

## MA 28 Magnetische Partikel/Cluster I

Zeit: Dienstag 15:15–18:30

Raum: TU H1028

MA 28.1 Di 15:15 TU H1028

**Magnetic and spectroscopic properties of deposited transition metal clusters** — ●S. BORNEMANN, J. MINÁR, and H. EBERT — Dep. Chemie, LMU, Butenandtstr. 5-13, 81377 München, Germany

The fully relativistic spin-polarized KKR method has been used to study the magnetic and spectroscopic properties for supported clusters. For a variety of clusters supported on various transition metal substrates it is shown that the magnetic properties depend on several different parameters such as substrate type, cluster size as well as shape etc. This applies especially if one considers properties caused by spin-orbit coupling like the X-ray magnetic circular dichroism (XMCD). In line with recent experimental findings a very pronounced magnetic circular dichroism in X-ray absorption is found for Co-clusters on Pt(111). The results for the XMCD spectra and their connection with the spin, orbital and spin dipolar moments will be discussed on the basis of the so-called sum rules. Furthermore, theoretical results for FePt-clusters on Cu(001), Ag(001) and Au(001) are shown as the bulk material of FePt is well known for having a large magnetic anisotropy.

MA 28.2 Di 15:30 TU H1028

**Elektronenkorrelation in Fe Clustern: Einfluß auf Struktur und Magnetismus** — ●GEORG ROLLMANN, SANJUBALA SAHOO und PETER ENTEL — Theoretische Tieftemperaturphysik, Universität Duisburg-Essen, Lotharstr. 1, D-47048 Duisburg

Über die Eigenschaften kleinster magnetischer Cluster ist von experimenteller Seite häufig nur wenig bekannt, so daß ein Großteil der zur Zeit verfügbaren Information oftmals aus numerischen Untersuchungen stammt. Die im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie (DFT) gefundenen Grundzustände von Fe Clustern sind von starken Jahn-Teller-Verzerrungen sowie kollinearen, ferromagnetischen Momenten geprägt. Ergebnisse hochgenauer quantenchemischer Rechnungen legen jedoch die Vermutung nahe, daß sowohl magnetische, als auch strukturelle Eigenschaften durch die reine DFT nicht richtig wiedergegeben werden.

Dies wird durch Ergebnisse der von uns durchgeführten Rechnungen im Rahmen der DFT +  $U$  Methode, bei der intra-atomare Korrelationseffekte durch einen Hubbard-artigen Term berücksichtigt werden, bestätigt. Wir finden eine Erhöhung der magnetischen Momente schon bei kleinen Werten für  $U$ , verbunden mit einer Volumenvergrößerung sowie einem Rückgang der geometrischen Verzerrung, und führen dies auf Änderungen in der elektronischen Struktur der Cluster zurück.

MA 28.3 Di 15:45 TU H1028

**Temperature Dependence of Magnetic Properties of Small Ferromagnetic Clusters** — ●SVETLANA POLESYA<sup>1</sup>, SVEN BORNEMANN<sup>1</sup>, JAN MINÁR<sup>1</sup>, HUBERT EBERT<sup>1</sup>, and ONDREJ ŠÍPR<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Dept. Chemie und Biochemie, Universität München, Butenandtstr. 5-13, D-81377 München, Germany — <sup>2</sup>Institute of Physics Acad. of Sci. of the Czech Republic, Cukrovarnicka 10, Praha 6 162 53, Czech Republic

The temperature dependence of the magnetic properties of small ferromagnetic clusters has been studied within the extended classical Heisenberg model using Monte-Carlo simulations. The exchange coupling constants were obtained from *ab initio* spin-polarized KKR calculations of the electronic structure. Results of calculations for Co clusters both unsupported and deposited on Pt(111) surface will be presented. In particular the influence of the spin-orbit induced anisotropy on their thermodynamic properties will be discussed. The peculiarities of the cluster electronic structure lead to a nonmonotonical size dependent Curie temperature for small Fe, Co and FePt clusters. The use of exchange coupling constants taken from bulk calculations on the other hand results in a monotonous increase of the Curie temperature.

