ontarding van de verschillende energieniveaus niet langer manueel geteld kan worden, biedt deze methode een manier om de ontarding toch te bepalen.



Figuur 2.15: Energie E en ontarding N_E (blauw=2, groen=6, rood=12) voor de acht energieniveaus. Er is een overeenkomst met Figuur 2.14.

2.5.2 Overgangen tussen energieniveaus

In deze sectie onderzoeken we de mogelijke overgangen en bijhorende kansen om van het ene naar het andere energieniveau over te gaan. We zullen dit doen voor het zeshoek-systeem van Sectie 2.5.1. Dit systeem bestond uit zes deeltjes (die we zullen labelen met index k) en had acht niveaus (die we zullen labelen met indices i en j).

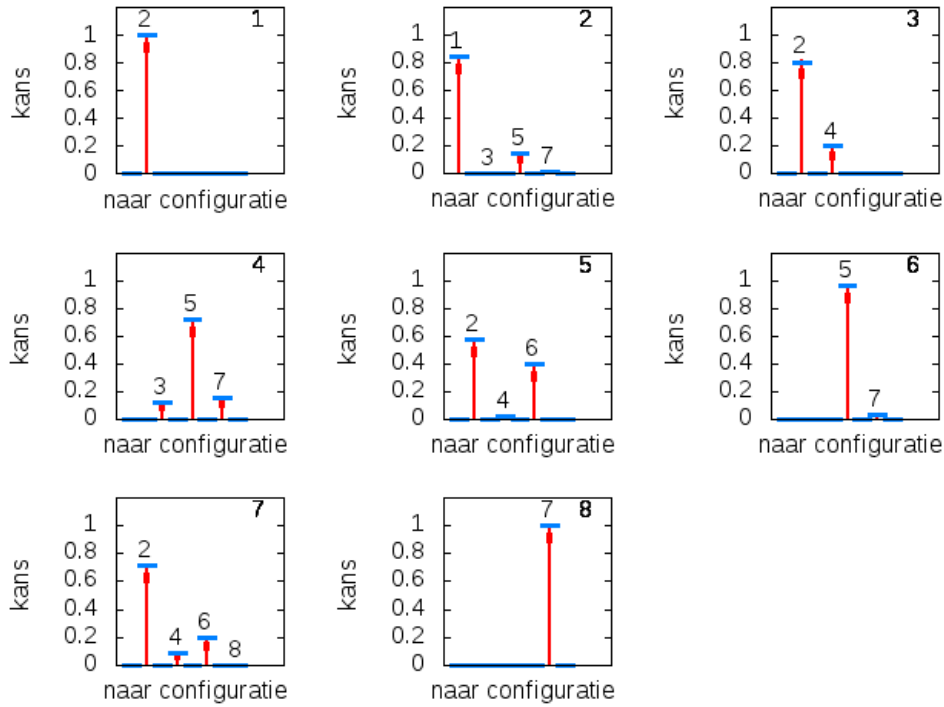
De vraag die we moeten beantwoorden is: Kan men door ompoling van macrospin k van niveau i naar niveau j overgaan? En zo ja, wat is de kans $P_{i \rightarrow j}(k)$? Er dienen hiervoor twee aspecten in rekening te worden gebracht:

1. N_{ij} : het aantal macrospins k die kunnen ompolen zodat $i \rightarrow j$.
2. $\Delta E_{\text{bar}, i \rightarrow j}$: de energiebarrière die overwonnen moet worden om $i \rightarrow j$.

N_{ij} kan men voor het eenvoudig zeshoek-systeem tellen, op dezelfde wijze als men ook de ontaardingen kan tellen. Voor iedere $N_{ij} \neq 0$ kan vervolgens $\Delta E_{\text{bar},i \rightarrow j}$ berekend worden. De (theoretische) kansen $P_{i \rightarrow j}$ volgen dan uit

$$P_{i \rightarrow j} = \frac{N_{ij} \exp(-\Delta E_{\text{bar},i \rightarrow j}/k_B T)}{\sum_j N_{ij} \exp(-\Delta E_{\text{bar},i \rightarrow j}/k_B T)}. \quad (2.31)$$

Via een simulatie kunnen de kansen $P_{i \rightarrow j}$ bepaald worden. Er is een duidelijke overeenkomst tussen de theoretisch en de numeriek bepaalde kansen $P_{i \rightarrow j}$, zoals getoond in Figuur 2.16.



Figuur 2.16: Kansen $P_{i \rightarrow j}$ om van energieniveau i (cijfer rechtsboven) naar een configuratie van niveau j te gaan. Blauwe lijn: theoretisch via Vergelijking (2.31). Rode pijl: numeriek.

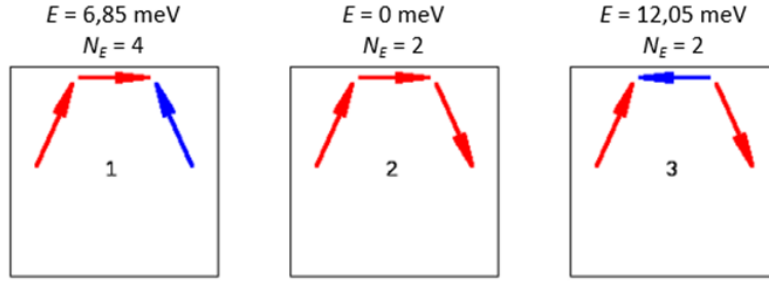
2.5.3 Theoretisch model

De resultaten uit Sectie 2.5.2 kunnen nu gebruikt worden bij het opstellen van een theoretisch model dat voorspelt hoe vaak een macrospin k zal ompolen (relatief ten opzichte van de andere macrospins). We noteren deze grootte als $F(k)$ en er geldt dat:

$$F(k) = \sum_{ij} A_i P_{i \rightarrow j}(k), \quad (2.32)$$

met $P_{i \rightarrow j}(k)$ de kans dat het systeem van niveau i naar niveau j overgaat door het ompolen van macrospin k , en met A_i het procentueel aantal keer dat energieniveau i bezocht wordt tijdens een simulatie.

A_i kan op twee manieren bepaald worden. We zullen dit illustreren aan de hand van een macrospinsysteem dat bestaat uit drie deeltjes (een halve zeshoek). Zo'n systeem heeft drie energieniveaus: $i = 1, 2$ of 3 (zie Figuur 2.17).



Figuur 2.17: Voorbeeldconfiguratie van elk niveau, met bijhorende energie E en ontarding N_E .

Methode 1

Vergelijking (2.28) laat toe om de fractie van de tijd dat het systeem doorbrengt in niveau i te berekenen. Als we dit vermenigvuldigen met de totale simulatietijd, dan weten we hoe lang het systeem doorgebracht heeft in dit niveau: $t_{\text{abs,tot}}^i$. Deze tijd kan ook geschreven worden als

$$t_{\text{abs,tot}}^i = n \frac{1}{n} (t_{s,1}^i + \dots + t_{s,n}^i) = A_{\text{abs},i} \overline{t_{\text{abs}}^i}.$$

$A_{\text{abs},i}$ is het absoluut aantal keer dat niveau i bezocht wordt tijdens een simulatie. Om $A_{(\text{abs},)i}$ te bepalen, moet de gemiddelde tijd $\overline{t_{\text{abs}}^i}$ die wordt doorgebracht in niveau i echter gekend zijn. Dit is een niet-triviaal probleem. Daarom zal A_i bepaald worden via methode 2.

Methode 2

Er gelden volgende evenwichtsvergelijkingen (naar niveau i = uit niveau i):

$$\begin{aligned} A_1 P_{1 \rightarrow 1} + A_2 P_{2 \rightarrow 1} + A_3 P_{3 \rightarrow 1} &= A_1 P_{1 \rightarrow 1} + A_1 P_{1 \rightarrow 2} + A_1 P_{1 \rightarrow 3} = A_1 \\ A_1 P_{1 \rightarrow 2} + A_2 P_{2 \rightarrow 2} + A_3 P_{3 \rightarrow 2} &= A_2 P_{2 \rightarrow 1} + A_2 P_{2 \rightarrow 2} + A_2 P_{2 \rightarrow 3} = A_2 \quad \text{of} \quad \mathbf{P}(\mathbf{A}) = \mathbf{A}. \\ A_1 P_{1 \rightarrow 3} + A_2 P_{2 \rightarrow 3} + A_3 P_{3 \rightarrow 3} &= A_3 P_{3 \rightarrow 1} + A_3 P_{3 \rightarrow 2} + A_3 P_{3 \rightarrow 3} = A_3 \end{aligned}$$

Uit bovenstaande eigenwaardevergelijking kan $\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3)^T$, met $A_1 + A_2 + A_3 = 1$ opgelost worden aangezien de kansen $P_{i \rightarrow j}$ gekend zijn (zie Formule (2.31)).

Voor het beschouwde systeem is

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0,2370 & 0,8900 & 0,4122 \\ 0,7020 & 0 & 0,5878 \\ 0,0610 & 0,1100 & 0 \end{pmatrix} \text{ en dus } A = \begin{pmatrix} 0,5163 \\ 0,4073 \\ 0,0763 \end{pmatrix}.$$

Met de waarde van A kan nu $F(k)$, het procentueel aantal keer dat macrospin k ompoolt, berekend worden. We geven het middelste deeltje index $k = 2$ mee zodat:

$$\begin{aligned} F(1) &= \frac{1}{2} [A_1(P_{12} + P_{13}) + A_2P_{21} + A_3P_{31}] = 0,3940 \\ F(2) &= A_1P_{11} + A_2P_{23} + A_3P_{32} = 0,2121 \\ F(3) &= \frac{1}{2} [A_1(P_{12} + P_{13}) + A_2P_{21} + A_3P_{31}] = 0,3940 \end{aligned}$$

Met andere woorden: als deeltje $k = 2$ één keer is omgepoold, dan zijn (equivalente) deeltjes $k = 1$ en $k = 3$ elk 1,857 keer omgepoold (zie Figuur 2.19).

Besluit

Met Formule (2.32) kan $F(k)$ berekend worden. De volgende twee parameters moeten hiervoor gekend zijn: de overgangswaarschijnlijkheden $P_{i \rightarrow j}(k)$ en het procentueel aantal keer A_i dat energieniveau i bezocht wordt. Maar aangezien A_i via de eigenwaardevergelijking berekend kan worden met kennis van $\mathbf{P}$, is het berekenen van $F(k)$ volledig herleid tot de bepaling van $\mathbf{P}$.

In Sectie 2.5.2 hebben we voor een eenvoudig zeshoek-systeem $P_{i \rightarrow j}$ theoretisch berekend en de overeenkomst aangetoond met de numerieke waarde (Figuur 2.16). Omdat voor grotere, asymmetrische systemen de theoretische berekening van $P_{i \rightarrow j}$ te complex wordt (N_{ij} kan dan niet langer geteld worden), zullen we in het vervolg steeds werken met de numerieke waarden. Ook A_i zullen we numeriek bepalen, vermits het oplossen van een eigenwaardevergelijking te tijdrovend is voor een grote $\mathbf{P}$ -matrix.

2.5.4 Resultaten

Tot slot gaan we voor verschillende macrospinsystemen na of de numerieke gevonden $F(k)_{\text{num}}$ gelijk is aan de theoretische voorspelling $F(k)_{\text{theor}}$. Met $F(k)_{\text{theor}}$ bedoelen we de waarde die we vinden aan de hand van Formule (2.32), waarbij we opmerken dat A_i en $P_{i \rightarrow j}$ numeriek bepaald zijn. Zelfs voor ogenschijnlijk eenvoudige systemen wordt een analytische berekening van $F(k)_{\text{theor}}$ immers al snel zeer omslachtig en moet men teruggrijpen naar numerieke resultaten.

De resultaten staan opgelijst in Tabel 2.4 en tonen een overeenkomst tussen $F(k)_{\text{num}}$ en $F(k)_{\text{theor}}$. Er is steeds gewerkt met een afstand R (tussen twee naburige macrospins) van 90 nm en een totaal aantal ompolingen van 10^7 .

Om de fout op $F(k)_{\text{theor}}$ te beperken, moet tijdens een simulatie de hele faseruimte van het systeem bezocht worden. Het totaal aantal ompolingen moet dus enkele grootte-orde groter zijn dan 2^N , het aantal configuraties van een systeem met N deeltjes. De systemen van Figuur 2.23 en Figuur 2.24, die respectievelijk uit 29 en 30 macrospins bestaan, voldoen niet aan deze voorwaarde en worden in dat opzicht niet vermeld in Tabel 2.4. Een ander probleem voor zulke (grote) systemen is bovendien de beperkte geheugencapaciteit om $P_{i \rightarrow j}$ op te slaan bij de bepaling van $F(k)_{\text{theor}}$.

