

# Spinpolarisierter Transport in Ferromagnet/Halbleiter-Tunnelsystemen



Diplomarbeit  
von  
Michael Wimmer  
aus  
Regensburg

durchgeführt am Institut I für  
Theoretische Physik  
der Universität Regensburg  
unter Anleitung von  
Prof. Dr. Klaus Richter

Januar 2004



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Spinabhängige Transporttheorie</b>	<b>7</b>
2.1	Hamiltonian des Systems . . . . .	7
2.1.1	Ortsabhängige effektive Masse . . . . .	8
2.1.2	Stoner-Modell als Beschreibung eines Ferromagneten . . . . .	10
2.1.3	Endgültige Form des Hamiltonians . . . . .	12
2.2	Unordnung im System . . . . .	12
2.2.1	Anderson-Modell . . . . .	12
2.2.2	Erweiterung auf Spin-Flip-Streuung . . . . .	14
2.3	Mesoskopische Transporttheorie . . . . .	18
2.3.1	Landauer-Formel . . . . .	18
2.3.2	Fisher-Lee-Relation . . . . .	20
2.4	Numerische Lösung des Transportproblems . . . . .	21
2.4.1	Tight-Binding-Darstellung des Hamiltonians . . . . .	21
2.4.2	Rekursiver Algorithmus . . . . .	25
2.5	Implementierung des numerischen Algorithmus . . . . .	28
2.5.1	Effiziente Numerik zur linearen Algebra . . . . .	28
2.5.2	Interpolation der effektiven Masse . . . . .	31

---

2.6	Reproduktion bekannter Ergebnisse . . . . .	34
2.6.1	Tunneln durch eine Barriere . . . . .	34
2.6.2	Transport im Magnetfeld . . . . .	35
2.6.3	Spin-Flip-Streuung . . . . .	37
<b>3</b>	<b>Tunnelmagnetowiderstand einer geordneten Barriere</b>	<b>39</b>
3.1	Effektive Tunnelzustandsdichte nach Stearns . . . . .	39
3.2	Juillièrè-Modell . . . . .	41
3.3	Bratkovsky-Modell . . . . .	42
3.4	Bemerkungen zur Numerik . . . . .	46
3.5	Magnetfeldabhängigkeit des Tunnelwiderstands . . . . .	47
<b>4</b>	<b>Auswirkung von Unordnung auf den TMR-Effekt</b>	<b>51</b>
4.1	Unordnung nahe der Grenzflächen . . . . .	52
4.1.1	Auswirkungen auf die Transmission . . . . .	53
4.1.2	Auswirkungen auf den TMR-Effekt . . . . .	59
4.1.3	Vergleich von Streuung mit und ohne Spin-Flip . . . . .	63
4.2	Diffusiver Transport im Ferromagneten . . . . .	66
4.3	Vergleich mit GMR . . . . .	67
4.4	Unordnung in der Barriere . . . . .	71
4.5	Einfluss von Randbedingungen und Dimensionalität . . . . .	75
4.5.1	Einfluss der Randbedingungen . . . . .	75
4.5.2	Dreidimensionale Systeme . . . . .	77
4.6	Zusammenfassung . . . . .	78

---

<b>5 Modelle zur Interdiffusion an den Grenzflächen</b>	<b>83</b>
5.1 TMR-Effekt im Kirczenow-Modell . . . . .	83
5.2 TMR-Effekt in einem Modell mit Interpolation der effektiven Masse . .	87
5.3 TMR-Effekt in der <i>virtual crystal approximation</i> . . . . .	91
5.4 Zusammenfassung . . . . .	93
<b>6 Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>95</b>
<b>Anhang</b>	<b>101</b>
<b>A Das Störstellenmodell</b>	<b>101</b>
A.1 Statistische Eigenschaften des Störstellenmodells . . . . .	102
A.2 Streuraten . . . . .	103
<b>B Tight-Binding-Näherung des Hamiltonoperators</b>	<b>105</b>
B.1 Diskretisierung des Hamiltonoperators . . . . .	105
B.2 Das Störstellenmodell in Tight-Binding-Näherung . . . . .	109
<b>C Green-Funktion der Zuleitungen</b>	<b>111</b>
C.1 Tight-Binding-Wellenfunktionen . . . . .	111
C.2 Oberflächen-Green-Funktion . . . . .	113



# Kapitel 1

## Einleitung

Seit der Entdeckung des *giant-magnetoresistance*-Effekts (GMR) im Jahr 1988 [1] und der raschen, kommerziellen Anwendung dieses Effekts in Leseköpfen von Festplatten durch IBM [2] haben spinabhängige Transportphänomene großes Interesse sowohl auf experimenteller als auch theoretischer Seite hervorgerufen. Beim GMR-Effekt wird ein Unterschied im Widerstand von Ferromagnet/Metall-Vielschichtsystemen für verschiedene relative Magnetisierungen der ferromagnetischen Lagen gefunden. Dabei wird ausgenutzt, dass Elektronen in einem Ferromagneten *spinpolarisiert* sind — d. h. es gibt ein Übergewicht von Elektronen einer Spinrichtung — und somit je nach Spin unterschiedliche Transporteigenschaften aufweisen. Neben der Ladung spielt hier also auch der Spin des Elektrons eine entscheidende Rolle beim Transport.

Herkömmliche Halbleiterelektronik hat in den letzten Jahrzehnten einen rasanten Fortschritt erlebt, in absehbarer Zeit wird aber die zunehmende Miniaturisierung an physikalische Grenzen stoßen [3, 4]. Für eine weitere Fortentwicklung sind daher neue Konzepte nötig. Von einer Einbeziehung des Spinfreiheitsgrads der Elektronen — einer Weiterentwicklung von der „Elektronik“ zur „Spintronik“ — erhofft man sich gegenüber bisheriger Halbleitertechnologie schnellere Datenverarbeitung, geringere Leistungsaufnahme und schnelle, nichtflüchtige Datenspeicherung [5]. Elektronenspins in Festkörpern werden auch als mögliche Kandidaten zur Realisierung des *quantum computing* gehandelt [6].

Spinabhängige Effekte werden auch bei Tunnelprozessen gefunden. Tedrow und Meservey haben 1971 erstmals spinpolarisiertes Tunneln in Ferromagnet/Isolator/Supraleiter-Systemen beobachtet [7, 8]. Aufgrund der spinabhängigen Bandstruktur in Ferromagneten ergeben sich unterschiedliche Tunnelwahrscheinlichkeiten für die beiden Spinrichtungen. Stearns lieferte dabei eine einfache Erklärung für die beobachteten Spinpolarisationen, die nicht mit den Polarisationen der Zustandsdichten übereinstimmten. Der Tunnelstrom aus *s*-artigen Bändern wurde als der dominierende Anteil er-

kannt [9].

Juilli re fand erstmals 1975 einen Magnetowiderstandseffekt an einem Fe/Ge/Co-Tunnelement [10]. Er gab auch eine einfache theoretische Beschreibung des Tunnelmagnetowiderstandseffekts (TMR, von *tunneling magnetoresistance*), indem er das TMR-Verhaltnis mit der von Tedrow und Meservey gemessenen Spinpolarisation in Verbindung brachte:

$$TMR = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P} = \frac{2PP'}{1 - PP'}.$$

Dabei sind  $R_P$  und  $R_{AP}$  die Widerstande des Tunnelements bei Parallel- (P) und Antiparallelstellung (AP) der Magnetisierungen,  $P$  und  $P'$  die Spinpolarisationen der beiden Ferromagneten.

Das von Juilli re gemessene TMR-Verhaltnis betrug 14% bei 4.2 K und nahm mit steigender Temperatur und Spannung schnell ab. Erst 1994 gelang es Moodera *et al.*, einen reproduzierbaren TMR-Effekt auch bei Zimmertemperatur zu beobachten [11]. Heute werden TMR-Verhaltnisse bis zu 50% bei Zimmertemperatur gefunden [12]. Dieser hohe Wert macht den Tunnelmagnetowiderstandseffekt auch fur industrielle Anwendungen interessant.

Eine der prominentesten Anwendung des TMR-Effekts ist der sogenannte *magnetic random access memory* (MRAM) [13, 14]. Dabei handelt es sich um Speicherchips auf magnetischer Basis, in denen Daten nichtfluchtig gespeichert werden und die mit der Zugriffsgeschwindigkeit aktueller Speicherchips konkurrieren konnen.

Aufgrund des groen Unterschieds im Widerstand eines magnetischen Tunnelements, je nach Ausrichtung der Magnetisierungen der ferromagnetischen Schichten, kann ein derartiges Element als Speicher eines Bits (0 oder 1) dienen. Das Schreiben des Bits — d. h. andern der Magnetisierung einer Schicht — erfolgt durch das Magnetfeld einer Strom durchflossenen Leiterbahn, das Auslesen durch Messung des Widerstands. Bereits heute sind 4 MBit-Speicherchips produziert worden, die kommerzielle Einfuhrung wird fur die nahe Zukunft erwartet [15].