MA 28.4 Di 16:00 TU H1028

**Magnetic moments of Co clusters on Au(111)** — ●JÁN MINÁR<sup>1</sup>, O. ŠÍPR<sup>2</sup>, H. EBERT<sup>1</sup>, and V. POPESCU<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Dep. Chemie, LMU, Butenandtstr. 5-13, 81377 München, Germany — <sup>2</sup>Institute of Physics AS CR, Cukrovarnicka 10, Praha, Czech Republic

Generally, magnetic moments of atoms at surfaces and interfaces are larger than magnetic moments of these atoms in the bulk. This property opens a number of interesting topics for fundamental research and has a great potential for industrial applications as well. Recently a lot of experimental effort focused on studying magnetism of Co clusters on Au(111)

[1]. These clusters are self-assembled at the elbows of the Au(111) herringbone reconstruction and attain a two-atomic-layers height for a broad range of coverages. In order to assess various contributions to magnetism of these systems, we performed a series of fully relativistic *ab-initio* calculations of electronic and magnetic structure of Co monolayer and bilayer and of  $\text{Co}_n$  clusters ( $n=1-10$ ) on Au(111), employing the spin-polarized tight-binding multiple-scattering formalism [2]. By comparing our theoretical results for different systems one with another and with available experimental data, general conclusions about the nature of magnetism of Co clusters on Au(111) can be drawn.

[1] . A. Dürr et al., Phys. Rev. B 59, R701 (1999); T. Koide et al., Phys. Rev. Lett. 87, 257201 (2001); N. Spiridis et al., Surf. Sci. 507-510, 546 (2002)

[2] R. Zeller et al., Phys. Rev. B 52, 8807 (1995)

MA 28.5 Di 16:15 TU H1028

**Mass filtered magnetic FeCo clusters** — ●FURKAN BULUT<sup>1</sup>, RENATE KERSTIN GEBHARDT<sup>1</sup>, JOACHIM BANSMANN<sup>2</sup>, ARMIN KLEIBERT<sup>2</sup>, RALF METHLING<sup>2</sup>, KARL-HEINZ MEIWES-BROER<sup>2</sup>, and MATHIAS GETZLAFF<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Institut für Angewandte Physik, Uni Düsseldorf — <sup>2</sup>Fachbereich Physik, Uni Rostock

FeCo is a binary alloy with a large magnetic moment. Therefore FeCo clusters are promising candidates for thin film magnetic storage devices. Such clusters are produced by means of a continuously working arc cluster ion source (ACIS). A subsequent electrostatic quadrupole acts as mass filtering element of the alloy clusters. Typical diameters are between 6 and 12 nm. The clusters are deposited on ferromagnetic Ni/W(110)-surfaces under UHV conditions. AFM measurements prove that the height of the clusters is less than the diameter of free particles that is probably caused by particle-support interactions. Element specific magnetic studies were performed by means of X-ray magnetic circular dichroism (XMCD) at BESSY. We will also discuss saturation effects which have to be taken into account when applying sum rules for spin and orbital moment calculations.

MA 28.6 Di 16:30 TU H1028

**Strukturelle Charakterisierung von in der Gasphase hergestellten FePt-Nanopartikeln** — ●OLGA DMITRIEVA, JOCHEN KÄSTNER und GÜNTER DUMPICH — Experimentalphysik, AG Farle, Universität Duisburg-Essen (Standort Duisburg), Lotharstrasse 1, 47057 Duisburg

Untersucht werden strukturelle Eigenschaften von FePt-Nanopartikeln, die mittels Sputtern und anschließendem Tempern in der Gasphase hergestellt werden. Es zeigt sich, dass die kristalline Struktur und Morphologie der Partikel vom Sputterdruck und der Sintertemperatur abhängt. Mit hochauflösender Transmissionselektronenmikroskopie (HRTEM) wird festgestellt, dass bei einem Sputterdruck von 0,5 mbar monodisperse, thermisch stabile ikosaedrische Partikel entstehen. Bei höherem Druck bis 2 mbar entstehen dagegen polydisperse Nanopartikel, die teilweise eine geordnete, durch hohe magnetokristalline Anisotropie geprägte  $L1_0$ -Phase bilden. Da die Ordnungseinstellung auf Volumendiffusion beruht, wird versucht, die Anzahl der Leerstellen während der Partikelherstellung durch Zugabe von Stickstoff im Sputtergas zu erhöhen. Erste Ergebnisse über den Einfluss von Stickstoff auf die strukturellen und magnetischen Eigenschaften der FePt-Nanopartikel werden dargestellt und diskutiert.