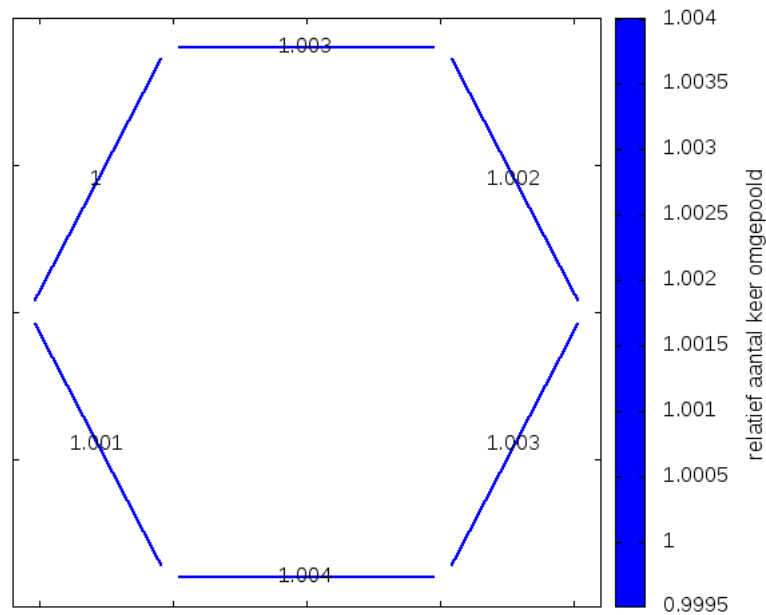
Behalve de overeenkomst tussen $F(k)_{\text{num}}$ en $F(k)_{\text{theor}}$ stellen we volgende zaken vast:

1. Wegens de symmetrie van de systemen zijn een aantal macrospins equivalent. We verwachten dat die macrospins even vaak zullen ompolen. In het zeshoek-systeem (Figuur 2.18) bijvoorbeeld zou het onfysisch zijn mocht een bepaalde macrospin opvallend meer of minder ompolen dan de andere macrospins. We zien deze symmetrie ook terug in onze resultaten. Daarom kunnen we de deeltjes van een systeem onderverdelen in types en hoeven we per type slechts één k in de tabel te vermelden om de dynamica van het hele systeem te beschrijven.
2. De onderverdeling in types is niet mogelijk voor asymmetrische systemen. Hoewel het systeem van Figuur 2.23 amper één macrospin minder heeft dan het systeem van Figuur 2.24, is de invloed van deze ontbrekende macrospin duidelijk zichtbaar. De centraal gelegen macrospins polen in het algemeen nog steeds vaker om dan de macrospins aan de randen, maar door de symmetriebreking is er een aanzienlijk verschil tussen de exacte waarden van Figuur 2.23 en van Figuur 2.24.
3. Aansluitend bij de vorige opmerking, kunnen we stellen dat kleine wijzigingen in de geometrie van het systeem leiden tot andere ompoolaantallen. Zo hebben het systeem van Figuur 2.19 en dat van Figuur 2.20 elk drie macrospins en verschillen ze enkel door de positie van de derde macrospin en door de oriëntatie van diens anisotropie-as. Toch polen de buitenste macrospins uit Figuur 2.19 ten opzichte van de centrale macrospin vaker om dan die uit Figuur 2.20: 1,858 versus 1,817.

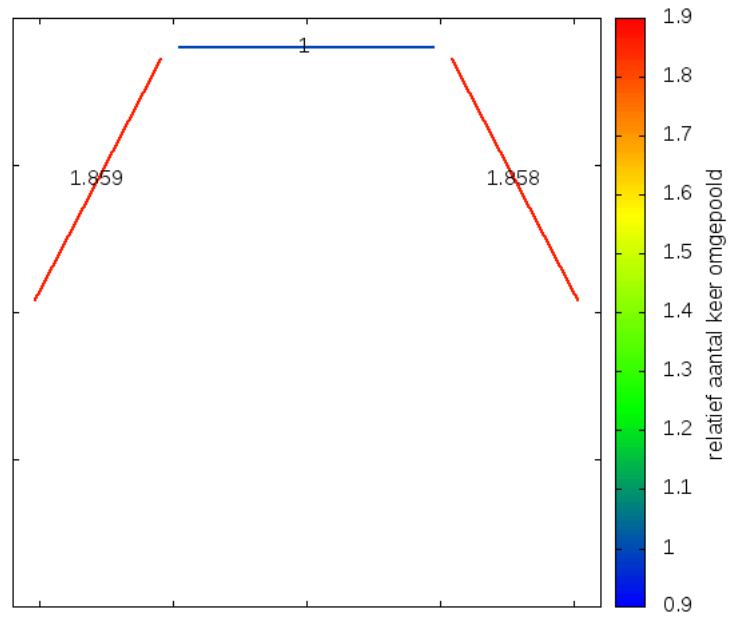
Bovenstaande vaststelling betekent ook dat het in principe mogelijk is om de geometrie van het systeem zo te kiezen dat een gewenste eigenschap of functionaliteit gerealiseerd wordt. We gaan dit inzicht gebruiken in het volgende hoofdstuk wanneer we logische poorten ontwerpen (Sectie 3.2 en Sectie 3.3).

Tabel 2.4: Vergelijking tussen de numeriek en theoretisch bepaalde $F(k)$. Wegens de symmetrie van de systemen zijn een aantal macrospins equivalent. De deeltjes van een systeem kunnen zo onderverdeeld worden in types. Elk type heeft een eigen kleur die overeenkomt met de figuur van het desbetreffende systeem.

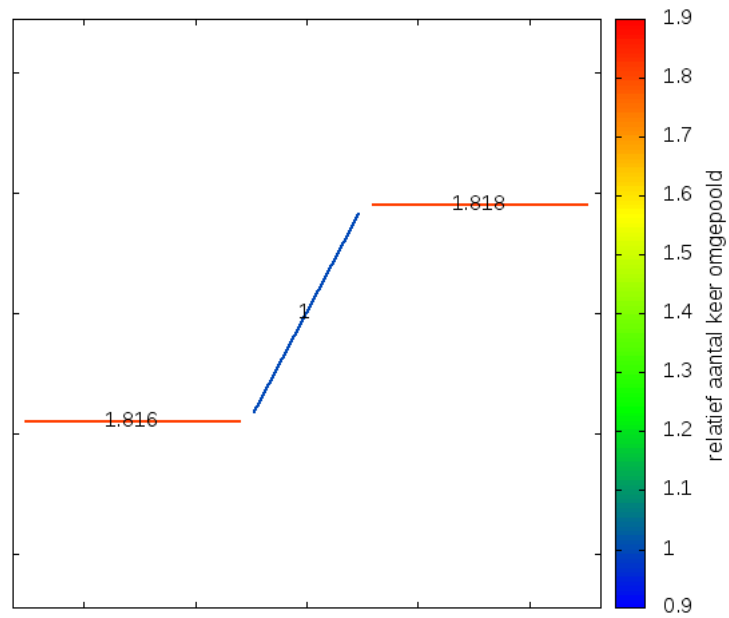
Systeem	Type deeltje k	$F(k)_{\text{num}}$	$F(k)_{\text{theor}}$	$\text{SF}(F(k)_{\text{num}})$
Fig 2.18	1	0,1668	0,1667	0,0002
Fig 2.19	1	0,3940	0,3940	0,0002
	2	0,2121	0,2121	0,0002
Fig 2.20	1	0,3922	0,3921	0,0002
	2	0,2158	0,2158	0,0002
Fig 2.21	1	0,0499	0,0498	0,0001
	2	0,1449	0,1446	0,0002
	3	0,1302	0,1302	0,0002
	6	0,0460	0,0460	0,0001
Fig 2.22	1	0,0289	0,0290	0,0001
	2	0,0781	0,0781	0,0001
	3	0,1190	0,1192	0,0001
Fig 2.23 en Fig 2.24 tonen de invloed van een missende macrospin.				



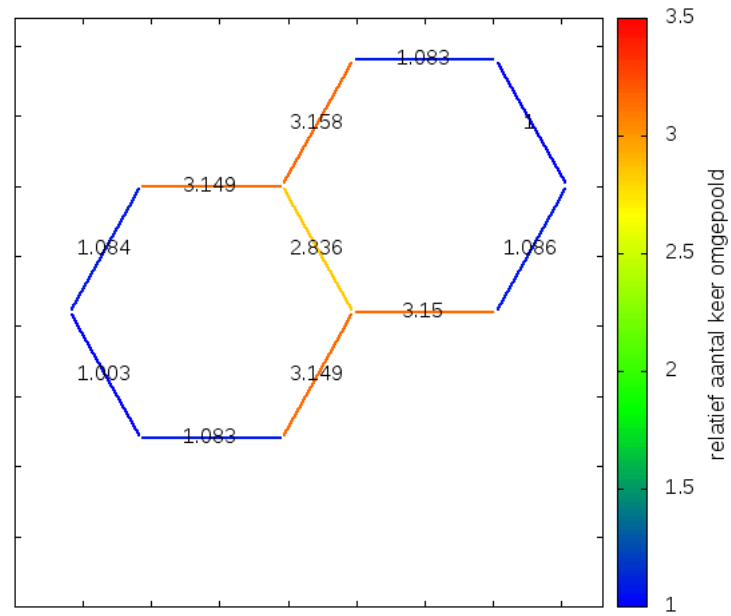
Figuur 2.18: Relatief aantal keer omgepoold, waarbij de macrospin met het minst aantal ompolingen genormeerd werd op 1. Deze waarden kunnen eenvoudig omgezet worden naar $F(k)_{\text{num}}$.



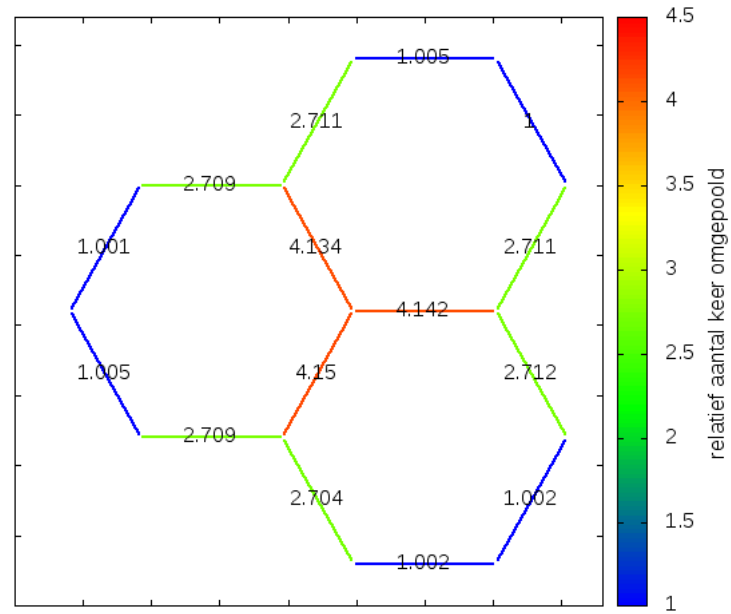
Figuur 2.19: Relatief aantal keer omgepoold, waarbij de macrospin met het minst aantal ompolingen genormeerd werd op 1. Deze waarden kunnen eenvoudig omgezet worden naar $F(k)_{\text{num}}$.



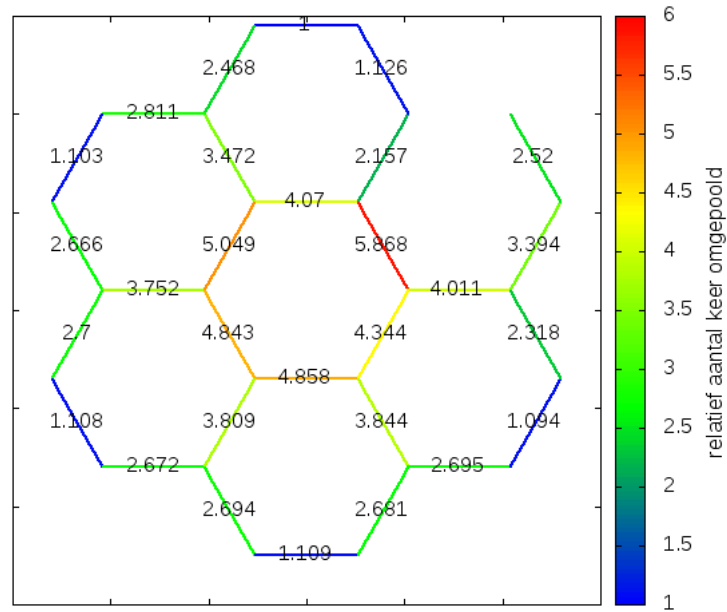
Figuur 2.20: Relatief aantal keer omgepoold, waarbij de macrospin met het minst aantal ompolingen genormeerd werd op 1. Deze waarden kunnen eenvoudig omgezet worden naar $F(k)_{\text{num}}$.



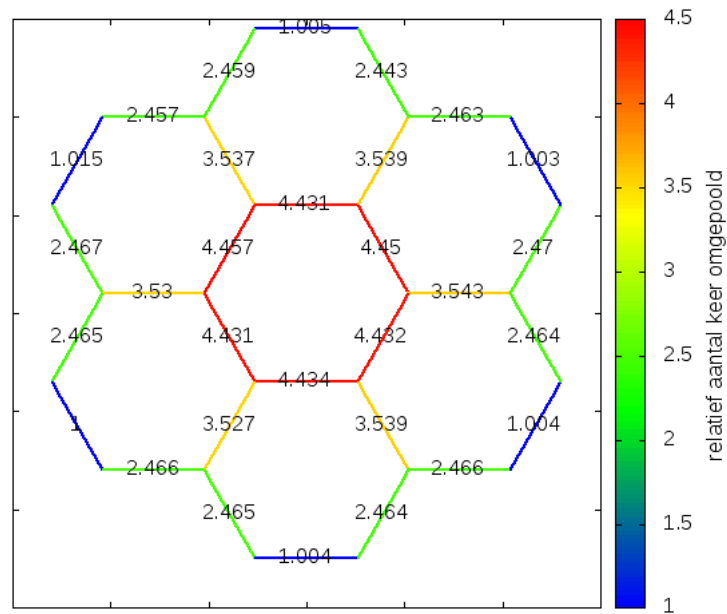
Figuur 2.21: Relatief aantal keer omgepoold, waarbij de macrospin met het minst aantal ompolingen genormeerd werd op 1. Deze waarden kunnen eenvoudig omgezet worden naar $F(k)_{\text{num}}$.



Figuur 2.22: Relatief aantal keer omgepoold, waarbij de macrospin met het minst aantal ompolingen genormeerd werd op 1. Deze waarden kunnen eenvoudig omgezet worden naar $F(k)_{\text{num}}$.



Figuur 2.23: Relatief aantal keer omgepoold, waarbij de macrospin met het minst aantal ompolingen genormeerd werd op 1. Deze waarden kunnen eenvoudig omgezet worden naar $F(k)_{\text{num}}$.



Figuur 2.24: Relatief aantal keer omgepoold, waarbij de macrospin met het minst aantal ompolingen genormeerd werd op 1. Deze waarden kunnen eenvoudig omgezet worden naar $F(k)_{\text{num}}$.

Hoofdstuk 3

Magnetische logica

In het voorgaande hoofdstuk hebben we magnetische systemen op een fysisch correcte en numeriek efficiënte manier gemodelleerd. In dit hoofdstuk onderzoeken we de mogelijkheden van *Nanomagnetic Logic* (NML): hoe kunnen magnetische netwerken gebruikt worden als logische componenten. Hierbij maken we een onderscheid tussen deterministische logica, die we aan de hand van een literatuurstudie in Sectie 3.1 bespreken, en stochastische logica. Deze laatste vorm, die uitgebreid besproken wordt in Sectie 3.2 en Sectie 3.3, hebben we zelf ontwikkeld en kan beschouwd worden als alternatief voor de deterministische logica.