Auerdem wurde vorgeschlagen, auf Basis eines magnetischen Tunnelements reprogrammierbare elektronische Bauteile zu realisieren [16]. Ein Tunnelement mit vier unabhangigen Zuleitungen kann je nach Initialisierung als AND, OR, NAND oder NOR-Gate arbeiten. Speziell auf derartige „Chamaleon“-Prozessoren abgestimmte Programme konnten eine dramatische Erhohung der Rechengeschwindigkeit im Vergleich zu aktuellen Rechnern erfahren.

Neben den direkten Anwendungen des TMR-Effekts konnen spinabhangige Tunnelphanomene auch bei einem verwandten Effekt, der Spininjektion, eine wichtige Rolle spielen.

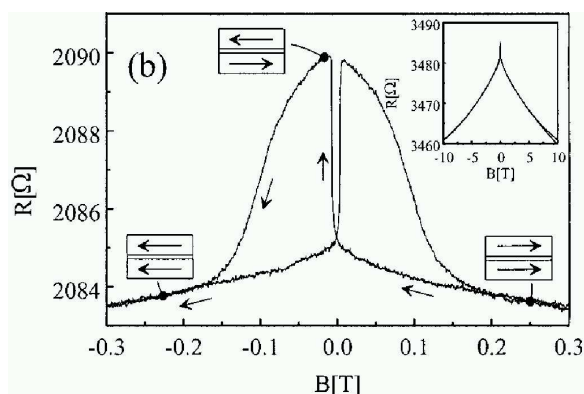
Vorschlage wie der Spin-Feldeffekt-Transistor nach Datta und Das [17] und die Beobachtung von groen Spin-Flip-Langen in Halbleitern ( $\sim 100 \mu\text{m}$  in GaAs [18]) lassen

es wünschenswert erscheinen, einen spinpolarisierten Strom kohärent in einen Halbleiter zu injizieren. Die erzielte Effizienz der Spininjektion aus einem ferromagnetischen Metall in einen Halbleiter ist jedoch enttäuschend. Aufgrund des großen Unterschieds im Widerstand des Ferromagneten und des Halbleiters ergibt sich eine verschwindend geringe Spininjektion [19]. Zur Lösung dieses Problems wurden ferromagnetische Halbleiter (z. B. (Ga,Mn)As [20]) vorgeschlagen, die Curie-Temperatur dieser Materialien liegt jedoch noch weit unter der Zimmertemperatur.

Es wurde jedoch gezeigt, dass auch die Einführung von Tunnelbarrieren zwischen Ferromagnet und Halbleiter zu einer Erhöhung der Spininjektionseffizienz führen kann [21]. Tatsächlich wurde bereits von einer Injektionseffizienz von 30% durch eine Schottky-Barriere an einer Fe/AlGaAs-Grenzfläche berichtet [22].

An der Universität Regensburg wurden Experimente zum TMR-Effekt in Fe/GaAs/Fe-Tunnelementen durchgeführt [23]. Dabei wurden Barrieren von 5–10 nm Dicke aus einkristallinem GaAs betrachtet, die wegen des Kontakts mit den Fe-Schichten eine Schottky-Barriere ausbilden. Die Fermi-Energie wird dabei über der Länge der Barriere in der Mitte der Bandlücke von GaAs festgehalten.

Im Gegensatz zu den amorphen  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Tunnelbarrieren ist der Vergleich von Theorie und Experiment für ein einkristallines System einfacher; damit sollte es möglich sein, den Einfluss der elektronischen Struktur auf den Tunnelprozess zu untersuchen. Ein Vergleich der Bandstrukturen von Fe und GaAs verprach einen großen TMR-Effekt für dieses System [24], ebenso ergeben *ab-initio*-Rechnungen für ein epitaktisches System aus Fe und GaAs eine sehr hohe Spininjektionseffizienz [25]. Aus Symmetriegründen koppeln die Majoritätsbänder von Fe effektiver an die Bandstruktur von GaAs. Der (Tunnel-)Strom ist somit stark spinpolarisiert, was zu einem großen Magnetowiderstandseffekt — nahe 100% — führen sollte.



**Abb. 1.1:** TMR-Effekt in Fe/GaAs/Tunnelement (aus [26]).

Tatsächlich wurde im Experiment, wie in Abbildung 1.1 gezeigt, lediglich ein TMR-Verhältnis von  $0.21 - 1.7\%$  gefunden [26, 27], weit unter den theoretisch vorhergesagten Werten. Das TMR-Verhältnis scheint dabei sensitiv auf Unordnung an der Grenzfläche zu reagieren, da Erhitzen der Probe zu einer Verringerung des beobachteten Tunnelmagnetowiderstandseffekts führt [27]. Neben dem unerwartet niedrigen TMR-Verhältnis wurde außerdem ein anomales Verhalten des Magnetowiderstands bei Parallelstellung der Magnetisierungen in hohen Magnetfeldern beobachtet. Anstatt des erwarteten *Anstiegs* des Tunnelwiderstands mit wachsendem Magnetfeld [28] wird zunächst eine lineare *Abnahme* beobachtet. Es wurde darüber spekuliert, ob Spin-Flip-Streuung für diesen Effekt und das kleine TMR-Verhältnis verantwortlich ist.

Nachfolgend wird ein kurzer Überblick über einige theoretische Modelle zur Berechnung des TMR-Effekts und über ihre Aussagen zum TMR-Verhältnis in Fe/GaAs/Fe-Tunnelsystemen gegeben:

Das Juillièrè-Modell für den TMR-Effekt liefert für die Spinpolarisation von Fe ( $P = 0.45$ , [12]) mit rund 50% ebenfalls einen höheren Wert als im Experiment beobachtet. Dabei wird das TMR-Verhältnis allein auf die Eigenschaften des Ferromagneten zurückgeführt. Dagegen wurde im Experiment gezeigt, dass auch Eigenschaften der Barriere — z. B. Dicke oder Höhe — signifikanten Einfluss auf den TMR-Effekt haben [11]. Eine erfolgreiche Theorie muss also auch die Eigenschaften der Barriere berücksichtigen.

Slonczewski stellte zuerst ein solches Modell vor [29], das später von Bratkovsky erweitert wurde [30]. Die Beschreibung erfolgt dabei im Rahmen eines freien Elektronengases unter Verwendung des Stoner-Modells für die Ferromagneten [31]. Die Barriere wird durch eine rechteckige Potentialstufe, die Bandstruktur von Ferromagnet und Barriere in der Erweiterung durch Bratkovsky mit Hilfe effektiver Massen beschrieben. Doch auch das Slonczewski-/Bratkovsky-Modell liefert einen zu großen Wert für das im Experiment gefundene TMR-Verhältnis [23].

Wie bereits erwähnt, ergeben Bandstruktur und *ab-initio*-Rechnungen einen sehr hohen Wert für den Magnetowiderstandseffekt in Fe/GaAs/Fe-Tunnelementen, da aus Symmetriegründen manche Bänder effektiver durch die Barriere tunneln können als andere. Eine derartige Effizienz aufgrund von Symmetrien kann aber durch Unordnung an den Grenzflächen aufgehoben werden, wie Kirzenow für ballistische Spininjektion zeigte [32].

Da auch im Experiment Hinweise auf den Einfluss von Unordnung auf das TMR-Verhältnis gefunden wurden, befasst sich diese Arbeit mit den Auswirkungen von Störstellen auf den TMR-Effekt in einem Fe/GaAs/Fe-Tunnelement. Da die Einführung von Unordnung in *ab-initio*-Rechnungen sehr aufwendig ist, beschränken wir uns auf einfachere Modelle.

Tsymbal und Pettifor haben bereits im Rahmen eines Single-Band-Tight-Binding-Modells (SBTB) gezeigt, dass Unordnung in der Barriere eine signifikante Reduktion

des TMR-Effekts bewirken kann [33]. Das verwendete Modell — eine stark ungeordnete, dünne ( $\sim 1\text{--}2\text{ nm}$ ) Barriere — ist dabei eher zur Beschreibung von  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Tunnelementen ausgerichtet, ebenso wie andere SBTB-Beschreibungen des TMR-Effekts [34–37].

Das Bratkovsky-Modell wird als Ausgangspunkt unserer Beschreibung gewählt. Im Gegensatz zu SBTB-Modellen sind die dabei auftretenden Materialparameter — effektive Massen, Barrierenhöhe, etc. — einer einfachen physikalischen Interpretation zugänglich. Wir erweitern das Bratkovsky-Modell, um sowohl Spin erhaltende als auch Spin-Flip-Unordnung berücksichtigen zu können, und untersuchen die Auswirkungen auf den TMR-Effekt. Dabei gehen wir wie folgt vor:

Im nächsten Kapitel stellen wir einen allgemeinen Formalismus zur Berechnung spinabhängiger Leitwerte in Systemen, die aus verschiedenen magnetischen und nicht-magnetischen Materialien bestehen und Unordnung enthalten, vor. Dabei wird eine ortsabhängige effektive Masse benutzt, um verschiedene Bandstrukturen näherungsweise zu beschreiben. Das Stoner-Modell dient der Modellierung magnetischer Materialien. Wir erweitern ein in [38] verwendetes phänomenologisches Modell zur Beschreibung von elastischer Streuung um die Möglichkeit von Spin-Flips. Damit können aus Experimenten bekannte mittlere freie Weglängen und Spin-Flip-Längen reproduziert werden.