Gefördert aus Mitteln der DFG im Rahmen des SFB 445.

MA 28.7 Di 16:45 TU H1028

**Ionenstrahlinduzierte Strukturänderungen in FePt Nanopartikeln** — ●B. RELLINGHAUS<sup>1</sup>, O. DMITRIEVA<sup>2</sup>, M.O. LIEDKE<sup>3,4</sup>, L. SCHULTZ<sup>1</sup> und J. FASSBENDER<sup>4</sup> — <sup>1</sup>IFW Dresden, Institut für Metallische Werkstoffe, 01069 Dresden — <sup>2</sup>Institut für Physik, AG Farle, Universität Duisburg-Essen, 47048 Duisburg — <sup>3</sup>Fachbereich Physik, TU Kaiserslautern, 67663 Kaiserslautern — <sup>4</sup>FZ Rossendorf, Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung, 01314 Dresden

Monodisperse, vielfach verzwilligte FePt Nanopartikel mit ikosaedrischer Struktur und Konzentrationen im Bereich der stöchiometrischen Zusammensetzung wurden durch DC-Sputtern in der Gasphase hergestellt. Die ikosaedrische Struktur der Partikel hat sich dabei als äußerst stabil erwiesen, und weder thermisches Anlassen im Fluge noch nach der Deposition führt zur Einstellung der magnetisch hochanisotropen,

chemisch geordneten tetragonalen L1<sub>0</sub>-Gleichgewichtsstruktur [1]. Eine Bestrahlung dieser Teilchen durch 5 keV He-Ionen bei Fluenzen von  $f > 10^{17}$  Ionen/cm<sup>2</sup> hingegen führt zur Umwandlung in die kfz Struktur. Obwohl die Ionenbestrahlung die Versinterung benachbart liegender Partikel initiiert und somit eine erhöhte Diffusion aufgrund einer temporär erhöhten Defektkonzentration belegt, wird die Einstellung der L1<sub>0</sub>-Phase nicht beobachtet. Die Ergebnisse werden durch kinetisch bedingte Modifikationen der thermodynamischen Gleichgewichtsphasen erklärt.

[1] S. Stappert, B. Rellinghaus, M. Acet, and E.F. Wassermann, Proc. Mat. Res. Soc. Vol. **704**, 73 (2002); S. Stappert, B. Rellinghaus, M. Acet, and E.F. Wassermann, J. Cryst. Growth **252**, 440 (2003).

Gefördert durch die DFG im Rahmen des SFB 445.

MA 28.8 Di 17:00 TU H1028

**Temperaturabhängige effektive magnetische Anisotropie in Fe<sub>70</sub>Pt<sub>30</sub>-Nanopartikeln** — ●C. ANTONIAK, J. LINDNER und M. FARLE — Experimentalphysik - AG Farle, Universität Duisburg-Essen, Lotharstr. 1, 47048 Duisburg

Chemisch ungeordnete monodisperse Fe<sub>70</sub>Pt<sub>30</sub>-Nanopartikel mit einem Durchmesser von  $(2.3 \pm 0.3)$  nm wurden mittels ferromagnetischer Resonanz (FMR) und SQUID-Magnetometrie zwischen 4.2K und 370K untersucht. Wir finden, dass der im Vergleich zu bulk-Legierungen um eine Zehnerpotenz erhöhte Wert der effektiven Anisotropie-Konstanten  $K_{eff} = (8.4 \pm 0.9) \times 10^5$  J/m<sup>3</sup> bei 23K stark mit steigender Temperatur abfällt und bei Zimmertemperatur weniger als 10% dieses Wertes beträgt. Die Erhöhung kann mithilfe eines einfachen Modells durch die Oxidhülle erklärt werden.

Quantitative Simulationen der magnet. Daten bestätigen das Ergebnis und zeigen die Notwendigkeit, auch in superparamagnetischen Partikel-Systemen die Temperaturabhängigkeit der magnet. Anisotropie zu berücksichtigen.

Unterstützt durch die Europäische Gemeinschaft (HPRN-1999-00150) und die Deutsche Forschungsgemeinschaft, SFB 445.