3.1 Deterministische logica

Deterministische logica werd reeds door verschillende onderzoeksgroepen onderzocht [17]-[25]. Het onderzoek wordt gestimuleerd door de voordelen die NML biedt in vergelijking met een klassieke CMOS¹ waarvan de werking gebaseerd is op het transport van elektronen.

Ten eerste is NML niet-volatiel. Dit betekent dat er geen vermogen nodig is om de informatie (de zin van het magnetisch moment $\mathbf{e}_m$) te behouden. Bij een CMOS moet men daarentegen wel een energie-aanvoer voorzien om te vermijden dat elektronen kunnen weglekken, zelfs wanneer de CMOS geen berekening uitvoert. Men spreekt van statische dissipatie [17].

Ten tweede is de dynamische dissipatie per oppervlakte-eenheid bij NML lager dan bij een CMOS. Lambson et al. [18] hebben aangetoond dat dit verschil in theorie zo'n zes grootte-orde kan bedragen. Een berekening van Niemier et al. [19] leert dat voor een specifiek systeem en bij een *clock frequency*² van 100 MHz er een energiewinst tot drie grootte-orde gehaald kan worden.

¹*Complementary Metal Oxide Semiconductor*. Meer informatie hierover kan gevonden worden in [16].

²Zie Sectie 3.1.1.

3.1.1 Werking

We beschouwen een systeem waarbij de *easy axis* van alle macrospins volgens dezelfde richting ligt. Het systeem wordt in een metastabiele toestand gebracht door het aanleggen van een (voldoende sterk) extern veld $\mathbf{H}_{\text{ext}}$: alle macrospins zijn nu gemagnetiseerd volgens hun *hard axis*. Vervolgens wordt het veld weggenomen³. Een ingang-macrospin wordt opnieuw gemagnetiseerd volgens zijn *easy axis*⁴, hetzij parallel (bit-waarde 1) hetzij antiparallel (bit-waarde 0). De toestand van het systeem wordt hierdoor instabiel. Er ontstaat een domino-effect waarbij eerst de burens van de ingang-macrospin onder invloed van het dipool-veld zullen ‘ompolen’ van de *hard* naar de *easy axis* en waarbij vervolgens de burens van de burens zullen ‘ompolen’ ... tot ook de uitgang-macrospin weer gemagnetiseerd is volgens de *easy axis* en de gewenste bit-waarde uitgelezen kan worden⁵.

Het systeem bevindt zich op het einde van bovenstaand proces in een stabiele toestand (alle dominostenen zijn omgevallen). Als men de schakeling wil testen voor een andere input, moet het systeem eerst weer in de metastabiele toestand gebracht worden door middel van het externe veld $\mathbf{H}_{\text{ext}}$ (de dominostenen moeten weer rechtgezet worden). Men noemt dit *clocking*. De frequentie waarmee het veld aangezet kan worden, is de *clock frequency*.

Voor technologische toepassingen is het van belang dat het externe veld lokaal gegenereerd kan worden (*on-chip*). Men kan dit onder andere doen via *on-chip*-stromen of via de sterke lokale velden die met een domeinmuur gepaard gaan [17].

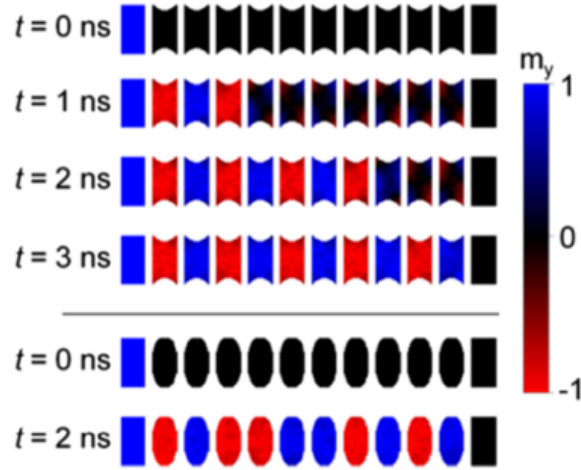
De logica die met *clocking* gerealiseerd wordt, is deterministisch. Men kent immers de volgorde waarin de macrospins ‘ompolen’ en men weet hoe hun magnetisch moment na ‘ompoling’ georiënteerd zal zijn (men kan voorspellen wanneer en hoe de dominostenen zullen omvallen). Het is echter mogelijk dat een macrospin te vroeg ‘ompoolt’ door lithografische onregelmatigheden of door thermische fluctuaties. Hierdoor gaat het deterministische karakter verloren en functioneert de schakeling niet langer zoals het hoort. Hoe meer macrospins het systeem bevat, hoe groter deze kans. Men kan dit probleem beperken door gebruik te maken van macrospins met een concave vorm (i.p.v. een ellipsoïdale) of met biaxiale anisotropie⁶ (i.p.v. uniaxiale). Beiden verhogen de stabiliteit van de *hard axis*-richting waardoor het minder waarschijnlijk wordt dat een macrospin ongewild ‘ompoolt’ [20, 21] (zie Figuur 3.1 en 3.2).

³Indien het veld adiabatisch wordt weggenomen, dit wil zeggen op een tijdschaal die veel langer is dan de magnetische relaxatietijd, is de energiedissipatie minder groot [21, 22, 23].

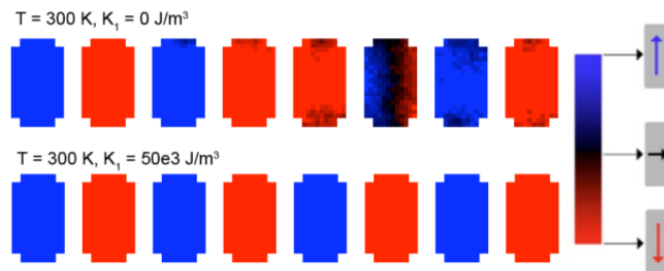
⁴Men kan dit doen via *spin-transfer-torque* (STT), waarbij de ingang-macrospin fungeert als vrije laag van de STT-stack [17]. Meer uitleg over STT kan gevonden worden in [8].

⁵Men kan dit doen via een *magneto-resistance measurement* (MRM), waarbij de uitgang-macrospin fungeert als de vrije laag van een magnetische tunneljunctie [17]. Meer uitleg over MRM kan gevonden worden in [8].

⁶De biaxiale anisotropie-energie $E_{\text{anis}}^{\text{biax}}$ is gelijk aan $E_{\text{anis}}^{\text{biax}}(\epsilon) = K_u V \cos^2(\epsilon) + \frac{1}{4} K_1 V \sin^2(2\epsilon)$, waarbij ϵ de hoek is tussen de *hard axis* en de magnetisch moment $\mathbf{m}$ en K_1 de biaxiale anisotropie-constante.



Figuur 3.1: Micromagnetische simulatie die toont hoe de informatie beter wordt door gegeven in een verbinding van concave macrospins (boven) dan in een verbinding van ellipsoïdale macrospins (onder). De figuur werd overgenomen uit [20].



Figuur 3.2: Micromagnetische simulatie die toont hoe de informatie beter wordt door gegeven in een verbinding van macrospins met biaxiale anisotropie (onder) dan in een verbinding van macrospins zonder biaxiale anisotropie (boven). K_1 is de biaxiale anisotropie-constante. De figuur werd overgenomen uit [21].

3.1.2 Verbindingen

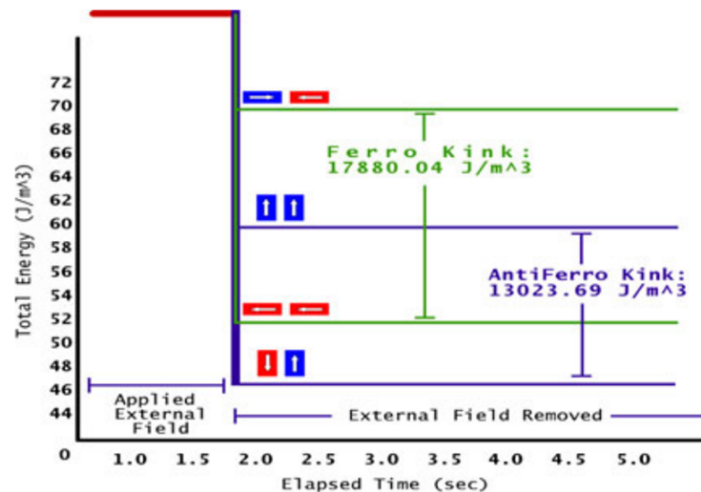
Om de informatie van een poort door te geven aan de ingang van een volgende poort, zijn er verbindingen nodig. Er zijn twee soorten verbindingen: de ferromagnetische en de antiferromagnetische.

Bij de ferromagnetische verbinding ligt de *easy axis* van elke macrospin in het verlengde van de vorige. Door de dipool-interactie zijn de macrospins ferromagnetisch gekoppeld: de informatie wordt doorgegeven als $\leftarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow$ of $\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rightarrow$. Iedere macrospin heeft dus dezelfde bit-waarde.

Bij de antiferromagnetische verbinding ligt de *easy axis* van elke macrospin naast de vorige. Door de dipool-interactie zijn de macrospins antiferromagnetisch gekoppeld: de informatie wordt doorgegeven als $\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$ of $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$. Iedere macrospin heeft dus een andere bit-waarde dan zijn buur, waardoor de antiferromagnetische verbinding ook gebruikt kan worden als NOT-poort.

Pulecio et al. [24] stellen dat voor een lange verbinding, dit is een verbinding die bestaat uit relatief veel macrospins, het ferromagnetische model beter geschikt is dan het antiferromagnetische. Bij de ferromagnetische verbinding is de waarschijnlijkheid dat twee macrospins verkeerd gekoppeld zijn immers kleiner door de hogere kink-energie (Figuur 3.3). De kink-energie E_{kink} is gedefinieerd als het energieverval tussen de metastabiele toestand (met verkeerde koppeling) en de grondtoestand: $E_{\text{kink}} = E_{\text{ms}} - E_{\text{grond}}$.

De onderzoekers sluiten echter niet uit dat men in bepaalde gevallen beter de antiferromagnetische verbinding kan gebruiken, eventueel in combinatie met de ferromagnetische verbinding.



Figuur 3.3: De kink-energie E_{kink} is groter bij een ferromagnetische verbinding dan bij een antiferromagnetische verbinding. De figuur werd overgenomen uit [24].

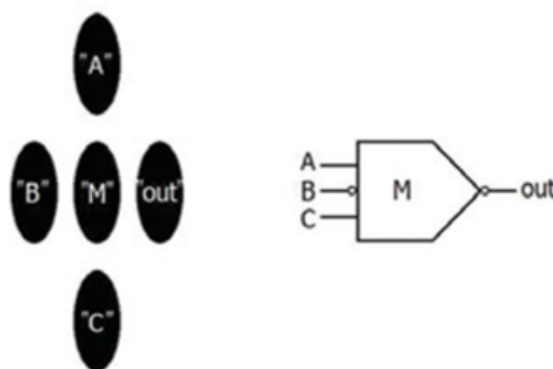
3.1.3 Majority-poort

De *majority*-poort (Figuur 3.4) vormt de basis voor schakelingen die werken volgens het principe van Sectie 3.1.1. De poort heeft drie ingang-macrospins (A, B en C) en één uitgang-macrospin (out). De macrospin in het midden (M) verbindt de ingangen met de uitgang. De *majority*-poort kan in feite beschouwd worden als een ferro- en een antiferromagnetische verbinding die elkaar snijden.

De waarheidstabel van de poort staat in Tabel 3.1: de uitgang heeft bit-waarde 0 (1) als de meerderheid van de ingang-macrospins bit-waarde 0 (1) heeft. De *majority*-poort kan ook als AND-poort (OR-poort) gebruikt worden door bijvoorbeeld ingang-macrospin A op 0 (1) te fixeren.

Tabel 3.1: *Majority*-poort.

ABC	M	Uitgang
0 0 0	1	0
0 0 1	1	0
0 1 0	1	0
0 1 1	0	1
1 0 0	1	0
1 0 1	0	1
1 1 0	0	1
1 1 1	0	1



Figuur 3.4: De *majority*-poort. De figuur werd overgenomen uit [17].

De werking van de *majority*-poort werd bij kamertemperatuur experimenteel gerealiseerd door Imre et al. [25]. Ze gebruikten echter een extern gegenereerd veld $\mathbf{H}_{\text{ext}}$ (dus niet *on-chip*) en lazen de output af via MFM⁷.

Wanneer de *majority*-poort een onderdeel van een schakeling is, is het noodzakelijk dat de drie ingang-signalen synchroon aankomen. Als één van de ingang-macrospins eerder ‘ompoolt’, bepaalt die in zijn eentje de output. Het gedrag van de *majority*-poort (en dus van de hele schakeling) wordt onvoorspelbaar en het vooropgestelde deterministische karakter gaat verloren. Voor ingewikkelde schakelingen is het synchroniseren van de signalen zeer complex en moet men andere poorten gebruiken. Voor een voorbeeld hiervan verwijzen we naar [21].

3.1.4 Conclusie

We bespraken een eerste methode voor NML. Deze methode is deterministisch en vertoont gelijkenissen met het omvallen van dominostenen. Het systeem moet namelijk bij iedere nieuwe input gereset worden door een extern veld $\mathbf{H}_{\text{ext}}$: alle macrospins moeten weer volgens hun *hard axis* gemagnetiseerd worden, net zoals men gevallen dominostenen opnieuw moet rechtzetten. Dit proces noemt men *clocking* en beperkt ongewenste feedback. De functionaliteit van een schakeling kan nog verbeterd worden door macrospins met concave vorm of met biaxiale anisotropie te gebruiken (Figuur 3.1 en 3.2). Een schakeling maakt men door poorten te verbinden met verbindingen die zowel ferro- als antiferromagnetisch informatie kunnen doorgeven (respectievelijk $\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rightarrow$ en $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$), al zijn ferromagnetische verbindingen geschikter om informatie over een lange afstand te transporteren (Figuur 3.3).

3.2 Thermodynamisch gedreven logica

We willen een (stochastisch) alternatief voor de reeds bestaande deterministische logica ontwikkelen, waarbij de werking gebaseerd is op het stochastische ompolingsproces van de macrospins. Zoals aangetoond in Sectie 2.5 is dit proces sterk afhankelijk van de geometrie van het systeem. Een geschikte geometrie zou op die manier kunnen leiden tot een welbepaalde logische functie.