Zur Berechnung des Leitwerts wird der Landauer-Formalismus verwendet und die dazu benötigte Transmissionsamplitude über die Fisher-Lee-Relation mit der Green'schen Funktion des Systems verknüpft. Nach einer Diskretisierung der kontinuierlichen Schrödinger-Gleichung kann diese mittels der Methode der rekursiven Green-Funktion numerisch berechnet werden. Wir zeigen, wie dieser Algorithmus effizient implementiert werden kann und schließen das Kapitel mit der Reproduktion bekannter Ergebnisse zur Überprüfung unserer Umsetzung.

In Kapitel 3 werden einfache Modelle zur Beschreibung des TMR-Effekts an idealen Barrieren vorgestellt. Wir gehen dabei auf die Definition der effektiven Tunnelzustandsdichte nach Stearns ein, die die Beschreibung von Fe durch ein Stoner-Modell rechtfertigt. Nach einer kurzen Vorstellung des Juillièrè-Modells betrachten wir das Bratkovsky-Modell näher, das Ausgangspunkt der folgenden Rechnungen sein wird. Dabei zeigen wir, dass keines der einfachen Modelle das niedrige TMR-Verhältnis des Experiments erklären kann. Wir schließen das Kapitel mit einer Betrachtung der Magnetfeldabhängigkeit des Tunnelwiderstands einer idealen Barriere.

Im vierten Kapitel untersuchen wir schließlich die Auswirkung von Störstellen auf den TMR-Effekt und betrachten dazu systematisch verschiedene Stärken der Unordnung. Dabei behalten wir die Form der rechteckigen Barriere des Bratkovsky-Modells bei. Für Unordnung auf beiden Seiten der Tunnelbarriere finden wir eine signifikante Reduktion des TMR-Effekts. Wir identifizieren die Aufhebung der  $k_{\parallel}$ -Erhaltung im ungeordneten System als Grund für die Verringerung des TMR-Verhältnisses. Diese fällt für

Spin erhaltende und Spin-Flip-Unordnung überraschenderweise beinahe gleich aus. Indem die Polarisationsabhängigkeit der Transmission untersucht wird, kann eine mögliche Erklärung für dieses Verhalten gegeben werden. Außerdem wird beobachtet, dass Unordnung umso effizienter zu einer Abschwächung des TMR-Effekts führt, je näher sie an der Barriere liegt.

Überdies zeigen wir an einem idealisierten Modell zum GMR-Effekt die Unterschiede im Einfluss von Unordnung auf Tunnelprozesse und diffusiven Transport auf. Eine Untersuchung von Störstellen in der Tunnelbarriere selbst findet qualitative Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Tsymbal und Pettifor. Allerdings beobachten wir auch dann noch eine effiziente Reduktion des TMR-Effekts, wenn sich die Störstellen nur am Rand der Barriere befinden und nicht die gesamte Barriere durchsetzen. Auch in diesem Fall zeigt sich kaum ein Unterschied in den Auswirkungen von Spin erhaltender und Spin-Flip-Streuung.

Wir schließen das Kapitel mit einer Untersuchung des Einflusses von Randbedingungen und der Dimensionalität auf unsere Rechnungen. Dabei finden wir eine qualitative Bestätigung der bereits erhaltenen Ergebnisse.

Während in der bisherigen Betrachtung die Form der Barriere selbst nicht geändert wurde, befassen wir uns in Kapitel 5 mit Modellen zur Beschreibung von Interdiffusion an den Grenzflächen. Dabei betrachten wir ein SBTB-Modell nach Kirczenow, ein Modell mit linear interpolierter Masse und ein Tight-Binding-Modell in der *virtual crystal approximation*. Dabei finden wir, dass die Ergebnisse extrem modellabhängig sind. Wir identifizieren zwei Mechanismen, die zu konkurrierenden Effekten im TMR-Verhältnis führen: Unordnung, die eine Reduktion des TMR-Effekts bewirkt, und Formänderung, die zu einer Erhöhung des TMR-Effekts führen kann. Je nach Modell sind diese Einflüsse unterschiedlich stark.

Zuletzt werden die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst. Die Arbeit schließt mit einem Ausblick auf mögliche Erweiterungen.

# Kapitel 2

## Spinabhängige Transporttheorie

Wir sind an den spinabhängigen Transporteigenschaften von Fe/GaAs/Fe-Tunnelsystemen unter dem Einfluss von Unordnung interessiert. Wir entwickeln daher in diesem Kapitel einen allgemeinen phänomenologischen Formalismus, der die Berechnung des Leitwert eines ungeordneten Systems, das aus verschiedenen Materialien besteht, möglich macht.

Dazu benutzen wir einen Hamilton-Operator, in dem die unterschiedlichen Bandstrukturen der Materialien des heterogenen Tunnelsystems durch eine ortsabhängige effektive Masse berücksichtigt werden. Magnetische Eigenschaften eines Materials werden durch das *Stoner*-Modell [31] beschrieben. Danach stellen wir ein Modell zur Beschreibung von Unordnung vor, mit dessen Hilfe nahezu beliebige mittlere freie Weglängen und Spin-Flip-Längen phänomenologisch realisiert werden können.

Wir benutzen den *Landauer*-Formalismus [39, 40] zur Berechnung des Leitwerts, und berechnen die dazu benötigten Transmissionsamplituden über die Fisher-Lee-Relation [41] aus der Green'schen Funktion des Systems. Die Diskretisierung der Schrödinger-Gleichung liefert eine Tight-Binding-Beschreibung des Systems, deren Green'sche Funktion effizient mittels der *Methode der rekursiven Green-Funktion* [42] numerisch berechnet werden kann.

Schließlich zeigen wir auf, wie der vorgestellte Algorithmus effizient implementiert werden kann. Eine Reproduktion analytisch bekannter Ergebnisse sichert die Zuverlässigkeit der Umsetzung.

### 2.1 Hamiltonian des Systems

In diesem Abschnitt soll der Hamilton-Operator vorgestellt werden, der für die weitere Arbeit von Bedeutung ist. Dabei ist es nützlich, zwei der verwendeten Konzepte

zunächst näher zu betrachten: die ortsabhängige effektive Masse, die zur Modellierung eines heterogenen Materialsystems verwendet wird, und das Stoner-Modell zur Beschreibung magnetischer Materialien.

### 2.1.1 Ortsabhängige effektive Masse

Ein bewährtes Konzept der Festkörperphysik ist die Beschreibung der elektronischen Eigenschaften eines Kristalls in der Näherung eines freien Elektronengases. Effekte der Bandstruktur werden dabei durch die Einführung einer effektiven Masse  $m^*$ , die sich stark von der Elektronenmasse  $m_e$  unterscheiden kann, berücksichtigt. Diese Näherung hat sich besonders bei der Beschreibung vieler Halbleiter und einiger Metalle, insbesondere einwertiger Alkalimetalle, bewährt [43].

Um Eigenschaften eines System, das aus verschiedenen Materialien besteht, beschreiben zu können, bietet sich die Einführung einer *ortsabhängigen* effektiven Masse  $m^*(\vec{x})$  an. Dieses Konzept wird vielfach in der Halbleiterphysik benutzt, so zur Beschreibung von Halbleiterheterostrukturen. Auch einfache Modelle zum TMR-Effekt basieren darauf [30]. Es soll daher Ausgangspunkt unserer phänomenologischen Beschreibung sein.

Es ist zu beachten, dass durch die Einführung einer ortsabhängigen Masse die übliche Form des Operators für die kinetische Energie nicht mehr verwendet werden kann:

$$H_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2m(\vec{x})}\vec{\nabla}^2$$

ist nicht hermitesch. Leider ist es nicht möglich, einen Operator für die kinetische Energie eindeutig zu bestimmen.

Um diese mangelnde Eindeutigkeit zu illustrieren, betrachten wir die Quantisierung eines klassischen Punktteilchens mit ortsabhängiger Masse im elektromagnetischen Feld. Die Lagrangefunktion dieses Teilchens lautet

$$L = \frac{m(\vec{x})}{2}\dot{\vec{x}}^2 + q\dot{\vec{x}} \cdot \vec{A}(\vec{x}, t) - q\phi(\vec{x}, t),$$

wobei  $q$  die Ladung des Teilchens ist und  $\vec{A}$  und  $\phi$  das elektromagnetische Feld beschreiben. Dabei wird im Anteil der kinetischen Energie der Lagrangefunktion die ortsabhängige Masse eingesetzt. Der kanonische Impuls ist dann gegeben durch

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m(\vec{x})\dot{x}_i + q A_i(\vec{x}, t),$$

und mittels Legendre-Transformation erhält man die Hamiltonfunktion des Teilchens:

$$H = \vec{p} \cdot \dot{\vec{x}} - L = \frac{1}{2m(\vec{x})} (\vec{p} - q \vec{A}(\vec{x}, t))^2 + q \phi(\vec{x}, t).$$

Der Übergang zu einer quantenmechanischen Beschreibung erfolgt in der üblichen Art und Weise, indem die kanonischen Variablen  $\vec{x}$  und  $\vec{p}$  durch Operatoren ersetzt werden. Um einen hermiteschen Operator zu erhalten, muss dabei eine *geeignet symmetrisierte* Version der Hamilton-Funktion benutzt werden [44]. Damit ist aber — im feldfreien Fall — jeder Hamilton-Operator der Form

$$H = \frac{-\hbar^2}{4} (m(\vec{x})^\alpha \vec{\nabla} m(\vec{x})^\beta \vec{\nabla} m(\vec{x})^\gamma + m(\vec{x})^\gamma \vec{\nabla} m(\vec{x})^\beta \vec{\nabla} m(\vec{x})^\alpha) \quad (2.1)$$

mit  $\alpha + \beta + \gamma = -1$  zulässig. Unterschiedliche Werte für die Parameter  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  führen aber im Allgemeinen zu nicht-äquivalenten Beschreibungen des Systems [45]. Beispielsweise ergeben sich je nach Wahl des Hamilton-Operators verschiedene Werte für die Transmissionskoeffizienten in Halbleiterheterostrukturen [46].