MA 28.9 Di 17:15 TU H1028

**Gitterdehnung in kolloidalen Fe<sub>x</sub>Pt<sub>1-x</sub>-Nanopartikeln mit 3 nm Durchmesser** — ●ANASTASSIA TROUNOVA, MARINA SPASOVA und MICHAEL FARLE — Experimentalphysik-AG Farle, Universität Duisburg-Essen, 47048 Duisburg

Chemisch synthetisierte kolloidale Fe<sub>x</sub>Pt<sub>1-x</sub>-Nanopartikel ( $0.4 \leq x \leq 0.6$ ), die sowohl in Hexan als auch in Wasser [1] dispergiert sind, wurden mittels hochauflösender Transmissionselektronenmikroskopie strukturell und chemisch charakterisiert. Zunächst konnte gezeigt werden, dass durch fünfmalige Sedimentationsfraktionierung die Monodispersität der frisch präparierten Partikel mit einem mittleren Durchmesser von 3 nm wesentlich erhöht werden kann (Standardabweichung  $\sigma = 8\%$ ). Wir finden eine lineare Vergrößerung der Gitterkonstante der chemisch ungeordneten Partikel als Funktion der Pt-Konzentration. Gegenüber dem Volumenverhalten sind die Gitterkonstanten der Nanopartikel um ca. 2 – 3% gedehnt. Dieses Verhalten wird semi-quantitativ durch die auf das Gitter ausgeübten Spannungen erklärt, welche aufgrund der bekannten Oberflächenoxidation in den kolloidalen Partikeln auftreten. [1] V.Salgueirino-Maceira et al., Langmuir **20**, 6946 (2004)

Unterstützt durch Sonderforschungsbereich 445 und Europäische Union, RTN-00150.

MA 28.10 Di 17:30 TU H1028

**Monte Carlo Simulations of Thermodynamic Properties of FePt Nanoparticles** — ●MICHAEL MÜLLER and KARSTEN ALBE — TU Darmstadt, FB Materialwissenschaft, Petersenstr. 23, 64287 Darmstadt

To date, a number of experimental routes for synthesizing FePt nanoparticles have been developed. In many cases, the disordered fcc phase instead of the desired L1<sub>0</sub> ordered phase is obtained even at low temperatures and it is still unclear whether this is due to kinetic or thermodynamic reasons. Therefore, a detailed investigation of the thermodynamic properties of nanoalloys as a function of particle size, temperature and composition can provide important information.

In our work we have chosen a lattice Monte-Carlo model combined with a spin-1/2 Ising model including nearest and next nearest neighbor interactions. The parameters of the model were fitted to the FePt bulk phase diagram and experimental data on Pt surface segregation. By using this model, we have systematically explored the influence of particle size and chemical composition on the ordering temperature as well as the segregation of Fe and Pt in ordered particles. In general, we find no evidence for a considerable decrease of the ordering temperature with

particle size. On the other hand, a lowering of the ordering temperature with increasing deviation from stoichiometry could clearly be observed. This effect was found to be strongly asymmetric with respect to compositions enriched with Fe or Pt, which can be explained by differences in the segregation behaviors of the two elements at the surface.

MA 28.11 Di 17:45 TU H1028

**Frequenzabhängige Ferromagnetische Resonanz an CoPt<sub>3</sub> Nanopartikeln** — ●CHRISTIAN RAEDER<sup>1</sup>, MARINA SPASOVA<sup>1</sup>, JÜRGEN LINDNER<sup>1</sup>, MICHAEL FARLE<sup>1</sup>, ELENA SHEVCHENKO<sup>2</sup>, HORST WELLER<sup>2</sup>, RATISLAV MALYCH<sup>3</sup> und ZDENEK FRAIT<sup>3</sup> — <sup>1</sup>Fachbereich Physik, Experimentalphysik AG Farle, Universität Duisburg-Essen, Lotharstr. 1, 47048 Duisburg — <sup>2</sup>Institut für physikalische Chemie, Universität Hamburg, Grindelallee 117, 20146 Hamburg — <sup>3</sup>Institute of Physics, Academy of Sciences, Na Slovance 2, 18221 Prague 8, Czech Republic