In Sectie 2.5 hebben we al onderzocht hoe vaak een macrospin ompoolt (relatief ten opzichte van de andere macrospins), maar het opgestelde model beschreef enkel het aantal ompolingen en leerde ons niets over de toestand waarin het systeem de meeste tijd doorbracht. Als we bijvoorbeeld weten dat een macrospin in 100 seconden gemiddeld twee keer ompoolt, zijn er meerdere scenario’s mogelijk:

⁷*Magnetic Force Microscopy*. Meer uitleg over MFM kan gevonden worden in [8].

1. na 50 seconden gebeurde de eerste ompoling (van *up* naar *down*), 50 seconden later volgde de tweede (van *down* naar *up*)
2. na 99 seconden gebeurde de eerste ompoling (van *up* naar *down*), 1 seconde later volgde al de tweede (van *down* naar *up*)
3. ...

De macrospin is in beide gevallen twee keer omgepoold in 100 seconden. Toch is de onderliggende dynamica van de twee gevallen totaal verschillend. In het eerste geval zijn de overgangswaarschijnlijkheden $R_{d \rightarrow u}$ en $R_{u \rightarrow d}$ gelijk aan elkaar; de macrospin heeft bijgevolg geen voorkeur voor *up* of *down* (50% van de tijd bevindt het zich in *up*). In het tweede geval is $R_{d \rightarrow u}$ groter dan $R_{u \rightarrow d}$; de macrospin heeft bijgevolg een voorkeur voor de energetisch gunstige *up*-toestand (99% van de tijd bevindt het zich in *up*). Met andere woorden bevat de macrospin in het eerste geval geen informatie (willekeurig), terwijl de macrospin in het tweede geval wél informatie bevat.

We gaan de vaststelling dat sommige macrospins informatie bevatten en andere niet, gebruiken bij het ontwerpen van logische poorten. Zo moet de uitgang-macrospin van een poort informatie bevatten. De poorten hebben één binaire ingang en één binaire uitgang (Sectie 3.2.1) of twee binaire ingangen en één binaire uitgang (Sectie 3.2.2). We gaan zulke poorten verbinden met verbindingen (Sectie 3.2.3) om zo logische schakelingen te maken (Sectie 3.2.4).

We definiëren bit-waarde 1 (0) als een macrospin met positieve (negatieve) m_x . De ingang-macrospins kunnen gedurende een simulatie niet ompolen (ze worden gefixeerd⁸) en hebben dus bit-waarde 1 of 0. De uitgang-macrospin kan wel ompolen gedurende een simulatie en heeft als uitgang het tijdsgemiddelde van bit-waarde 1 en bit-waarde 0. Het resultaat wordt dus bepaald door een stochastisch (ompolings)proces. Dit vormt de basis van de thermodynamisch gedreven logica.

Alle simulaties die in Sectie 3.2 voorkomen, zijn gemaakt bij een temperatuur $T = 30$ K en werden gestopt na 2×10^8 s of na 10^7 ompolingen. Bij elk systeem is de afstand R tussen twee naburige macrospins 90 nm, net als in Sectie 2.5. De saturatie-magnetisatie M_{sat} bedraagt 800 000 A/m, wat dubbel zo groot is als voorheen. Er zal telkens uitgemiddeld worden over 12 simulaties.

⁸In de praktijk kan men dit doen door een *exchance bias* aan te leggen [26].

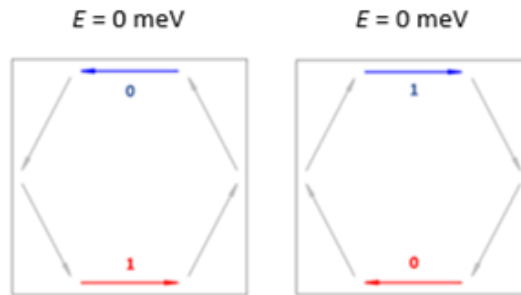
3.2.1 Poorten met 1 ingang en 1 uitgang

NOT-poort

Een poort met één ingang en één uitgang is de NOT-poort. De ingang van deze poort heeft een andere bit-waarde dan de uitgang. De NOT-poort kan men eenvoudig realiseren zoals getoond in Figuur 3.5. De waarheidstabel van dit systeem wordt weergegeven in Tabel 3.2.

Tabel 3.2: NOT-poort.

Ingang	Uitgang	Standaardafwijking
0	0,999995	0,000003
1	$5,08 \cdot 10^{-6}$	$2,09 \cdot 10^{-6}$



Figuur 3.5: NOT-poort, met ingang-macrospin (blauw) en uitgang-macrospin (rood). De waarheidstabel wordt weergegeven in Tabel 3.2. Voor elke input wordt de configuratie met de laagste energie E getoond. De grondtoestand heeft $E = 0 \text{ meV}$.

3.2.2 Poorten met 2 ingangen en 1 uitgang

We gaan in deze sectie op zoek naar poorten met twee ingangen en één uitgang, zoals de AND-, de OR-, de NAND- en de NOR-poort. Deze poorten worden gekenmerkt door het feit dat de twee ingangen equivalent zijn: als men de bit-waardes van de ingangen omwisselt, blijft de bit-waarde van de uitgang behouden. Zo moet input 01 steeds hetzelfde resultaat opleveren als input 10.

Anderzijds weten we dat het systeem zal evolueren naar een toestand met minimale energie E (gegeven een bepaalde input). Dit energieniveau E heeft minstens onttaarding twee: aangezien de anisotropie- en de dipool-energie schalen volgens $\mathbf{e}_m^2$, bekomt men dezelfde energie als wanneer alle macrospins zijn omgepoold. Het ompolen van macrospins komt neer op $0 \rightarrow 1$ en omgekeerd. Een systeem met input 01 en bijhorende output ≈ 1 heeft dus dezelfde minimale energie als een systeem met input 10 en bijhorende output ≈ 0 . Dit leert ons dat input 01 niet hetzelfde resultaat oplevert als input 10. Daardoor lijkt het onmogelijk om logische poorten met twee ingangen en één uitgang te maken met een macrospinsysteem.

Er zijn echter twee manieren om deze patstelling te doorbreken. Men kan een extern magneetveld $\mathbf{B}_{\text{ext}}$ aanleggen waardoor de energie niet langer schaaft volgens $\mathbf{e}_m^2$ en de tweevoudige onttaarding gebroken wordt of - en dit zullen wij doen - men kan een vaste macrospin introduceren. Deze vaste macrospin wordt gedurende de simulatie van een bepaalde poort gefixeerd (op 0 of 1) zodat niet alle macrospins kunnen ompolen om dezelfde minimale energie te bekomen. We kiezen met andere woorden welke van de twee toestanden met energie E gerealiseerd kan worden. We breken dus de symmetrie van het systeem.

Het type van de poort wordt bovendien bepaald door welke bit-waarde we kiezen voor de vaste macrospin. Een andere keuze leidt immers tot dezelfde minimale energie E als ook alle andere macrospins van het systeem omgepoold worden. In het bijzonder worden de bit-waardes van de ingangen en van de uitgang gewijzigd. Aan de hand van de waarheidstabellen kan men nu makkelijk inzien dat een (N)AND-poort op die manier omgezet wordt naar een (N)OR-poort. Dit wordt geïllustreerd in Figuur 3.6 (3.8) en Figuur 3.7 (3.9).

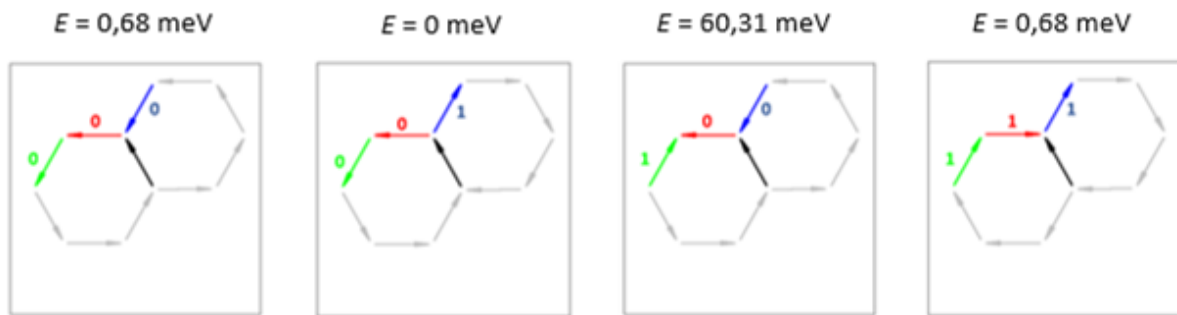
De poorten in volgende paragrafen werden gevonden via *trial-and-error*.

AND-poort

De uitgang van de AND-poort heeft bit-waarde 1 als en slechts als beide ingangen bit-waarde 1 hebben. Deze poort kan men realiseren zoals getoond in Figuur 3.6. De waarheidstabel van dit systeem wordt weergegeven in Tabel 3.3.

Tabel 3.3: AND-poort.

Ingang	Ingang	Uitgang	Standaardafwijking
0	0	$0,55 \cdot 10^{-11}$	$1,01 \cdot 10^{-11}$
0	1	$3,30 \cdot 10^{-6}$	$0,04 \cdot 10^{-6}$
1	0	0,000247	0,000050
1	1	0,999997	0,000001



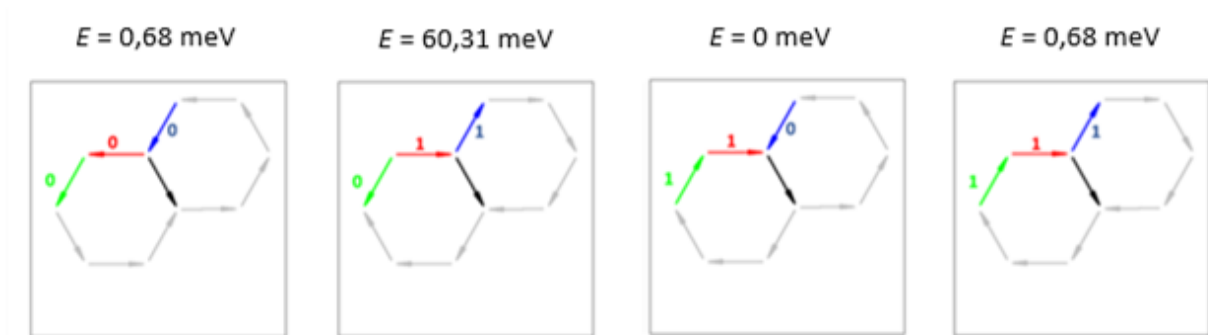
Figuur 3.6: AND-poort, met ingang-macrospins (groen en blauw), uitgang-macrospin (rood) en vaste macrospin (zwart). De waarheidstabel wordt weergegeven in Tabel 3.3. Voor elke input wordt de configuratie met de laagste energie E getoond. De grondtoestand heeft $E = 0 \text{ meV}$.

OR-poort

De uitgang van de OR-poort heeft bit-waarde 1 als minstens één van de ingangen bit-waarde 1 heeft. Deze poort kan men realiseren zoals getoond in Figuur 3.7. De waarheidstabel van dit systeem wordt weergegeven in Tabel 3.4.

Tabel 3.4: OR-poort.

Ingang	Ingang	Uitgang	Standaardafwijking
0	0	$3,44 \cdot 10^{-6}$	$0,02 \cdot 10^{-6}$
0	1	0,999736	0,000057
1	0	0,999997	0,000001
1	1	1	0



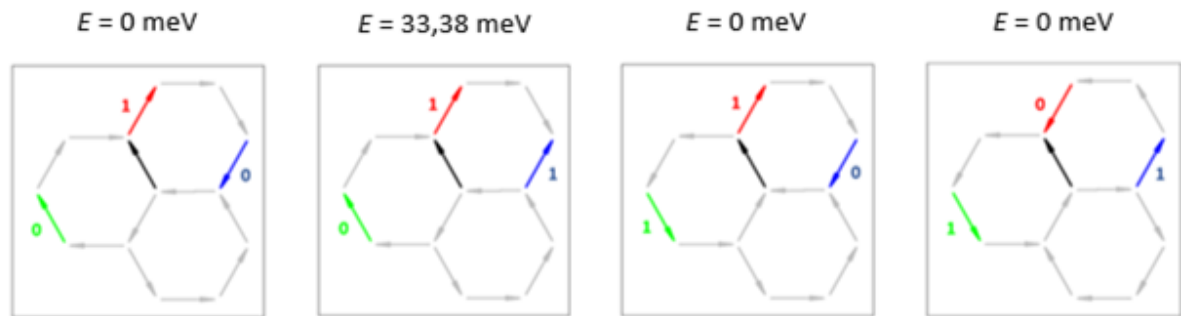
Figuur 3.7: OR-poort, met ingang-macrospins (groen en blauw), uitgang-macrospin (rood) en vaste macrospin (zwart). De waarheidstabel wordt weergegeven in Tabel 3.4. Voor elke input wordt de configuratie met de laagste energie E getoond. De grondtoestand heeft $E = 0$ meV.

NAND-poort

De uitgang van de NAND-poort heeft bit-waarde 0 als en slechts als beide ingangen bit-waarde 1 hebben. Deze poort kan gemaakt worden door de uitgang van een AND-poort te verbinden met de ingang van een NOT-poort. Men kan de NAND-poort ook rechtstreeks realiseren zoals getoond in Figuur 3.8. De waarheidstabel van dit systeem wordt weergegeven in Tabel 3.5.

Tabel 3.5: NAND-poort.