Für eine exakte Herleitung des Hamilton-Operators mit ortsabhängiger effektiver Masse muss das *Wannier-Slater-Theorem* [47, 48] auf Materialien mit variabler chemischer Zusammensetzung verallgemeinert werden. Von Roos hat gezeigt, dass dabei ebenfalls die oben erläuterte mangelnde Eindeutigkeit auftritt [45].

In der Literatur finden sich ausführliche Diskussionen sowohl über die Gültigkeit einer Theorie mit ortsabhängiger effektiver Masse als auch über die Wahl der Parameter  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$ . Es sollen hier nur einige Argumente aufgeführt werden, die unsere Wahl motivieren. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden wir dann mit diesem Hamilton-Operator arbeiten.

Generell gilt: Je glatter  $m(\vec{x})$  ist, desto weniger unterscheiden sich die Ergebnisse, die mittels (2.1) und unterschiedlichen  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  berechnet werden. Morrow *et al.* konnten zeigen, dass für abrupte Änderungen der effektiven Masse an Grenzflächen nur Operatoren mit  $\alpha = \gamma$  zulässig sind [49]. Eine andere Wahl der Parameter führt zu einer verschwindenden Wahrscheinlichkeit, an der Grenzfläche ein Elektron zu finden. Ein Vergleich experimenteller Daten mit theoretischen Vorhersagen zeigt, dass  $\beta = 1$  das Experiment am besten beschreibt [50].

Daher soll in dieser Arbeit die zuerst von BenDaniel und Duke [51] verwendete Form des kinetischen Anteils im Hamilton-Operator verwendet werden:

$$H_{\text{kin}} = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m^*(\vec{x})} \vec{\nabla}. \quad (2.2)$$

Mittels *minimaler Substitution* kann auch in der üblichen Weise ein Magnetfeld eingebunden werden:

$$H_{\text{kin}} = \frac{1}{2} (-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{x})) \frac{1}{m^*(\vec{x})} (-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A}(\vec{x})) \quad (2.3)$$

für ein Teilchen der Ladung  $q$ .

### 2.1.2 Stoner-Modell als Beschreibung eines Ferromagneten

Ferromagnetische Materialien weisen auch ohne äußeres Magnetfeld eine spontane Magnetisierung auf. Typische Vertreter sind die Übergangsmetalle Fe, Co und Ni. Diese haben pro Gitteratom 8, 9 oder 10 Elektronen in den obersten Bändern, die eine Überlagerung von 3d- und 4s-Bändern sind. Ihre elektronische Struktur ist daher sehr kompliziert. Es lassen sich aber einige allgemeine Aussagen machen, wie am Beispiel der Zustandsdichte von Fe (Abbildung 2.1) deutlich wird.

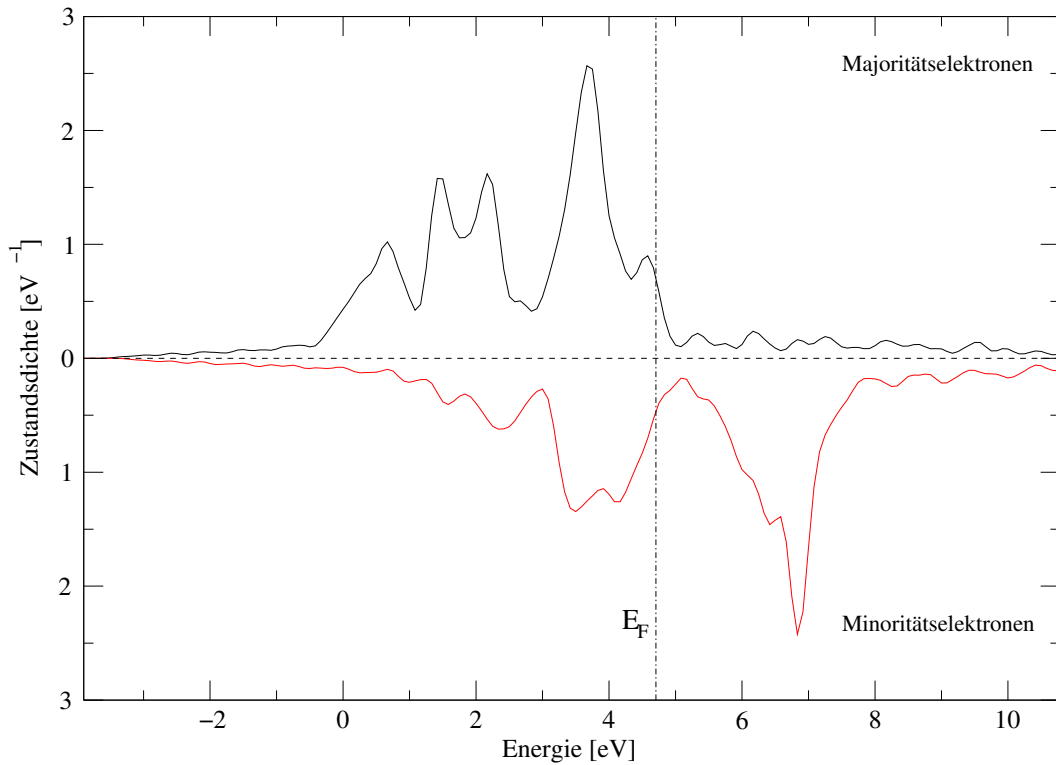
Zum einen gibt es im Grundzustand des Metalls mehr Elektronen einer Spinrichtung als der entgegengesetzten. Man unterscheidet daher *Majoritätselektronen* und *Minoritätselektronen*. Dieses Ungleichgewicht von Elektronen verschiedener Spinrichtungen erzeugt die makroskopische Magnetisierung des Metalls.

Zum anderen unterscheidet sich auch die *Zustandsdichte* an der Fermi-Kante für Majoritäts- und Minoritätsladungsträger. Die Zustandsdichte beeinflusst direkt die Transporteigenschaften des Leiters. So ergeben sich dadurch unterschiedliche Leitfähigkeiten für Majoritäts- und Minoritätselektronen. Es wird deshalb auch für die Untersuchung von Tunnelphänomenen wichtig sein, eine spinabhängige Zustandsdichte an der Fermi-Kante einzuführen.

Wir können diese ferromagnetischen Eigenschaften im freien Elektronengas-Modell berücksichtigen, indem wir eine spinabhängige Verschiebung des Bandursprungs zulassen:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \begin{cases} +\frac{\Delta}{2} & \text{für Minoritätselektronen,} \\ -\frac{\Delta}{2} & \text{für Majoritätselektronen.} \end{cases}$$

Diese Idee geht auf Stoner zurück [31]. Seine Theorie des Ferromagnetismus geht von einer starren Verschiebung der Elektronenbänder für die beiden Spinrichtungen aufgrund der Austauschwechselwirkung aus. Ursache des Ferromagnetismus sind dabei die



**Abb. 2.1:** Zustandsdichte von bcc-Fe. Dichtefunktionalrechnung mit Hilfe von generalisierten Gradienten-Korrekturen (GGA) und Gitterkonstante  $a = 2.864 \text{ \AA}$  [52]

elektrostatische Wechselwirkung zwischen den Elektronen und das Pauli-Prinzip [53]. Nimmt man eine bestimmte Form der Energiebänder an, kann die Aufspaltung selbstkonsistent berechnet werden [54]. In unserem Fall ist die *Austausch-Aufspaltung*  $\Delta$  dagegen ein phänomenologischer Parameter, der an experimentelle Werte angepasst werden muss (siehe auch Kap. 3.1).

Allgemein können wir daher den Energieterm der Austausch-Aufspaltung wie folgt schreiben:

$$H_{\text{Stoner}} = \vec{M} \cdot \vec{\sigma} \frac{\Delta}{2}. \quad (2.4)$$

Dabei ist  $\vec{M}$  ein Einheitsvektor, der die Richtung der Magnetisierung angibt,  $\vec{\sigma}$  ist der Vektor der Pauli-Matrizen. Majoritätsträger sind damit Elektronen mit Spin *antiparallel* zur Richtung der Magnetisierung. Diese Konvention ist sinnvoll, da das magnetische Moment eines Elektrons antiparallel zu dessen Spin ist.