Kolloidale CoPt<sub>3</sub> Nanopartikel mit einem Durchmesser von 4 nm, in hoher Verdünnung eingebettet in ein Polymer, wurden mittels Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) und ferromagnetischer Resonanz (FMR) untersucht. Es liegt eine ungeordnete fcc-Phase vor. Die Partikel haben gegenüber dem Volumenmaterial eine um 3% vergrößerte Gitterkonstante von  $a=0.393 \pm 0.005$  nm. Die Blocking-Temperatur beträgt  $T_B=12$  Kelvin. Das aus dem g-Faktor berechnete Verhältnis aus Bahn- und Spinnmoment beträgt  $\mu_L/\mu_S=0.113 \pm 0.006$ . Durch Analyse der Linienspektren der FMR Spektren ( $T=300$ K) wurde ein stark erhöhter Gilbert Damping Parameter bestimmt:  $G=32 \pm 2$  GHz gegenüber bulk Cohcp:  $G=0.1$  GHz. Unterstützt durch EU Netzwerk RTN-CT-1999-00150.

MA 28.12 Di 18:00 TU H1028

**Experimentelle Untersuchung und theoretische Modellierung des Relaxationsverhaltens von Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-Nanoteilchen für die Magnetorelaxometrie** — ●FRANK LUDWIG, SASCHA MÄUSELEIN, ERIK HEIM und MEINHARD SCHILLING — Institut für Elektrische Messtechnik und Grundlagen der Elektrotechnik, TU Braunschweig, Hans-Sommer-Str. 66, D-38106 Braunschweig

Die Magnetorelaxometrie (MRX) ist ein vielversprechendes Verfahren für die Detektion von Biomolekülen. Dabei werden die Zielmoleküle spezifisch über Antikörper an superparamagnetische Nanoteilchen gebunden, deren Relaxation nach Abschalten eines Magnetisierungsfeldes analysiert wird. Dabei unterscheidet sich das Relaxationsverhalten gebundener und ungebundener magnetischer Marker, so dass im Gegensatz zu anderen Verfahren keine Auswaschschritte ungebundener Marker erforderlich sind.

Wir haben das Relaxationsverhalten magnetischer Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-Nanoteilchen verschiedener Hersteller als Funktion der Magnetisierungszeit und der Magnetisierungsfeldstärke für verschiedene Konzentrationen in Lösung als auch im gefriergetrockneten Zustand untersucht. Es zeigt sich, dass die bisher für die Analyse von MRX-Messungen verwendeten Modelle nur für einen sehr begrenzten Parameterbereich gelten.

Gefördert durch die DFG über den SFB 578.

MA 28.13 Di 18:15 TU H1028

**Preparation and properties of thin magnetic metal-polymer nanocomposite films** — ●HENRY GREVE<sup>1</sup>, ABHIJIT BISWAS<sup>2</sup>, CHRISTIAN POCHSTEIN<sup>1</sup>, ULRICH SCHÜRMANN<sup>1</sup>, VLADIMIR ZAPOROJCHENKO<sup>1</sup>, FRANZ FAUPEL<sup>1</sup>, MICHAEL FROMMBERGER<sup>3</sup>, and ECKHARD QUANDT<sup>3</sup> — <sup>1</sup>Chair for Multicomponent Materials, Faculty of Engineering, CAU Kiel, Kaiserstr. 2, 24143 Kiel — <sup>2</sup>Institute for Shock Physics, Washington State University Spokane, U.S.A. — <sup>3</sup>Smart Materials Group, CAESAR, 53175 Bonn

Thin composite films consisting of a magnetic material inside an insulating polymer matrix show very fascinating properties and may be applied in different areas ranging from high density hard disc storage to inductive components useable up and beyond the GHz barrier. We prepared metal-polymer composite films by vapor phase co-deposition. The film structure was characterized by profilometry, EDX and TEM. Depending on deposition parameters and materials we either observe metal clusters or nanocolumns inside a polymer matrix. The cluster nanocomposites are considered to be ideal for high frequency applications due to minimized eddy current losses and a high ferromagnetic resonance frequency. The columnar nanocomposite shows vertically aligned columns of 5-8 nm diameter. Due to small dimensions of the columns and their high shape anisotropy they are promising candidates for high density data storage.