Ingang	Ingang	Uitgang	Standaardafwijking
0	0	0,999999	0,000003
0	1	0,903918	0,013672
1	0	0,999962	0,000004
1	1	$3,45 \cdot 10^{-5}$	$1,40 \cdot 10^{-5}$



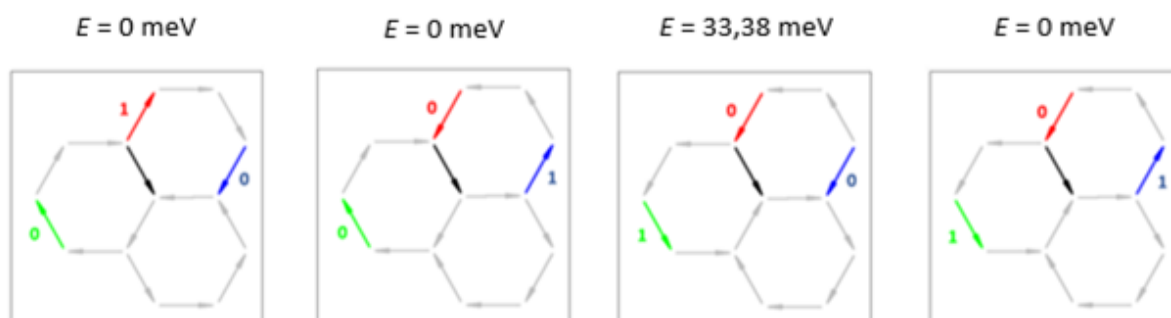
Figuur 3.8: NAND-poort, met ingang-macrospins (groen en blauw), uitgang-macrospin (rood) en vaste macrospin (zwart). De waarheidstabel wordt weergegeven in Tabel 3.5. Voor elke input wordt de configuratie met de laagste energie E getoond. (Voor input 10 is slechts één van de vier mogelijke configuraties afgebeeld). De grondtoestand heeft $E = 0$ meV.

NOR-poort

De uitgang van de NOR-poort heeft bit-waarde 0 als minstens één van de ingangen bit-waarde 1 heeft. Deze poort kan gemaakt worden door de uitgang van een OR-poort te verbinden met de ingang van een NOT-poort. Men kan de NOR-poort ook rechtstreeks realiseren zoals getoond in Figuur 3.9. De waarheidstabel van dit systeem wordt weergegeven in Tabel 3.6.

Tabel 3.6: NOR-poort.

Ingang	Ingang	Uitgang	Standaardafwijking
0	0	0,999969	0,000013
0	1	$3,84 \cdot 10^{-5}$	$0,50 \cdot 10^{-5}$
1	0	0,100386	0,013981
1	1	$1,71 \cdot 10^{-8}$	$4,02 \cdot 10^{-8}$



Figuur 3.9: NOR-poort, met ingang-macrospins (groen en blauw), uitgang-macrospin (rood) en vaste macrospin (zwart). De waarheidstabel wordt weergegeven in Tabel 3.6. Voor elke input wordt de configuratie met de laagste energie E getoond. (Voor input 01 is slechts één van de vier mogelijke configuraties afgebeeld). De grondtoestand heeft $E = 0$ meV.

3.2.3 Verbindingen

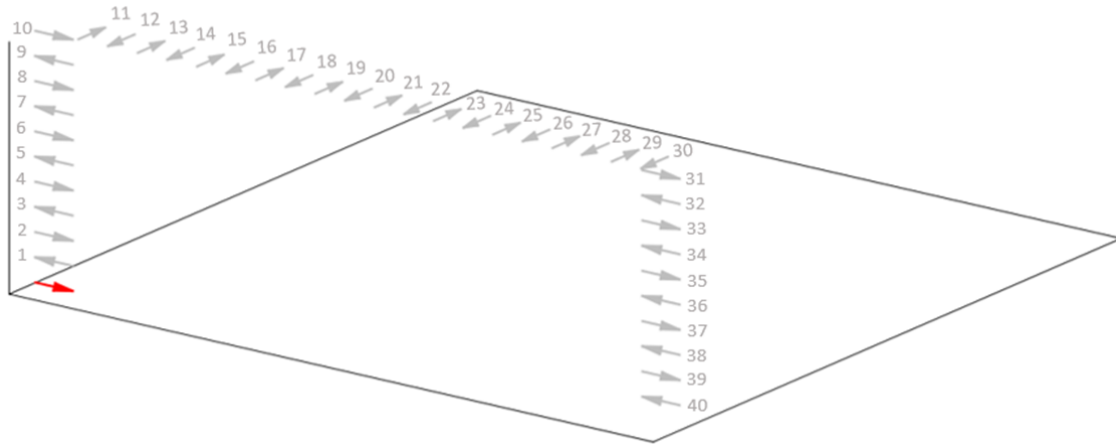
De logische poorten uit de vorige sectie willen we nu gebruiken als bouwstenen voor logische schakelingen. Hiervoor moet de output van de ene poort doorgegeven kunnen worden aan een ingang-macrospin van een andere poort. Dit doen we door gebruik te maken van verbindingen. Verbindingen bestaan uit een reeks macrospins, die door de dipool-interactie antiferromagnetisch gekoppeld zijn (Figuur 3.10). Gezien de geometrie van de gevonden poorten is het helaas onmogelijk om verbindingen te ontwerpen die in hetzelfde vlak als dat van de poort liggen. Ferromagnetische verbindingen zoals bij de deterministische logica van Sectie 3.1 zijn dus niet mogelijk.

De afstand tussen naburige macrospins bedraagt $0,80R$. Om deze afstand te bepalen, werd één macrospin aan het begin van de verbinding gefixeerd op 1 (rood in Figuur 3.10). Deze macrospin vervult als het ware de rol van de uitgang-macrospin van de eerste poort. Voor verschillende afstanden werd via een simulatie bepaald hoe vaak iedere macrospin een bit-waarde heeft die niet gelijk is aan die van de grondtoestand. De fout bij de macrospin op het einde van de verbinding is een maat voor de bruikbaarheid van de verbinding: hoe groter de fout, hoe vaker de ingang-macrospin van de tweede poort een ongewenste bit-waarde heeft. Het is de bedoeling de fout zo klein mogelijk te houden.

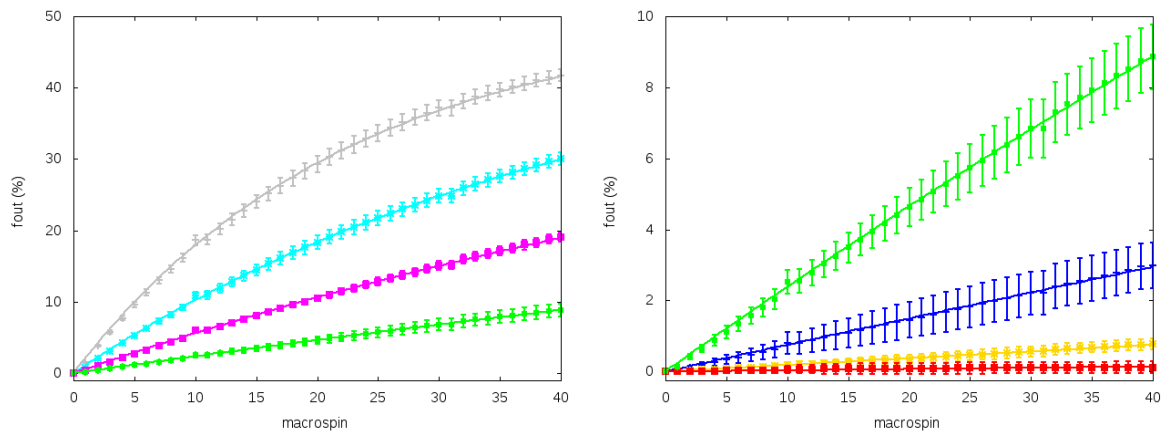
Figuur 3.11 toont de resultaten van de simulaties en leert dat de fout toeneemt doorheen de verbinding en groter is bij een grotere afstand tussen naburige macrospins. Het lijkt daarvoor alsof men ten hoogste $0,70R$ als dichtste-nabuuraafstand moet nemen. Maar een te kleine afstand leidt echter tot een dipool-energie E_{dip} die vele malen sterker is dan de thermische energie $k_B T$. Wanneer de verbinding dan één van zijn twee grondtoestand-configuraties bereikt⁹, blijft het met grote waarschijnlijkheid in diezelfde grondtoestand. Aangezien dit ook de verkeerde grondtoestand kan zijn, moet men zo'n situatie absoluut vermijden.

We simuleren daarom een verbinding waarbij elke macrospin kan ompolen: als de gemiddelde bit-waarde 0,50 is, weten we dat het systeem van de ene naar de andere grondtoestand kan overgaan. Een verbinding met dichtste-nabuuraafstand $0,70R$ heeft een gemiddelde bit-waarde van $(0,11 \pm 0,10)$ en is dus ongeschikt. Een verbinding met dichtste-nabuuraafstand $0,80R$ heeft een gemiddelde bit-waarde van $(0,50 \pm 0,02)$ en is daarom wel geschikt. Bovendien heeft de macrospin op het einde van de verbinding bij dichtste-nabuuraafstand $0,80R$ een fout van slechts 0,75% (oranje in Figuur 3.11).

⁹Dit gebeurt sneller dan dat de poort haar grondtoestand bereikt.



Figuur 3.10: Verbinding (in grondtoestand) bestaande uit 40 macrospins. De rode macrospin is de denkbeeldige uitgang van een poort en werd hier op 1 gefixeerd. De afstand tussen de macrospins bij de knikpunten werd zo gekozen dat ze een interactie-sterkte van dezelfde grootte-orde ondervinden als de macrospins in de rechte stukken.



Figuur 3.11: Fout doorheen de verbinding van Figuur 3.10 voor verschillende afstanden tussen naburige macrospins: $1,05R$ (grijs); $1,00R$ (lichtblauw); $0,95R$ (paars); $0,90R$ (groen); $0,85R$ (blauw); $0,80R$ (oranje) en $0,70R$ (rood). De foutenvlaggen tonen de standaardafwijking. De lijnen zijn een theoretische fit aan de data (zie verder). De fouten op de macrospins aan de knikpunten (10-11 en 30-31) wijken af van de curve, maar hebben geen noemenswaardige invloed op het globale karakter van de verbinding.

Theoretisch model

Aan de datapunten van Figuur 3.11 werd een theoretische curve van de vorm

$$f(i) = 0,5(1 - q^i) \quad (3.1)$$

gefit via fitparameter $q < 1$. Deze vorm heeft het correcte limietgedrag. In een oneindig lange verbinding wordt de macrospin op positie $i \rightarrow \infty$ niet meer beïnvloed door de gefixeerde macrospin op positie $i = 0$ (rood in Figuur 3.10) en heeft dus een willekeurige oriëntatie (*up* of *down*): de fout $f(i \rightarrow \infty) = 50\%$. De fout van de gefixeerde macrospin $f(0)$ is uiteraard gelijk aan nul.

Formule (3.1) beschrijft een verbinding waarin de informatie in één richting loopt: q is een maat voor hoe goed de informatie van de i^{de} macrospin wordt doorgegeven aan de $(i + 1)^{\text{de}}$ macrospin. Hoe groter q , hoe beter de informatie wordt doorgegeven. We verwachten dat q groter is bij kleinere afstand tussen de macrospins en bij lagere temperatuur. Dit wordt bevestigd door de resultaten van de fits (zie Tabel 3.7).

Tabel 3.7: Fitparameter q als functie van de afstand r tussen naburige macrospins ($R = 90$ nm) en van de temperatuur T . De sterretjes geven aan dat r^3T een constante is.

r	T (K)	q	
1,05 R	30	0,9566	*
1,00 R	40	0,9307	*
	34,73	0,9574	
0,95 R	30	0,9774	**
	34,99	0,9753	**
0,90 R	30	0,9881	
	30	0,9951	
0,85 R	30	0,9985	
0,80 R	30	0,9996	
0,70 R	30	0,9999	

We proberen een theoretisch model op te stellen dat Tabel 3.7 kan reproduceren. Aangezien de informatie in één richting doorheen de verbinding loopt, kan de fout van de $(i + 1)^{\text{de}}$ macrospin $f(i + 1)$ berekend worden als de fout van de vorige macrospin $f(i)$ gekend is:

$$f(i + 1) = f(i)K_{AF} + (1 - f(i))(1 - K_{AF}), \quad (3.2)$$

waarbij K_{AF} de waarschijnlijkheid is dat naburige macrospins de gewenste antiferromagnetische koppeling hebben. De eerste term van Formule (3.2) is de kans dat de fout wordt overgenomen van de i^{de} macrospin, de tweede term is de kans dat de fout ontstaat bij de $(i + 1)^{\text{de}}$ macrospin. De recursiebetrekking start bij $f(0) = 0$ en eindigt bij $f(i \rightarrow \infty) = 50\%$. Op die manier kan $f(i)$ berekend worden voor $i = 0 \rightarrow 40$ en kan via Formule (3.1) q bepaald worden met een fit.

De enige onbekende is K_{AF} . Om K_{AF} te berekenen voeren we de benadering in dat een macrospin enkel interageert met zijn twee naburen en de interactie met alle andere macrospins verwaarloosbaar is. K_{AF} is dus de waarschijnlijkheid dat de tweede macrospin zich in de *down*-toestand bevindt, gegeven dat de eerste macrospin zich in de *up*-toestand bevindt:

$$K_{AF} = \frac{\exp(-E_{udu}/k_B T) + \exp(-E_{udd}/k_B T)}{\sum_{E_{u..}} N_{E_{u..}} \exp(-E_{u..}/k_B T)}, \quad (3.3)$$

waarbij we Formule (2.28) hebben gebruikt. De energie E schaalt volgens $1/r^3$.

We testen dit model bij een temperatuur $T = 30$ K en voor een dichtste-nabuurafstand $1,05R$. We vinden dat $K_{AF} = 0,9827$ en dat $q = 0,9654$. Dit is niet in overeenstemming met $q = 0,9566$ van Tabel 3.7.

De benadering die we gemaakt hebben om K_{AF} te berekenen, namelijk dat enkel naburen elkaar beïnvloeden, blijkt niet nauwkeurig genoeg om het correcte gedrag van de verbinding te beschrijven. Ook de interactie tussen niet-naburige macrospins moet in rekening gebracht worden. De mate waarin dit moet gebeuren, is afhankelijk van de dichtste-nabuurafstand: hoe kleiner die afstand, hoe belangrijker de correctie wordt en hoe meer macrospins er zijn die elkaar beïnvloeden. Hierdoor is er geen zuivere $1/r^3$ -afhankelijkheid meer. Dit effect wordt getoond in Tabel 3.7: bij constante $r^3 T$ vinden we andere q -waarden terug (* en **).

We besluiten dat de informatie beter wordt doorgegeven doorheen de verbinding (grotere q) als de afstand tussen naburige macrospins kleiner is en als de temperatuur lager is. Een theoretisch model voor $q(r, T)$ moet ook de interactie tussen niet-naburen in rekening brengen. Naar zo'n model hebben we niet gezocht.