### 2.1.3 Endgültige Form des Hamiltonians

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit soll der Transport von Elektronen (Ladung  $-e$ ,  $e > 0$ ) durch Tunnелеlemente bestehend aus verschiedenen magnetischen und nicht-magnetischen Materialien betrachtet werden. Wir benutzen dazu eine Beschreibung mit ortsabhängiger effektiver Masse  $m^*(\vec{x})$  und verwenden das Stoner-Modell zur Beschreibung des Magnetismus. Zusätzlich wollen wir auch den Einfluss eines Magnetfeldes  $\vec{B}$  und möglicher externer Potentiale  $U_{\text{ext}}(\vec{x})$  untersuchen. Den Effekt von Unordnung wollen wir durch ein Störstellenpotential  $U_{\text{St}}(\vec{x})$  berücksichtigen, das im nächsten Abschnitt noch genauer untersucht wird. Der Hamilton-Operator unseres Systems ist daher gegeben durch:

$$H = \frac{1}{2}(-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A}(\vec{x}))\frac{1}{m^*(\vec{x})}(-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A}(\vec{x})) + \frac{g^*}{2}\mu_{\text{B}}\vec{B}(\vec{x}) \cdot \vec{\sigma} + \vec{M} \cdot \vec{\sigma} \frac{\Delta}{2} + U_{\text{ext}}(\vec{x}) + U_{\text{St}}(\vec{x}), \quad (2.5)$$

wobei  $g^*$  das effektive gyromagnetische Moment der Elektronen und  $\mu_{\text{B}}$  das Bohrsche Magneton ist.

## 2.2 Unordnung im System

In dieser Arbeit sind wir besonders an den Auswirkungen von Unordnung auf die Transporteigenschaften interessiert. Der nächste Abschnitt stellt daher kurz ein wohl bekanntes Modell zur Beschreibung von Unordnung vor. Dieses Modell wird dann erweitert, um auch Spin-Flip-Streuung beschreiben zu können

### 2.2.1 Anderson-Modell

Ein realer Festkörper kann nie ein perfekter Kristall sein. Fremdatome oder Gitterfehler erzeugen ein elektrostatisches Potential, das die Periodizität des idealen Gitters stört. Die Wechselwirkung eines Elektrons mit einer derartigen Störstelle wird im Rahmen der Effektiven-Masse-Näherung durch ein Potential  $U_{\text{St}}(\vec{x})$  beschrieben. Physikalische Größen können dabei entscheidend von der jeweiligen Konfiguration des Störstellenpotentials abhängen. Es ist daher sinnvoll, über die Freiheitsgrade des Störstellenpotentials gemittelte Größen zu betrachten.

Ein einfaches statistisches Modell für Unordnung ist das *White-Noise-Modell* [55, 56]. Mittelwert und Korrelation des Störstellenpotentials sind dann gegeben durch

$$\langle U_{\text{St}}(\vec{x}) \rangle_{\text{St}} = 0 \quad (2.6)$$

$$\langle U_{\text{St}}(\vec{x}) U_{\text{St}}(\vec{x}') \rangle_{\text{St}} = U_{\text{kor}}^2 \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (2.7)$$

Es beschreibt punktförmige, unkorrelierte Störstellen. Die Streuung an den Störstellen ist damit *isotrop*. Mittels *Fermis goldener Regel* kann dann die mittlere elastische Streuzeit  $\tau$  berechnet werden. Dieses Resultat stimmt mit dem Ergebnis der diagrammatischen Störungstheorie erster Ordnung überein [56]:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} U_{\text{kor}}^2 D_s^{(d)}(E_F) . \quad (2.8)$$

Dabei ist  $D_s^{(d)}(E_F)$  die Zustandsdichte des freien Elektronengases für eine Spinrichtung in  $d$  Dimensionen an der Fermi-Kante. Die mittlere freie Weglänge  $\lambda$  für Elektronen ist dann gegeben durch

$$\lambda = v_F \tau , \quad (2.9)$$

wobei  $v_F$  die Fermi-Geschwindigkeit ist.

In [38] wurde ein Störstellenmodell für ein zweidimensionales Elektronengas vorgestellt, das die Eigenschaften (2.6) und (2.7) erfüllt:

$$U_{\text{St}}(\vec{x}) = U_{\text{elast}}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N \bar{U}_i \delta(\vec{x} - \vec{R}_i) . \quad (2.10)$$

Dabei werden die Orte  $\vec{R}_i$  der  $N$  deltaförmigen Störstellen zufällig gewählt. Außerdem ist  $\bar{U}_i = U_i \epsilon^2$ , wobei  $\epsilon$  einer „effektiven Breite“ der Störstellen entspricht<sup>1</sup>. Die Störstellenenergie  $U_i$  wird aus der uniformen Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P_U(U_i) = \begin{cases} \frac{1}{2U_0} & \text{für } -U_0 \leq U_i \leq U_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.11)$$

---

<sup>1</sup>Dies wird sich als nützlich erweisen, wenn der Übergang von einem Kontinuumsmodell auf eine diskrete Beschreibung erfolgt. Wir werden dann  $\epsilon$  mit der Gitterkonstante  $a$  der Diskretisierung identifizieren können.

mit der Breite  $2U_0$  gewählt. Diese Verteilung wurde zuerst von *Anderson* verwendet [57]. Mit diesem Modell erhält man für die Korrelationsfunktion des Störstellenpotentials

$$\langle U_{\text{St}}(\vec{x}) U_{\text{St}}(\vec{x}') \rangle_{\text{St}} = n \frac{\bar{U}_0^2}{3} \delta(\vec{x} - \vec{x}') ,$$

wobei  $n$  die Dichte der Störstellen ist.

In den bisherigen Betrachtungen wurde die Möglichkeit vernachlässigt, dass ein Elektron während des Streuprozesses eine Änderung seines Spinzustandes erfährt. Diese Näherung ist sinnvoll, wenn die mittlere *Spin-Flip-Länge*  $l_{\text{sf}}$  groß im Vergleich zur Ausdehnung des zu modellierenden Systems ist. In mesoskopischen Systemen ist dies für Halbleiter in der Regel gut erfüllt; typische Spin-Flip-Längen in GaAs sind  $l_{\text{sf}} \sim 1\text{--}100 \mu\text{m}$  [18]. In magnetischen Materialien dagegen findet eine deutlich stärkere Spin-Flip-Streuung statt; typische Längen sind hier  $l_{\text{sf}} \sim 60 \text{ nm}$  für Co,  $\sim 4 \text{ nm}$  für Permalloy ( $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$ ) [58] und  $\sim 15\text{--}20 \text{ nm}$  für Fe [59]. Wir wollen daher im nächsten Abschnitt das vorgestellte Störstellenpotential erweitern, um auch Spin-Flip-Streuung beschreiben zu können.

## 2.2.2 Erweiterung auf Spin-Flip-Streuung

Im Folgenden wählen wir als Quantisierungsachse für den Elektronenspin die  $z$ -Achse.  $\uparrow$  bezeichnet den Zustand mit  $S_z$ -Eigenwert  $+\frac{\hbar}{2}$  (*Spin up*),  $\downarrow$  mit Eigenwert  $-\frac{\hbar}{2}$  (*Spin down*).

Um Spin-Flip-Prozesse beschreiben zu können, muss das Störstellen-Potential nicht-diagonale Matrixelemente besitzen:

$$\langle \uparrow | U_{\text{St}}(\vec{x}) | \downarrow \rangle \neq 0 .$$

Eine einfache Möglichkeit besteht darin, zu den deltaförmigen Störstellen des vorigen Abschnittes einen kleinen, rein nicht-diagonalen Anteil zu addieren:

$$U_{\text{St}}(\vec{x}) = U_{\text{elast}}(\vec{x}) + \sum_i \varepsilon_i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \delta(\vec{x} - \vec{x}') .$$

Durch diese Entscheidung wird allerdings die  $z$ -Achse im Raum speziell ausgezeichnet. Durch die Wahl einer anderen Quantisierungsachse (in diesem Fall der  $x$ -Achse)

können die nicht-diagonalen Matrixelemente zum Verschwinden gebracht werden. Die Auszeichnung einer Raumrichtung kann aber verhindert werden, indem über alle Raumrichtungen gemittelt wird.

Ausgehend von diesen Überlegungen entwickeln wir im Folgenden ein Modell, das die gewünschten Eigenschaften besitzt<sup>2</sup>.