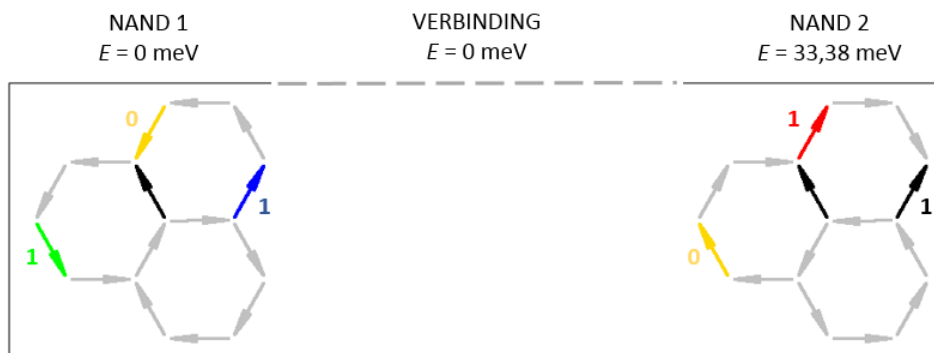
3.2.4 Schakelingen

Met de poorten uit Sectie 3.2.2 en met de verbindingen uit Sectie 3.2.3 beschikken we over alle bouwstenen die nodig zijn om logische schakelingen te maken. Een voorbeeld van zo'n schakeling wordt getoond in Figuur 3.12. De uitgang-macrospin van de eerste NAND-poort wordt verbonden met een ingang-macrospin van de tweede NAND-poort (oranje). De andere ingang-macrospin van de tweede NAND-poort wordt gefixeerd op 1 (zwart). We verwachten een werking zoals in Tabel 3.8.

Bij het opstellen van Tabel 3.8 zijn we er van uitgegaan dat de input van de eerste NAND-poort de bit-waarde van de oranje macrospin bepaalt, dat die bit-waarde via de verbinding wordt doorgegeven aan de oranje ingang-macrospin van de tweede NAND-poort en dat de tweede NAND-poort vervolgens een output zal genereren. Doorheen de verbinding loopt er met andere woorden één signaal naar rechts.

Tabel 3.8: Toestandstabel van de schakeling uit Figuur 3.12 voor input 11. Voor elke bouwsteen wordt de energie E vermeld. $E = 0$ meV betekent dat een bouwsteen zich in zijn grondtoestand bevindt.

NAND 1		VERBINDING		NAND 2	
input	output	begin	einde	input	output
11	0	0	0	01	1
$E = 0$ meV		$E = 0$ meV		$E = 33,38$ meV	



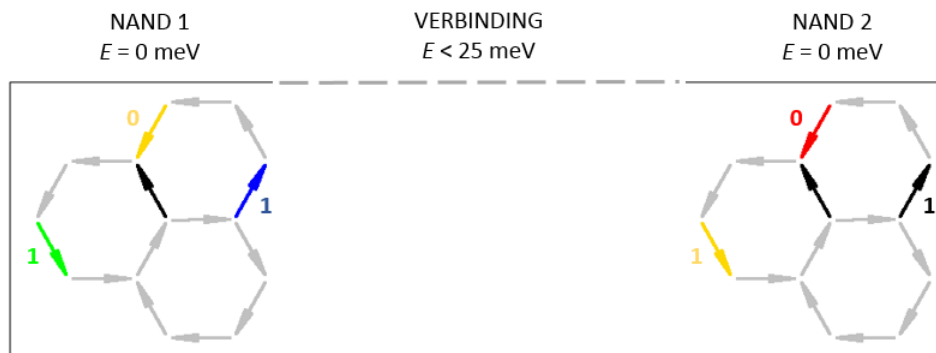
Figuur 3.12: Schakeling van twee NAND-poorten, met ingang-macrospins (groen en blauw), verbinding (oranje), uitgang-macrospin (rood) en vaste macrospins (zwart). Voor elke bouwsteen wordt de configuratie met de laagste energie E getoond. $E = 0$ meV betekent dat een bouwsteen zich in zijn grondtoestand bevindt.

Bovenstaande zienswijze is echter niet correct. In realiteit zullen beide NAND-poorten zich het merendeel van de tijd in hun grondtoestanden met $E = 0$ meV bevinden, zoals getoond in Figuur 3.13 en Tabel 3.9. Er lopen nu twee signalen doorheen de verbinding: bij de eerste NAND-poort vertrekt een eerste signaal naar rechts, bij de tweede NAND-poort vertrekt een tweede en tegengesteld signaal naar links. Op de plaats waar de signalen elkaar raken vormt zich een domeinmuur¹⁰. De toename in energie E die hiermee gepaard gaat is afhankelijk van waar de domeinmuur zich bevindt en bedraagt voor de verbindingen uit Sectie 3.2.3 maximaal zo'n 25 meV. Dit is minder dan 33,38 meV: de energie die de tweede NAND-poort had bij een werking volgens Tabel 3.8.

De energie van de schakeling is dus lager wanneer ze werkt volgens Tabel 3.9. We kunnen hieruit besluiten dat bij input 11 vaker output 0 zal voorkomen dan de gewenste output 1. De schakeling werkt dus niet zoals gehoopt.

Tabel 3.9: Toestandstabel van de schakeling uit Figuur 3.13 voor input 11. Voor elke bouwsteen wordt de energie E vermeld. $E = 0$ meV betekent dat een bouwsteen zich in zijn grondtoestand bevindt.

NAND 1		VERBINDING		NAND 2	
input	output	begin	einde	input	output
11	0	0	1	11	0
$E = 0$ meV		$E < 25$ meV		$E = 0$ meV	



Figuur 3.13: Schakeling van twee NAND-poorten met kleurencode zoals in Figuur 3.12.

¹⁰Een domeinmuur is in dit specifieke geval de scheiding tussen twee macrospins met eenzelfde oriëntatie: $(\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow)(\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow)$.

3.2.5 Conclusie

Het niet-functioneren van de schakeling uit de Sectie 3.2.4 is geen alleenstaand geval. Alle poorten uit Sectie 3.2.2 hebben voor een welbepaalde input een minimale energie E die aanzienlijk hoger is dan de grondtoestand (zie Tabel 3.10). De desbetreffende configuraties met energie E zijn enkel waarschijnlijk bij die (vaste) input. Wanneer één van de ingang-macrospins kan ompolen (zoals het geval is bij een schakeling), verliest de poort haar functionaliteit. We kunnen dus geen werkende schakelingen maken met de poorten die we tot nog toe gevonden hebben. De poorten afzonderlijk werken wel, al zijn de ingang-macrospins niet volledig equivalent: bij de NAND-poort bijvoorbeeld geeft input 01 een minder goed resultaat dan input 10 (zie Tabel 3.5).

Tabel 3.10: Energie boven de grondtoestand als functie van de input.

Poort	Input	Energie (meV)
AND	10	60,31
OR	01	60,31
NAND	01	33,38
NOR	10	33,38

3.3 Logica via simulated annealing

De poorten in Sectie 3.2 bleken niet geschikt als bouwstenen voor logische schakelingen. De reden hiervoor was dat niet elke input leidt tot een output-configuratie met dezelfde minimale energie E . Daarom gaan we in dit hoofdstuk op zoek naar poorten waarvoor dit wel het geval is (Sectie 3.3.2). Bij die zoektocht houden we geen rekening met de (tijds)gemiddelde bit-waarde van de uitgang zoals in Sectie 3.2. We willen in de eerste plaats dat de juiste output bekomen wordt als de poort zich in haar grondtoestand¹¹ bevindt; we houden geen rekening met het feit of dit voor aangeslagen toestanden ook zo is. Eens we een poort hebben gevonden die zich, ongeacht de input, in de grondtoestand kan bevinden, is het enkel een kwestie er voor te zorgen dat de poort zich ook daadwerkelijk in die grondtoestand bevindt. We gaan dit modelleren via *simulated annealing*.

3.3.1 Simulated annealing

Een systeem in haar grondtoestand brengen is equivalent met een optimalisatieprobleem: we willen de energie E minimaliseren. Klassieke optimalisatietechnieken, zoals bijvoorbeeld de Newton-Raphson methode uit Sectie 2.1.4, bieden echter geen garantie op het vinden van het

¹¹Met de grondtoestand bedoelen we in deze sectie de laagste energie die een systeem kan hebben, gegeven het magnetisch moment $\mathbf{m}$ van een aantal vaste macrospins (zie ook paragraaf 3.3.2).

absoluut minimum (de grondtoestand). Wanneer de kostfunctie (de energie) die geminimaliseerd wordt lokale minima bevat, geeft de optimalisatietechniek bij bepaalde beginvoorwaarden zo'n lokaal minimum als resultaat. Om te vermijden dat het systeem hierin vast komt te zitten, moeten veranderingen die leiden tot een hogere energie, met een bepaalde kans worden toegelaten. Een gekend voorbeeld van zo'n simulatiemethode is het Metropolis-algoritme [27]. Een verandering die leidt tot $\Delta E \leq 0$ wordt altijd aanvaard, een verandering die leidt tot $\Delta E > 0$ wordt aanvaard als $\exp(-\Delta E/k_B T) > p$, met p een willekeurig getal uniform verdeeld in het interval $(0,1)$. Ons model (Formule (2.6)) werkt niet volgens het Metropolis-algoritme, maar veranderingen (ompolingen) die de energie verhogen zijn eveneens mogelijk. De waarschijnlijkheid is afhankelijk van de temperatuur T .

Bij *simulated annealing* [28] wordt er een simulatie gestart bij een temperatuur $T = T_{\text{hoog}}$. De temperatuur $T(t)$ neemt af met de tijd tot het systeem geen veranderingen meer ondergaat bij $T = T_{\text{laag}}$. Het systeem wordt op die manier vastgevroren in de grondtoestand.

Er bestaan verschillende koelfuncties $T(t)$ [29], die allemaal gekenmerkt worden door:

1. De temperatuur T_{hoog} waarbij de simulatie gestart wordt, is voldoende groot zodat de hele faseruimte bezocht kan worden en het systeem uit lokale energievallen kan ontsnappen. Indien dit niet het geval is, spreekt men van *ergodicity breaking* [30].
2. De koeling gebeurt langzaam, zodat het systeem gedurende de *annealing* dichtbij evenwicht blijft [28, 29]. Er worden diverse methodes gebruikt om dit te testen [28, 31, 32].

Er is slechts één koelmechanisme, ook wel *annealing schedule* genoemd, waarvan theoretisch bewezen is dat het leidt tot een globaal minimum in de limiet $t \rightarrow \infty$ [33]. Dit is het logaritmisch koelschema van Geman en Geman [34]:

$$T(t) = \frac{c}{\log(t+d)}, \quad (3.4)$$

met c groter dan of gelijk aan de grootste energiebarrière van het probleem en waarbij d gewoonlijk gelijk is aan 1. In de praktijk is dit koelmechanisme echter niet bruikbaar door haar asymptotisch trage temperatuurafname [29].

Er moet dus voor ieder probleem (macrospinsysteem) een eigen koelmechanisme opgesteld worden: de vorm van de koelfunctie $T(t)$ en haar specifieke parameters moeten bepaald worden. De optimalisatie van het koelmechanisme is een niet-triviaal probleem. Vaak worden er voor een gegeven probleem een aantal koelschema's getest en kiest men het schema dat het beste resultaat geeft [35]. Davis en Ritter [36] hebben een algoritme ontwikkeld dat de optimale parameters geeft voor de (exponentiële) koelfunctie van de vorm $T_t = \alpha T_{t-1}$ met $\alpha < 1$. Bölte en Thonemann [35] kunnen via *genetic programming* zowel de vorm als de bijhorende parameters van het optimale koelschema bepalen.

3.3.2 Poorten

Zoekalgoritme

De logische poorten moeten zich bij de 4 mogelijke inputs in de grondtoestand kunnen bevinden. Met de grondtoestand bedoelen we hier de laagste energie E die het systeem kan hebben, gegeven het magnetisch moment $\mathbf{m}$ van een aantal vaste macrospins. Deze grondtoestand moet al minstens een ontaarding $N_E \geq 4$ hebben (er zijn namelijk 4 mogelijke inputs). Voor een poort met twee ingangen is er bovendien één vaste macrospin nodig (zie Sectie 3.2.2). Door deze macrospin wordt de symmetrie gebroken en de ontaarding gehalveerd. De grondtoestand moet dus minstens een ontaarding $N_E \geq 8$ hebben: een vaste macrospin halveert dit dan naar (de) 4 (inputs).

Om een poort te vinden die aan deze voorwaarde voldoet, gingen we als volgt te werk:

1. Voor alle N macrospins definieerden we de anisotropie-richting $\mathbf{u}_i$ en de relatieve positie. Dit systeem moet enige vorm van symmetrie bevatten om een achtevoudig ontaarde energietoestand te hebben.
2. Voor elke configuratie van het systeem werd de energie E bepaald en vervolgens gerangschikt. Aangezien er 2^N configuraties zijn, verdubbelt een extra macrospin de rekentijd van deze stap. Daarom hebben we gekozen om N te beperken tot maximaal 21. We beschikken nu over een lijst met alle configuraties en bijhorende energie. We willen weten of deze lijst een achtevoudig ontaarde energietoestand bevat, welke macrospins we dan als vaste macrospins kunnen gebruiken en of we met de niet-vaste macrospins een poort kunnen vormen die zich ongeacht de input in de grondtoestand kan bevinden. We benadrukken nogmaals dat de grondtoestand de laagste energie E is die het systeem kan hebben, gegeven het magnetisch moment $\mathbf{m}$ van de vaste macrospins.
3. Voor elke energie E met $N_E = 8$ werden er 4 configuraties gekozen door te eisen dat de bit-waarde van de i^{de} macrospin 0 is. Dit is de vaste macrospin waardoor de symmetrie gebroken wordt. In een eerste poging was $i = 1$, in een tweede poging was $i = 2 \dots$ en in een laatste poging was $i = N$.
4. Alle macrospins j die bij elk van de 4 configuraties dezelfde bit-waarde hadden, werden ook als vaste macrospin gekozen. Zij kunnen toch niet dienen als in- of uitgang.
5. De vaste macrospins van het systeem werden gefixeerd en kunnen dus niet ompolen. We voerden vervolgens een simulatie uit zoals voorheen. Zodra de energie kleiner wordt dan E , weten we dat E niet de grondtoestand van het systeem is en kan er onmiddellijk verder gegaan worden met stap 3. Deze methode werkt sneller dan expliciet te controleren of er, gegeven het magnetisch moment $\mathbf{m}$ van de vaste macrospins, een lagere energieconfiguratie mogelijk is. Dat zou immers schalen volgens $\mathcal{O}(2^{2N})$.