Wir betrachten ein Störstellenpotential in  $d$  räumlichen Dimensionen<sup>3</sup>, bestehend aus dem *Spin erhaltenden* Anteil  $U_{\text{elast}}(\vec{x})$  aus dem vorherigen Abschnitt und einem *Spin-Flip*-Anteil  $U_{\text{sf}}(\vec{x})$ :

$$U_{\text{St}}(\vec{x}) = U_{\text{elast}}(\vec{x}) + U_{\text{sf}}(\vec{x})$$

mit

$$U_{\text{elast}}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{N_{\text{elast}}} \bar{U}_i \delta(\vec{x} - \vec{R}_i)$$

und

$$U_{\text{sf}}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{N_{\text{sf}}} \bar{\varepsilon}_i \vec{m}_i \cdot \vec{\sigma} \delta(\vec{x} - \vec{R}_i), \quad \vec{m}_i = \vec{m}(\theta_i, \phi_i) = \begin{pmatrix} \sin \theta_i \cos \phi_i \\ \sin \theta_i \sin \phi_i \\ \cos \theta_i \end{pmatrix}.$$

Die Positionen der Störstellen  $\vec{R}_i$  in  $U_{\text{elast}}$  und  $U_{\text{sf}}$  werden unabhängig voneinander zufällig in einem  $d$ -dimensionalen Volumen  $V^{(d)}$  gewählt. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann  $N_{\text{elast}} = N_{\text{sf}} = N$  angenommen werden.  $\vec{m}_i$  ist ein zufällig gewählter Einheitsvektor,  $\bar{\varepsilon}_i = \varepsilon_i \epsilon^d$  und  $\varepsilon_i$  wird aus einer uniformen Verteilung mit der Breite  $2\varepsilon_0$  gewählt. Das Spin-Flip-Potential besteht damit aus deltaförmigen Störstellen mit einer *kleinen, zufällig gerichteten Magnetisierung*. Durch die zufällige Auswahl der Magnetisierungsrichtungen bleibt das Modell isotrop, d. h. keine Raumrichtung wird ausgezeichnet.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte eine bestimmte Konfiguration von  $U_{\text{sf}}$  anzutreffen, lautet dann

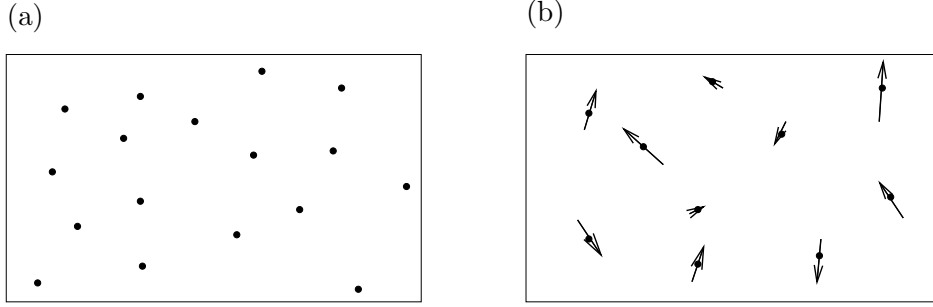
$$P_{\text{sf}}(\vec{R}_1, \varepsilon_1, \theta_1, \phi_1, \dots, \vec{R}_N, \varepsilon_N, \theta_N, \phi_N) = P_R(\vec{R}_1) P_\varepsilon(\varepsilon_1) P_{\vec{m}}(\theta_1, \phi_1) \cdots P_R(\vec{R}_N) P_\varepsilon(\varepsilon_N) P_{\vec{m}}(\theta_N, \phi_N)$$

mit

$$P_R(\vec{R}_i) = \frac{1}{V^{(d)}},$$

<sup>2</sup>In diesem Abschnitt werden nur Ergebnisse vorgestellt, eine detaillierte Rechnung findet sich in Anhang A.

<sup>3</sup>Da später sowohl Rechnungen in zwei- als auch dreidimensionalen Systemen durchgeführt werden, erfolgen die Überlegungen in diesem Abschnitt für beliebige räumliche Dimension.



**Abb. 2.2:** Schematische Darstellung des Störstellenpotentials: (a) deltaförmige Störstellen unterschiedlicher Höhe (b) Spin-Flip-Störstellen mit zufällig gewählter Magnetisierung

$$P_\varepsilon(\varepsilon_i) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon_0} & \text{für } -\varepsilon_0 \leq \varepsilon_i \leq \varepsilon_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{und}$$

$$P_{\vec{m}}(\theta_i, \phi_i) = \frac{\sin \theta_i}{4\pi} .$$

Damit ergeben sich für die statistischen Eigenschaften des *gesamten* Störstellenpotentials  $U_{\text{St}}(\vec{x})$ :

$$\langle \langle \uparrow | U_{\text{St}}(\vec{x}) | \uparrow \rangle \rangle_{\text{St}} = \langle \langle \uparrow | U_{\text{St}}(\vec{x}) | \downarrow \rangle \rangle_{\text{St}} = \langle \langle \downarrow | U_{\text{St}}(\vec{x}) | \downarrow \rangle \rangle_{\text{St}} = \langle \langle \downarrow | U_{\text{St}}(\vec{x}) | \uparrow \rangle \rangle_{\text{St}} = 0, \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \langle \langle \uparrow | U_{\text{St}}(\vec{x}) | \uparrow \rangle \langle \uparrow | U_{\text{St}}(\vec{x}') | \uparrow \rangle \rangle_{\text{St}} = \\ \langle \langle \downarrow | U_{\text{St}}(\vec{x}) | \downarrow \rangle \langle \downarrow | U_{\text{St}}(\vec{x}') | \downarrow \rangle \rangle_{\text{St}} = n \frac{\bar{U}_0^2 + \frac{1}{3}\bar{\varepsilon}_0^2}{3} \delta(\vec{x} - \vec{x}') , \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \langle \langle \uparrow | U_{\text{St}}(\vec{x}) | \downarrow \rangle \langle \downarrow | U_{\text{St}}(\vec{x}') | \uparrow \rangle \rangle_{\text{St}} = \\ \langle \langle \downarrow | U_{\text{St}}(\vec{x}) | \uparrow \rangle \langle \uparrow | U_{\text{St}}(\vec{x}') | \downarrow \rangle \rangle_{\text{St}} = n \frac{2}{3} \frac{\bar{\varepsilon}_0^2}{3} \delta(\vec{x} - \vec{x}') . \end{aligned} \quad (2.14)$$

Ausgehend von diesem statistischen Modell können nun Streuzeiten und -längen berechnet werden. Dazu betrachten wir ein freies Elektronengas mit Masse  $m^*$  und Austauschspaltung  $\Delta$  ( $\Delta = 0$  entspricht dann dem nichtmagnetischen Fall).  $\uparrow$  sei der Majoritätsspin und  $\downarrow$  der Minoritätsspin. In diesem Fall ist die Energie für ein Elektron mit Spin  $s$  gegeben durch<sup>4</sup>  $E_s(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_0 - s \frac{\Delta}{2}$ . Mit Fermis goldener Regel können nun die Streuraten ohne Spin-Flip

$$\frac{1}{\tau_{s \rightarrow s}} = \frac{2\pi}{\hbar} n \frac{\bar{U}_0^2 + \frac{1}{3}\bar{\varepsilon}_0^2}{3} D_s^{(d)} \left( E_s(k) - E_0 + s \frac{\Delta}{2} \right) \quad (2.15)$$

<sup>4</sup>Dabei soll für  $s$  die Konvention  $\uparrow \equiv +1$  und  $\downarrow \equiv -1$  gelten

und mit Spin-Flip

$$\frac{1}{\tau_{s \rightarrow -s}} = \frac{2\pi}{\hbar} n \frac{2}{3} \frac{\bar{\varepsilon}_0^2}{3} D_s^{(d)} \left( E_s(k) - E_0 - s \frac{\Delta}{2} \right) \quad (2.16)$$

berechnet werden.  $D_s^{(d)}$  ist dabei wieder die Zustandsdichte für eine Spinrichtung und  $n$  die Dichte der Störstellen.

Durch geeignete Wahl von  $\bar{U}_0$  und  $\bar{\varepsilon}_0$  kann das Verhältnis von Spin-Flip- zu Spin erhaltender Streuung in einem weiten Bereich beliebig festgelegt werden. Allerdings führt auch bei  $\bar{U}_0 = 0$  — d. h.  $U_{\text{St}}(\vec{x}) = U_{\text{sf}}(\vec{x})$  — ein Drittel der Streuprozesse nicht zu einem Spin-Flip. Dies stellt aber eine unerhebliche Einschränkung für die Praxis dar, da in realen Systemen ein Spin-Flip in der Regel erst nach einigen Streuprozessen eintritt<sup>5</sup>.

Außerdem ist anzumerken, dass auch bei einem Streuprozess mit Spin-Flip ein Impulsübertrag stattfindet. Es handelt sich ebenfalls um deltaförmige Störstellen und damit um isotrope Streuung; Die Streuwahrscheinlichkeit hängt *nicht* vom Winkel zwischen einfallendem und ausgehendem Wellenvektor ab. Das Modell ist daher weniger geeignet, um Spin-Flip-Prozesse durch Magnonenstreuung zu beschreiben, bei denen nur ein kleiner Impulsübertrag stattfindet (z. B. [54]).

Wie in [60] können nun aus dem Störstellenmodell charakteristische Längen berechnet werden. Die gesamte Streurrate für ein Elektron mit Spin  $s$  ist

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{1}{\tau_{s \rightarrow s}} + \frac{1}{\tau_{s \rightarrow -s}} .$$

Daraus berechnen wir die mittlere freie Weglänge  $\lambda_s$  eines Elektrons mit Spin  $s$

$$\lambda_s = v_{\text{F},s} \tau_s \quad (2.17)$$

wobei  $v_{\text{F},s}$  die Fermi-Geschwindigkeit für Spin  $s$  ist.