Als de energie na 10^7 ompolingen nooit kleiner was dan E , is dit een indicatie dat E de grondtoestand is, al kunnen we dit met deze methode nooit met 100% zekerheid stellen. Theoretisch gezien is het mogelijk dat E een lokaal energieminimum is, dat zich in een energievalei bevindt waaruit het systeem niet onsnapt is. Om die kans te verkleinen werd er gesimuleerd bij hoge temperatuur ($T > 300$ K). In stap 7 wordt er expliciet gecontroleerd of E de grondtoestand is.

6. Tot slot gingen we na of het systeem ook bruikbaar is als poort. Er moeten twee ingang-macrospins en één uitgang-macrospin zijn die bij de 4 configuraties de juiste bit-waarde hebben.
7. We controleerden expliciet of E de grondtoestand is van de gevonden poort. Dit deden we door de energie te berekenen voor alle mogelijke configuraties, gegeven het magnetisch moment $\mathbf{m}$ vaste macrospins.

Er werden meer dan 40 systemen getest. Slechts één daarvan voldeed aan de voorwaarden en bevatte bij energie $E = 0$ meV vier onafhankelijke NAND-poorten. (De NOR-poorten kan men dan bekomen door de vaste macrospins om te polen, zoals uitgelegd in Sectie 3.2.2.) In de volgende paragraaf bespreken we één van deze NAND-poorten. De motivatie om specifiek die poort te kiezen wordt verderop uitgelegd.

NAND-poort

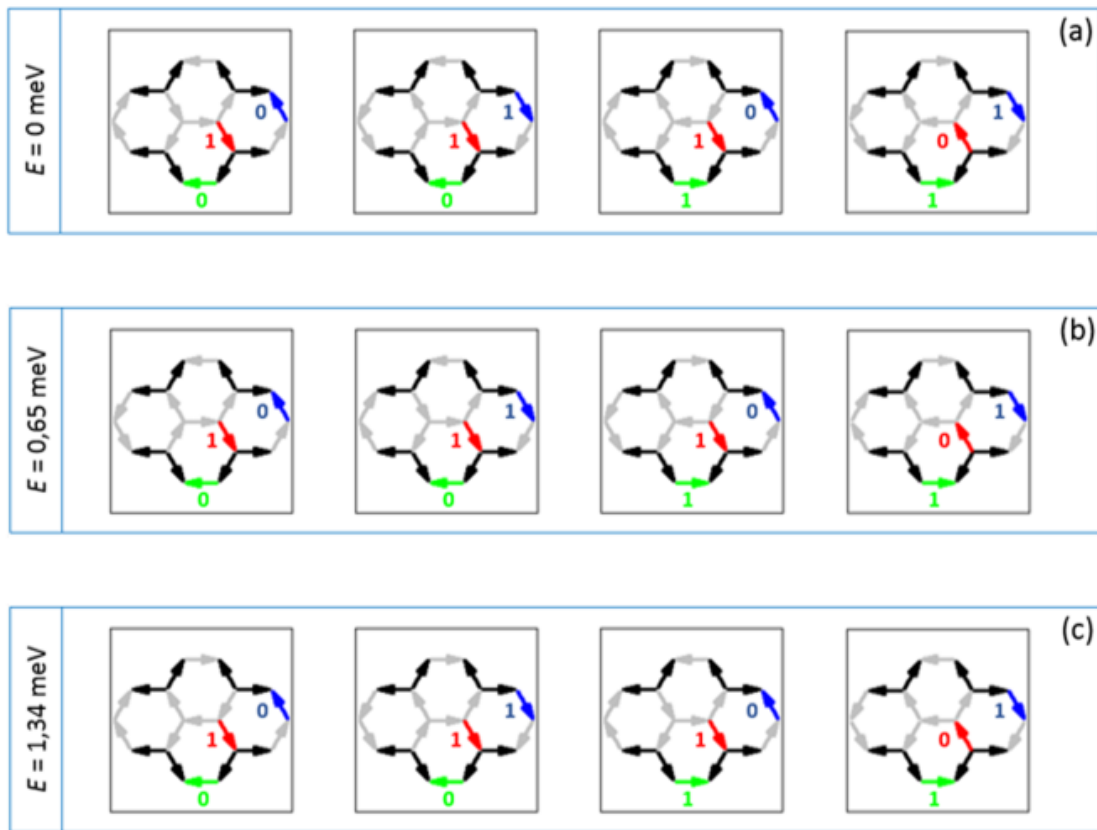
Het systeem van Figuur 3.11 heeft een saturatie-magnetisatie $M_{\text{sat}} = 860\,000$ A/m en een dichtste-naburaafstand $R = 80$ nm. We starten bij een temperatuur $T_{\text{hoog}} = 50$ K; de vrije macrospins hebben een willekeurige oriëntatie. We koelen het systeem af naar $T_{\text{laag}} = 10$ K door de temperatuur trapsgewijs met een halve graad te verlagen na 10^4 s of na 10^5 ompolingen. Dit koelmechanisme staat ter illustratie in Figuur 3.15.

In Tabel 3.11 wordt de waarheidstabel van deze NAND-poort getoond, alsook hoeveel keer het systeem zich na koeling in de grondtoestand bevond (Figuur 3.14(a)). Gemiddeld is dit minder dan 50%. Er is dus ruimte om het koelmechanisme te optimaliseren. We hebben dit ook geprobeerd door de parameters van onze trapsgewijze koeling te veranderen (hogere T_{start} , langzamer koelen) en door de exponentiële koeluncctie te gebruiken voor verschillende waarden van α . Dit leverde geen noemenswaardige verbetering op en had een langere (reken)tijd als nadeel.

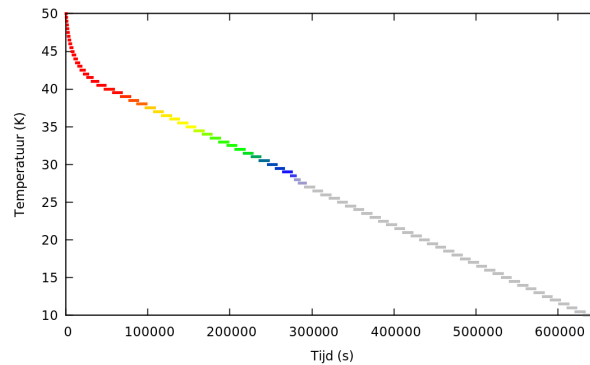
Hoewel het koelschema dus niet optimaal is, genereert de NAND-poort na *annealing* wel de gewenste output. Ook de eerste twee aangeslagen toestanden leveren namelijk voor iedere input het juiste resultaat op (Figuur 3.14(b) en 3.14(c)). Dit was onze motivatie om specifiek voor deze NAND-poort te kiezen. Het feit dat we die keuze konden maken, blijft uiteraard toeval: in het zoekalgoritme van de vorige paragraaf moest enkel de grondtoestand voldoen aan bepaalde voorwaarden.

Tabel 3.11: NAND-poort. Voor iedere input wordt getoond hoeveel keer het systeem zich na *annealing* in toestand (a), (b) of (c) van Figuur 3.14 bevond.

Ingang	Ingang	Uitgang	Grond- toestand (a)	1 ^{ste} aangeslagen toestand (b)	2 ^{de} aangeslagen toestand (c)	Totaal
0	0	1	16/50	8/50	24/50	48/50
0	1	0,96	27/50	12/50	9/50	48/50
1	0	1	23/50	13/50	14/50	50/50
1	1	0	24/50	23/50	2/50	49/50



Figuur 3.14: NAND-poort, met ingang-macrospins (groen en blauw), uitgang-macrospin (rood) en vaste macrospins (zwart). De waarheidstabel wordt weergegeven in Tabel 3.11. Voor elke input wordt de configuratie met de laagste (a), één na laagste (b) en twee na laagste (c) energie E getoond. De grondtoestand heeft $E = 0$ meV. Vaak zijn er meerdere ompolingen nodig om van de ene naar de andere configuratie te gaan.



Figuur 3.15: Het systeem wordt afgekoeld van 50 K naar 10 K: na 10^4 s of na 10^5 ompolingen wordt de temperatuur T met een halve graad verlaagd. De kleur geeft aan hoeveel macrospins omgepoold zijn: 100 000 (rood), 10 000 (oranje), 1000 (geel), 100 (groen), 10 (blauw) of 0 (grijs).

3.3.3 Schakelingen

We maken de logische schakeling uit Sectie 3.2.4 nu met de NAND-poort van Figuur 3.14. Figuur 3.16 toont als voorbeeld de configuratie van het systeem bij input 11, de toestandstabel staat in Tabel 3.12. Ook bij de drie andere inputs wordt de gewenste output bekomen wanneer de schakeling zich in de grondtoestand bevindt.

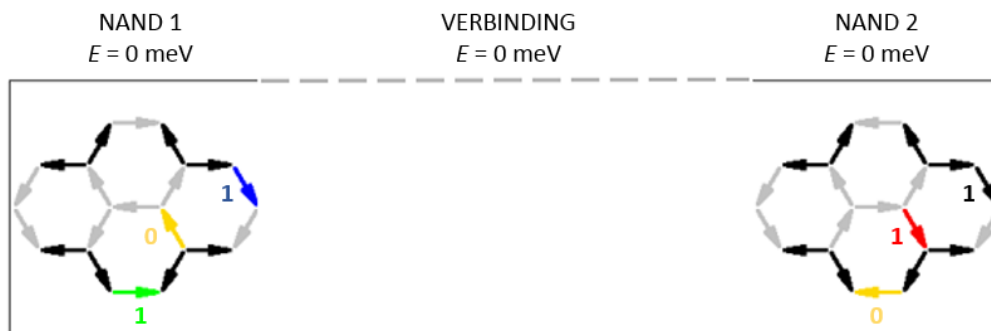
We moeten nu nog enkel een gepast koelmechanisme opstellen om het systeem naar de grondtoestand te annealen. Het schema van Figuur 3.15 levert niet langer een correct resultaat: hoe complexer het systeem (er zijn nu meer macrospins), hoe langer er bij eenzelfde temperatuur gesimuleerd moet worden om langzame koeling te verzekeren. Daarom zullen we voor de eenvoud de macrospins van de verbinding niet mee simuleren en expliciet eisen dat de uitgang-macrospin van de eerste NAND-poort dezelfde bit-waarde heeft als de (oranje) ingang-macrospin van de tweede NAND-poort.

Zelfs met deze numerieke vereenvoudiging werd er geen werkend koelmechanisme gevonden. De temperatuur T_{hoog} waarbij de *annealing* start, werd steeds verhoogd om *ergodicity breaking* te vermijden (tot maximaal 150 K) en de temperatuur-gradiënt werd steeds verlaagd om langzame koeling te garanderen (tot 100 keer kleiner in vergelijking met Figuur 3.15).

Na *annealing* werd er meerdere malen vastgesteld dat de tweede NAND-poort zich in een verkeerde grondtoestand bevindt (de (oranje) ingang-macrospin heeft niet de gewenste bit-waarde) en dat de eerste NAND-poort zich in de laagst mogelijke energietoestand bevindt, gegeven deze foute oriëntatie van de (oranje) macrospin. We kunnen hieruit besluiten dat de invloed van de eerste NAND-poort niet groot genoeg is om de tweede NAND-poort in de juiste grondtoestand te dwingen. Pogingen om de eerste NAND-poort krachtiger te maken door de saturatie-magnetisatie $M_{\text{sat},1}$ te verhogen, leverden echter geen resultaat op.

Tabel 3.12: Toestandstabel van de schakeling uit Figuur 3.16 voor input 11. Voor elke bouwsteen wordt de energie E vermeld. $E = 0$ meV betekent dat een bouwsteen zich in zijn grondtoestand bevindt.

NAND 1		VERBINDING		NAND 2	
input	output	begin	einde	input	output
11	0	0	0	01	1
$E = 0$ meV		$E = 0$ meV		$E = 0$ meV	



Figuur 3.16: Schakeling van twee NAND-poorten, met ingang-macrospins (groen en blauw), verbinding (oranje), uitgang-macrospin (rood) en vaste macrospins (zwart). Voor elke bouwsteen wordt de configuratie met de laagste energie E getoond. $E = 0$ meV betekent dat een bouwsteen zich in zijn grondtoestand bevindt.

3.3.4 Conclusie

We hebben een (NAND-)poort gevonden die zich ongeacht de input in de grondtoestand kan bevinden (Figuur 3.14). Er werd een koelmechanisme opgesteld om het systeem naar die grondtoestand te *annealen* (Figuur 3.15).

Wanneer we een schakeling willen maken met deze poorten, moet er een nieuw koelschema worden opgesteld. Zelfs voor de meest eenvoudige schakeling (Figuur 3.16) hebben we geen werkend schema gevonden waarmee binnen een (fysisch) aanvaardbare tijd een goed resultaat bekomen wordt. Een algemene uitbreiding naar complexe schakelingen, die bijvoorbeeld een rekenkundige bewerking kunnen uitvoeren, lijkt daarom niet meteen simuleerbaar.

Hoofdstuk 4

Conclusies en outlook

In deze masterscriptie hebben we onderzocht of (gefrustreerde) magnetische systemen gebruikt kunnen worden als basis voor een artificieel neurale netwerk. De motivatie van deze studie was het verband tussen magnetische systemen en artificiële neurale netwerken (Hoofdstuk 1). Het Hopfield-netwerk met binaire *units* vertoont immers gelijkenissen met een magnetisch netwerk dat bestaat uit macrospins waarvan het magnetisch moment hetzij parallel hetzij antiparallel is aan de *easy axis*. Bij beide netwerken wordt de dynamica gedreven door het minimaliseren van een energiefunctie van de vorm

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j w_{ij} x_i x_j. \quad (4.1)$$

Bij een Hopfield-netwerk gebeurt dit via asynchroon updaten, bij een magnetisch netwerk via stochastische ompoling. In Formule 4.1 is w_{ij} de gewichtsfactor tussen *unit* i en *unit* j (Hopfield-netwerk) of de interactiesterke tussen macrospin i en j (magnetisch netwerk) en voldoet w_{ij} aan $w_{ij} = w_{ji}$ en $w_{ii} = 0$. Aangezien het aantal minima of attractoren van E bij het Hopfield-netwerk bepaalt hoeveel patronen er kunnen worden opgeslagen in het associatief geheugen, hebben we ons in dit werk toegelegd op gefrustreerde magnetische systemen: frustratie leidt immers tot de ontarding van de grondtoestand.