In der Regel erfolgen mehrere Streuprozesse, bevor sich der Spin eines Elektrons ändert. Die Bewegung des Elektrons zwischen zwei Spin-Flip-Prozessen erfolgt dann diffusiv, und die *Spin-Flip-Länge* eines Elektrons mit Spin  $s$  ist dann gegeben durch

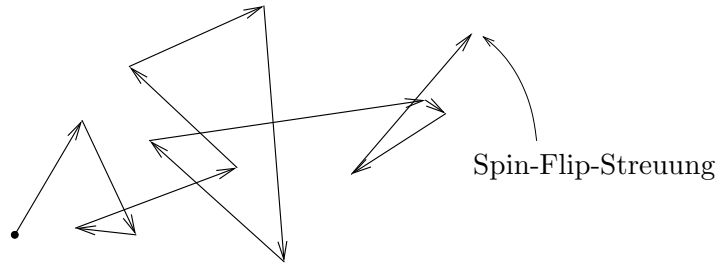
$$l_s = \sqrt{D_s \tau_{s \rightarrow -s}} = \sqrt{\frac{1}{d} (\lambda_s v_{\text{F},s}) \tau_{s \rightarrow -s}} \quad (2.18)$$

Dabei ist  $D_s$  die Diffusionskonstante für Spin  $s$ . Es erweist sich als nützlich, eine über beide Spinrichtungen gemittelte Spin-Flip-Länge

$$\frac{1}{l_{\text{sf}}^2} = \frac{1}{l_{\uparrow}^2} + \frac{1}{l_{\downarrow}^2} \quad (2.19)$$

---

<sup>5</sup>Beispielsweise ist das Verhältnis von Spin-Flip-Prozessen zu Spin erhaltenden Streuprozessen für Fe- oder Co-Störstellen in Cu  $\sim 10^{-2}$  [58].



**Abb. 2.3:** Diffusive Bewegung eines Elektrons zwischen zwei Spin-Flip-Vorgängen.

einzuführen<sup>6</sup>.

Das betrachtete Störstellenmodell ist also in der Lage, Spin-Flip-Prozesse zu beschreiben. Das Verhältnis von Spin-Flip- zu Spin erhaltenden Streuprozessen kann nahezu beliebig variiert werden. Durch geeignete Wahl der Parameter  $\bar{U}_0$  und  $\bar{\varepsilon}_0$  des Modells können wir phänomenologisch aus Experimenten bekannte freie Weglängen und Spin-Flip-Längen in den Hamilton-Operator aufnehmen.

## 2.3 Mesoskopische Transporttheorie

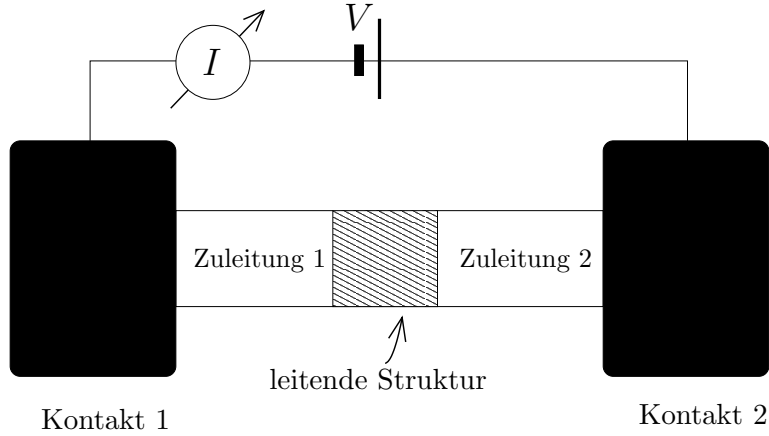
Im nächsten Abschnitt wird ein Formalismus vorgestellt, der den quantenmechanischen Leitwert eines Systems mit den Transmissionsamplituden der einzelnen Moden verknüpft. Danach wird gezeigt, wie diese Transmissionsamplituden aus der Green-Funktion des Systems gewonnen werden können.

### 2.3.1 Landauer-Formel

Werden quantenmechanische Effekte beim Transport durch ein System wichtig, so kann der Leitwert im Allgemeinen nicht mehr durch ein Ohm'sches Gesetz beschrieben werden. Ein wohl bekannter Formalismus zur Berechnung des quantenmechanischen Leitwerts in diesem Fall geht auf *Landauer* [39, 61] und *Büttiker* [40] zurück. Eine didaktische Einführung findet sich beispielsweise in [56] oder [62].

---

<sup>6</sup> $l_{\text{sf}}$  ist eine entscheidende Längenskala für *Spininjektion* [19, 21, 60]. Sie gibt die Distanz an, über die sich eine *Spin-Akkumulation* bilden kann.



**Abb. 2.4:** Schematischer Aufbau zur Zwei-Punkt-Messung eines Leitwerts.

Eine Struktur, deren Leitwert  $G$  berechnet werden soll, wird durch zwei Zuleitungen mit Strom versorgt (siehe Abbildung 2.4). Unter einem *Kanal* in einer Zuleitung verstehen wir dann eine quantenmechanische Mode an der Fermi-Kante, die in der Zuleitung frei propagieren kann. Die Wahrscheinlichkeit für die Transmission aus einem Kanal  $i$  mit Spin  $s$  in der linken Zuleitung in einen Kanal  $i'$  mit Spin  $s'$  in der rechten Zuleitung wird mit  $T_{i',i}^{s',s}$  bezeichnet<sup>7</sup>, die zugehörige *Transmissionsamplitude* ist  $t_{i',i}^{s',s}$ , mit  $T_{i',i}^{s',s} = |t_{i',i}^{s',s}|^2$ . Im *Linear-Response-Regime*, d. h. für kleine angelegte Spannungen  $V$ , ist der Leitwert dann gegeben durch

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_{i,i'} \sum_{s,s'} T_{i',i}^{s',s} = \frac{e^2}{h} T_{\text{tot}} . \quad (2.20)$$

Der Leitwert ist also direkt proportional zur gesamten Transmission  $T_{\text{tot}}$ . Bezeichnet man die Wahrscheinlichkeit für die Reflexion aus einem Kanal  $i$  mit Spin  $s$  zurück in die Zuleitung in Kanal  $i'$  mit Spin  $s'$  mit  $R_{i',i}^{s',s}$  und die dazugehörige Wahrscheinlichkeitsamplitude mit  $r_{i',i}^{s',s}$ , so muss aufgrund der Stromerhaltung

$$\sum_{i'} \sum_{s'} T_{i',i}^{s',s} + \sum_{i'} \sum_{s'} R_{i',i}^{s',s} = 1 \quad (2.21)$$

gelten.

Gleichung (2.20) entspricht einer Zwei-Punkt-Messung des Leitwerts. Sie enthält daher auch die Kontaktwiderstände der Zuleitungen. Um eine Vier-Punkt-Messung zu

<sup>7</sup>Bei der Benutzung der Notation bedarf die Reihenfolge der Indizes besonderer Vorsicht: Die Transmission *aus* Kanal  $i$  *in* den Kanal  $j$  wird mit  $T_{j,i} = T_{j \leftarrow i}$  bezeichnet. Diese Konvention wird später auch bei der Notation für die Green-Funktionen verwendet.

beschreiben, bei der nur der Spannungsabfall über der zu vermessenden Struktur aufgenommen wird, muss eine erweiterte Version der Landauer-Formel verwendet werden (siehe Gleichung 4.12 in [40]). Im Fall kleiner Transmissionswahrscheinlichkeiten  $T_{i',i}^{s',s} \ll 1$  geht sie jedoch in Gleichung (2.20) über. Da wir im Verlauf dieser Arbeit hauptsächlich am Transport durch Tunnelsysteme interessiert sind und die dabei auftretenden Tunnelwahrscheinlichkeiten sehr klein sind, werden wir im Folgenden zur Berechnung des Leitwerts bzw. des Widerstands eines Systems immer auf Gleichung (2.20) zurückgreifen.

### 2.3.2 Fisher-Lee-Relation

In manchen Fällen ist es günstiger, anstatt der Transmissionswahrscheinlichkeiten die *Green'sche Funktion*, auch *Green-Funktion*, des Systems zu berechnen.

Die Green'sche Funktion  $G(\vec{x}', \vec{x}; E)$  eines durch den Hamilton-Operator  $H$  beschriebenen Systems ist gegeben durch (siehe z. B. [56])

$$G^\pm(\vec{x}, \vec{x}'; E) = \sum_n \frac{\psi_n(\vec{x})\psi_n^*(\vec{x}')}{E - E_n \pm i\eta}. \quad (2.22)$$

Dabei ist der Limes  $\eta \rightarrow 0$  zu nehmen;  $\psi_n(\vec{x})$  ist Lösung der Schrödinger-Gleichung mit Eigenwert  $E_n$ ,  $H\psi_n = E_n\psi_n$ . Die Green'sche Funktion erfüllt die Operatorgleichung

$$(E - H \pm i\eta)G^\pm = \mathbb{1}. \quad (2.23)$$

Sie gibt die Antwort des Systems an einem Punkt im Raum aufgrund einer Anregung an einem anderen Punkt an. Dabei erfüllen  $G^+$  und  $G^-$  unterschiedliche Randbedingungen: Die *retardierte* Green-Funktion  $G^+$  entspricht *auslaufenden*, die *avancierte* Green-Funktion  $G^-$  *einlaufenden* Wellen. Wir werden uns im Folgenden auf die retardierte Green-Funktion  $G^+$  beschränken und bezeichnen sie einfach mit  $G$ .