Vermits logische poorten beschouwd kunnen worden als een eerste stap richting een artificieel neurale netwerk, hebben we ons gefocust op magnetische logica: hoe kunnen magnetische systemen gebruikt worden als logische componenten? In die context bestond er reeds een deterministische logica, waarvan de werking vergeleken kan worden met het omvallen van dominostenen (Sectie 3.1). Wij hebben echter aangetoond dat het ook mogelijk is om binaire logische poorten te maken die werken volgens een stochastische logica. Zo waren de poorten uit Sectie 3.2 thermodynamisch gedreven (de uitgang-macrospin heeft meer dan 90% van tijd de gewenste bit-waarde) en de poorten uit Sectie 3.3 gebaseerd op *simulated annealing* (de uitgang-macrospin heeft de gewenste bit-waarde als het systeem zich in de grondtoestand bevindt).

De essentiële verschillen tussen deterministische logica en onze stochastische logica zijn:

1. Deterministische logica is beperkt tot systemen waarbij de *easy axis* van elke macrospin dezelfde richting heeft. Bij onze poorten is dit niet het geval, wat leidt tot (geometrische) frustratie. Met het oog op een uitbreiding naar artificiële neurale netwerken is deze frustratie net zeer belangrijk: het aantal minima van de energie E bepaalt immers de grootte van het associatief geheugen.
2. Het opwekken van het extern veld $\mathbf{H}_{\text{ext}}$, dat nodig is voor *clocking*, brengt bij deterministische logica een beperking met zich mee wat betreft het verbruikte vermogen. Het systeem moet namelijk bij iedere nieuwe input gereset worden door het externe veld: alle macrospins moeten weer volgens hun *hard axis* gemagnetiseerd worden, net zoals men gevallen dominostenen opnieuw moet rechtzetten. Bij onze stochastische methodes volstaat het om het magnetisch moment van de vaste macrospins eenmalig in de juiste zin te fixeren.
3. Bij deterministische logica kunnen de verbindingen zowel ferro- als antiferromagnetisch informatie doorgeven (respectievelijk $\rightarrow\rightarrow\rightarrow\rightarrow$ en $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$), al zijn ferromagnetische verbindingen geschikter om informatie over een lange afstand te transporteren. Wij konden voor onze stochastische logica enkel antiferromagnetische verbindingen gebruiken door de geometrie van onze poorten (de verbinding moest uit het vlak van de poort komen). Het voordeel van een antiferromagnetische verbinding is wel dat deze ook als NOT-poort kan dienen.
4. Ongewenste feedback wordt bij deterministische logica vermeden via *clocking*. Bij thermodynamisch gedreven logica verliezen schakelingen hun functionaliteit door ongewenste feedback, waardoor een *bottom-up*-benadering niet mogelijk is. Om dit probleem te verhelpen, hebben we een tweede stochastische methode ontwikkeld: bij logica via *simulated annealing* kunnen de gevonden NAND- en NOR-poort in theorie wel gebruikt worden als bouwstenen voor logische schakelingen.

In het kader van logica via *simulated annealing* hebben we enkel een NAND- en NOR-poort gevonden. Men kan zich de vraag stellen of dit voldoende is, of je met deze poorten ook andere logische functie kan maken? Het antwoord is ja. Iedere Boleaanse functie is namelijk te schrijven als een combinatie van NAND- of NOR-poorten. Dit betekent dat we elke logische functie kunnen maken: het enige wat we hoeven te doen is onze NAND-poorten (of NOR-poorten) op een gepaste manier met elkaar verbinden. Willen we bijvoorbeeld een AND-poort maken, kunnen we de schakeling van Figuur 3.16 gebruiken. We beschikken met andere woorden over de nodige elementen voor een algemene uitbreiding naar stochastische logische schakelingen die werken via *simulated annealing*.

In de praktijk zijn er echter twee beperkingen die deze uitbreiding bemoeilijken. Ten eerste liggen de macrospins van de verbindingen niet in hetzelfde vlak als de macrospins van de poorten. Ten tweede moet er voor iedere schakeling een eigen, optimaal koelschema worden opgesteld. Het vinden van dit koelschema is zoals uitgelegd in Sectie 3.3.1 tot op heden een niet-triviaal (numeriek) probleem.

Verder kan er nog onderzocht worden of macrospins met concave vorm of met biaxiale anisotropie, die een gunstig effect hebben op het correct functioneren van een deterministische schakeling, ook een positieve invloed hebben op de werking van onze stochastische poorten en schakelingen. Wij hebben namelijk uitsluitend gewerkt met ellipsoïdale macrospins met uniaxiale anisotropie.

De logische poorten zijn een eerste stap richting een artificieel neurale netwerk. Enkele cruciale vragen zoals ‘Hoe kan men de magnetische netwerken trainen?’ en ‘Wat is het beste leerproces?’ zijn in dit werk echter niet aan bod gekomen en moeten in de toekomst onderzocht worden. We geven een eerste aanzet door vast te stellen dat tijdens het trainen van een ANN de gewichtsfactoren w op basis van een leerproces aangepast worden tot de optimale w bekomen worden. Door de analogie tussen een ANN en magnetisch netwerk weten we dat dit bij een magnetisch netwerk neerkomt op het veranderen van de interactiesterkte tussen de macrospins. Hiervoor moet een techniek ontwikkeld worden waarbij men de eigenschappen van ieder deeltje (M_{sat} , V , $\mathbf{u}$...) kan variëren. Hoe deze techniek er concreet moet uitzien, is voorlopig nog onduidelijk en voer voor verder onderzoek.

Bibliografie

- [1] McCulloch WS, Pitts W (1943) A Logical Calculus of Ideas Immanent in Nervous Activity. *Bull. Mathematical Bio-physics*, Vol. 5, 1943, pp. 115-133.
- [2] Jain AK, Jinchang Mao, Mohiuddin KM (1996) Artificial Neural Networks: A Tutorial. *Computer*, Vol. 29, Iss. 3, pp. 31-44. doi:[10.1109/2.485891](https://doi.org/10.1109/2.485891).
- [3] Minsky M, Papert S (1969) *Perceptrons: An Introduction to Computational Geometry*. MIT Press, Cambridge, Mass., 1969.
- [4] Hebb DO (1949) *The Organization of Behavior*. John Wiley & Sons, New York.
- [5] Abraham A (2005) 129 Artificial Neural Networks. In 'Handbook of Measuring System Design', pp. 901-908, John Wiley & Sons, New York. doi:[10.1002/0471497398.mm421](https://doi.org/10.1002/0471497398.mm421).
- [6] Rumelhart DE, McClelland JL (1986) *Parallel Distributed Processing: Exploration in the Microstructure of Cognition*. MIT Press, Cambridge, Mass., 1986.
- [7] Hopfield JJ (1982) Neural Networks and Physical Systems with Emergent Collective Computational Abilities. *Proc. Nat'l Academy of Sciences, USA* 79, pp. 2554-2558.
- [8] Coey JMD (2010) *Magnetism and Magnetic Materials*. Cambridge Univ. Press, New York.
- [9] Leliaert J, Vansteenkiste A, Coene A, Dupré L, Van Waeyenberge B (2014) Vinamax: a macrospin simulation tool for magnetic nanoparticles. *Med. Biol. Eng. Comput.* (2015) 53:309-317. doi:[10.1007/s11517-014-1239-6](https://doi.org/10.1007/s11517-014-1239-6).
- [10] Balachandra Rao S, Shantha CK (2004) *Numerical Methods with Programs in BASIC, FORTRAN, Pascal and C++*. Universities Press.
- [11] Breth L, Suess D, Vogler C, Bergmair B, Fuger M, Heer R, Brueckl H (2012) Thermal switching field distribution of a single domain particle for field-dependent attempt frequency. *J. Appl. Phys.* 112(2):023903. doi:[10.1063/1.4737413](https://doi.org/10.1063/1.4737413).

- [12] Lee A, Liu Z, Bertotti G, Serpico G, Mayergoyz I (2014) Analysis of random magnetization switching using monte carlo simulations. *Phys. B: Condens Matter* 435:100-104. In: 9th international symposium on hysteresis modeling and micromagnetics (HMM 2013). doi:[10.1016/j.physb.2013.07.020](https://doi.org/10.1016/j.physb.2013.07.020).
- [13] Jonsson T, Mattsson J, Djurberg C, Khan FA, Nordblad P, Svedlindh P (1995) Aging in a Magnetic Particle System. *Phys. Rev. Lett.* 75(22):4138-4141. doi:[10.1103/PhysRevLett.75.4138](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.4138).
- [14] Sahoo S, Petravic O, Kleemann W (2003) Aging and memory in a superspin glass. *Phys. Rev. B* 67, 214422. doi:[10.1103/PhysRevB.67.214422](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.214422).
- [15] Fisher DS, Huse DA (1988) Nonequilibrium dynamics of spin glasses. *Phys. Rev. B* 38, 373. doi:[10.1103/PhysRevB.38.373](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.373).
- [16] Segura J, Hawkins CF (2004) *CMOS Electronics: how it works, how it fails*. John Wiley & Sons, New York.
- [17] Porod W, Bernstein GH, Csaba G, Hu XS, Nahas J, Niemier MT, Orlov A (2014) Nanomagnet Logic NML. In 'Field-Coupled Nanocomputing' pp. 21-32. Springer Berlin Heidelberg. doi:[10.1007/978-3-662-43722-3_2](https://doi.org/10.1007/978-3-662-43722-3_2).
- [18] Lambson B, Carlton D, Bokor J (2011) Exploring the thermodynamic limits of computation in integrated systems: magnetic memory, nanomagnetic logic, and the Landauer limit. *Phys. Rev. Lett.* 107,010604.
- [19] Niemier MT, Hu XS, Alam M, Bernstein GH, Porod W, Putney M, DeAngelis J (2007) Clocking structures and power analysis for nanomagnet-based logic devices. *ACM/IEEE International Symposium on Low Power Electronics and Design (ISLPED)*, pp. 26-31.
- [20] Lambson B, Gu Z, Monroe M, Dhuey S, Scholl A, Bokor J (2013) Concave nanomagnets: investigation of anisotropy properties and applications to nanomagnetic logic. *Appl. Phys. A* (2013) 111:413-421. doi:[10.1007/s00339-013-7654-y](https://doi.org/10.1007/s00339-013-7654-y).
- [21] Carlton DB, Emley NC, Tuchfeld E, Bokor J (2008) Simulation studies of nanomagnet-based logic architecture. *Nano Lett.* 8, 4173-4178.
- [22] Csaba G, Lugli G, Porod W (2004) Power dissipation in nanomagnetic logic devices. *Proc. of 4th IEEE Conf. on Nano*, pp. 346-348.
- [23] Behin-Aein B, Salahuddin S, Datta S (2009) Switching Energy of Ferromagnetic Logic Bits. *IEEE Trans. on Nanotechnology* Vol. 8, Iss. 4, pp 505-514. doi:[10.1109/TNANO.2009.2016657](https://doi.org/10.1109/TNANO.2009.2016657).

-
- [24] Pulecio JF, Pendru PK, Kumari A, Bhanja S (2011) Magnetic Cellular Automata Wire Architectures. *IEEE Trans. on Nanotechnology* Vol. 10, No. 6 (November 2011). doi:[10.1109/TNANO.2011.2109393](https://doi.org/10.1109/TNANO.2011.2109393).
- [25] Imre A, Csaba G, Ji L, Orlov A, Bernstein GH, Porod W (2006) Majority logic gate for magnetic quantum-dot cellular automata. *Science* 311, 205-208.
- [26] Nogués J, Schuller IK (1999) Exchange bias. *Journal Of Magnetism and Magnetic Materials* 192 (1999) 203-232.
- [27] Metropolis N, Rosenbluth AW, Rosenbluth MN, Teller AH, Teller E (1953) Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *J. Chem. Phys.* 21, 1087. doi:[10.1063/1.1699114](https://doi.org/10.1063/1.1699114).
- [28] Kirkpatrick S, Gelatt CD, Vecchi MP (1983) Optimization by Simulated Annealing. *Science, New Series*, Vol. 220, No. 4598. (May 13, 1983), pp. 671-680. doi:[10.1126/science.220.4598.671](https://doi.org/10.1126/science.220.4598.671).
- [29] Nourani Y, Andresen B (1998) A comparison of simulated annealing cooling strategies. *J. Phys. A: Math. Gen.* 31 (1998) 8373-8385.
- [30] Newman MEJ, Barkema GT (2011) *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press Inc., New York.
- [31] Wilhelm MR, Ward TL (1987) Solving Quadratic Assignment Problems by Simulated Annealing. *IEE Transactions* 19(1):107-119. doi:[10.1080/07408178708975376](https://doi.org/10.1080/07408178708975376).
- [32] Connolly DT (1990) An improved annealing scheme for the QAP. *European Journal of Operational Research* 46 (1990) 93-100. doi:[10.1016/0377-2217\(90\)90301-Q](https://doi.org/10.1016/0377-2217(90)90301-Q).
- [33] Hajek B (1988) Cooling schedules for optimal annealing. *Math. Oper. Res.* 13 311-329.
- [34] Geman S, Geman D (1984) Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and Bayesian Restoration of Images. *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.*, PAMI-6 6 721-741. doi:[10.1109/TPAMI.1984.4767596](https://doi.org/10.1109/TPAMI.1984.4767596).
- [35] Bölte A, Thonemann UW (1996) Optimizing simulated annealing schedules with genetic programming. *European Journal of Operational Research* 92 (1996) 402-416. doi:[10.1016/0377-2217\(94\)00350-5](https://doi.org/10.1016/0377-2217(94)00350-5).
- [36] Davis L, Ritter F (1987) Schedule optimization with probabilistic search. *IEEE* (1987) 231-235.