Man erhält dann die Transmissions- und Reflexionsamplitude, indem man die Green-Funktion  $G$  auf geeignete asymptotische Zustände in den Zuleitungen projiziert [41]. Bezeichnet man die transversalen Moden in der linken Zuleitung mit  $\psi_n^s$  und die der rechten Zuleitung mit  $\phi_n^s$ , dann ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude für Transmission und Reflexion gegeben durch:

$$t_{i',i}^{s',s} = -i\hbar\sqrt{v_{i'}v_i} \langle \phi_{i'}^{s'} | G_{\text{RL}} | \psi_i^s \rangle \quad (2.24)$$

$$r_{i',i}^{s',s} = \delta_{i'i} \delta_{s's} - i\hbar\sqrt{v_{i'}v_i} \langle \psi_{i'}^{s'} | G_{\text{LL}} | \psi_i^s \rangle. \quad (2.25)$$

$G_{\text{RL}}$  ist dabei die Green-Funktion für Propagation aus der linken in die rechte Zuleitung,  $G_{\text{LL}}$  für die Propagation zurück in die linke Zuleitung.  $v_i$  ist die Gruppengeschwindigkeit der  $i$ -ten Mode. Diese Gleichungen werden als *Fisher-Lee-Relation* bezeichnet.

Damit haben wir das Problem der Bestimmung des Leitwerts bzw. des Widerstands eines Systems auf die Berechnung der Green'schen Funktion dieses Systems zurückgeführt. Im nächsten Abschnitt stellen wir einen numerischen Algorithmus zur Bestimmung der Green-Funktion vor.

## 2.4 Numerische Lösung des Transportproblems

Wie in Abschnitt 2.3 gezeigt wurde, genügt es, die Green'sche Funktion eines Quantensystems zu berechnen, um dessen Leitwert bzw. Widerstand zu bestimmen. Die Berechnung der Green-Funktion eines ungeordneten Systems ist aber im Allgemeinen eine sehr schwierige Aufgabe und nur näherungsweise lösbar. Übliche Ansätze zur Lösung dieses Problems sind entweder störungstheoretische Methoden oder numerische Simulation des Systems. Diese Arbeit konzentriert sich auf eine numerische Behandlung des Transportproblems. Wir zeigen daher im nächsten Abschnitt, wie eine Diskretisierung des kontinuierlichen Hamilton-Operators aus Abschnitt 2.1 zu einer *Tight-Binding-Beschreibung* des Transportproblems führt. Die Green'sche Funktion dieses Tight-Binding-Hamiltonians kann dann durch eine *rekursive Green-Funktionsmethode* berechnet werden. Diese Vorgehensweise wurde bereits in [38, 63] erfolgreich zur Berechnung spinabhängiger Transportphänomene verwendet.

### 2.4.1 Tight-Binding-Darstellung des Hamiltonians

Um eine numerische Lösung des Transportproblems zu ermöglichen, stellen wir eine diskretisierte Form der Schrödinger-Gleichung

$$H\psi = E\psi$$

mit dem Hamilton-Operator  $H$  aus Gleichung (2.5) auf. Anstelle des kontinuierlichen Raumes tritt jetzt ein kubisches *Gitter* mit *Gitterkonstante*  $a$ . Die Werte  $\psi(\vec{x})$  der kontinuierlichen Wellenfunktion werden durch die Werte  $\psi(\vec{x}_i)$  auf den diskreten Gitterpunkten  $\vec{x}_i$  genähert. Dadurch entsteht eine *Tight-Binding-Beschreibung* des Systems.

Ausgangspunkt der weiteren Betrachtung ist der Hamilton-Operator aus Gleichung (2.5),

$$H = \frac{1}{2}(-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A}(\vec{x}))\frac{1}{m^*(\vec{x})}(-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A}(\vec{x})) + \frac{g^*}{2}\mu_B\vec{B}(\vec{x}) \cdot \vec{\sigma} + \vec{M} \cdot \vec{\sigma} \frac{\Delta}{2} + U(\vec{x}),$$

der ein Elektron mit Ladung  $-e$  und einer ortsabhängigen Masse  $m^*(\vec{x})$  in einem Magnetfeld  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$  beschreibt. Das Potential  $U(\vec{x})$  enthält nun sowohl das externe Potential als auch das Störstellenpotential und ist somit eine  $2 \times 2$ -Matrix.

Wir diskretisieren die kontinuierliche Schrödinger-Gleichung, indem wir die symmetrischen Näherungsformeln

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x + \frac{a}{2}) - f(x - \frac{a}{2})}{a} + \mathcal{O}(a^2)$$

und

$$f(x) = \frac{1}{2} \left( f\left(x + \frac{a}{2}\right) + f\left(x - \frac{a}{2}\right) \right) + \mathcal{O}(a^2)$$

verwenden. Es erweist sich dabei als nützlich, dimensionslose Einheiten für die Energie einzuführen:  $E = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} \tilde{E}$ ,  $H = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2} \tilde{H}$ , etc. Bezeichnet man den Ortseigenzustand eines Gitterplatzes in drei Dimensionen mit  $|x, y, z\rangle$ , so ergibt sich für den Hamilton-Operator folgende Darstellung<sup>8</sup>:

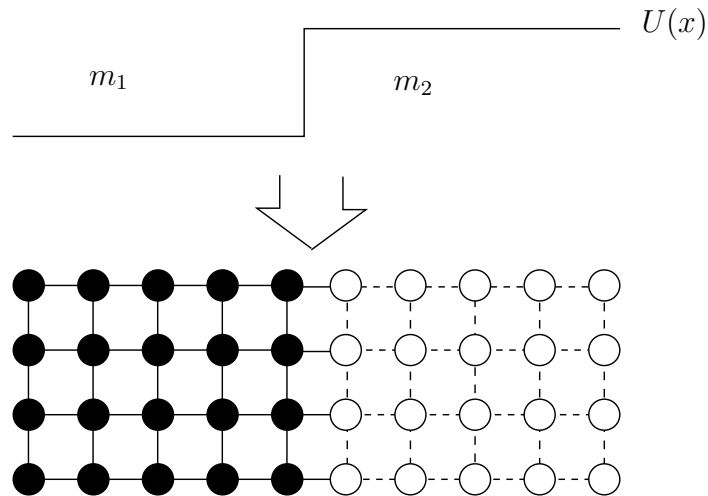
$$\begin{aligned} \tilde{H} = \sum_{x,y,z} \left\{ \left[ \left( \frac{1}{\tilde{m}(x + \frac{a}{2}, y, z)} + \frac{1}{\tilde{m}(x - \frac{a}{2}, y, z)} \right. \right. \right. \\ + \frac{1}{\tilde{m}(x, y + \frac{a}{2}, z)} + \frac{1}{\tilde{m}(x, y - \frac{a}{2}, z)} \\ + \left. \left. \frac{1}{\tilde{m}(x, y, z + \frac{a}{2})} + \frac{1}{\tilde{m}(x, y, z - \frac{a}{2})} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right. \\ + \tilde{U}(x, y, z) + \tilde{\mu} \vec{B}(x, y, z) \cdot \vec{\sigma} + \frac{\tilde{\Delta}}{2} \vec{M}(x, y, z) \cdot \vec{\sigma} \Big] |x, y, z\rangle \langle x, y, z| \\ - \frac{1}{\tilde{m}(x + \frac{a}{2}, y, z)} e^{i2\pi \frac{aA_x(x + \frac{a}{2}, y, z)}{\phi_0}} |x, y, z\rangle \langle x + a, y, z| - h.c. \\ - \frac{1}{\tilde{m}(x, y + \frac{a}{2}, z)} e^{i2\pi \frac{aA_y(x, y + \frac{a}{2}, z)}{\phi_0}} |x, y, z\rangle \langle x, y + a, z| - h.c. \\ \left. - \frac{1}{\tilde{m}(x, y, z + \frac{a}{2})} e^{i2\pi \frac{aA_z(x, y, z + \frac{a}{2})}{\phi_0}} |x, y, z\rangle \langle x, y, z + a| - h.c. \right\} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Dabei ist  $\phi_0 = h/e$  das Flussquant,  $\tilde{\mu} = \frac{2m_e a^2}{\hbar^2} \frac{g^*}{2} \mu_B$ ,  $\tilde{\Delta} = \frac{2m_e a^2}{\hbar^2} \Delta$  und  $\tilde{m} = m^*/m_e$ . In der numerischen Simulation werden wir stets diese dimensionslosen Einheiten verwenden.

<sup>8</sup>In Anhang B findet sich eine ausführliche Herleitung der Tight-Binding-Näherung. Dort sind auch Ausdrücke für ein- und zweidimensionale System angegeben. In den niederdimensionalen Fällen fehlen im Vergleich zu (2.26) lediglich die Terme, die sich auf die dann fehlenden Koordinatenachsen beziehen.

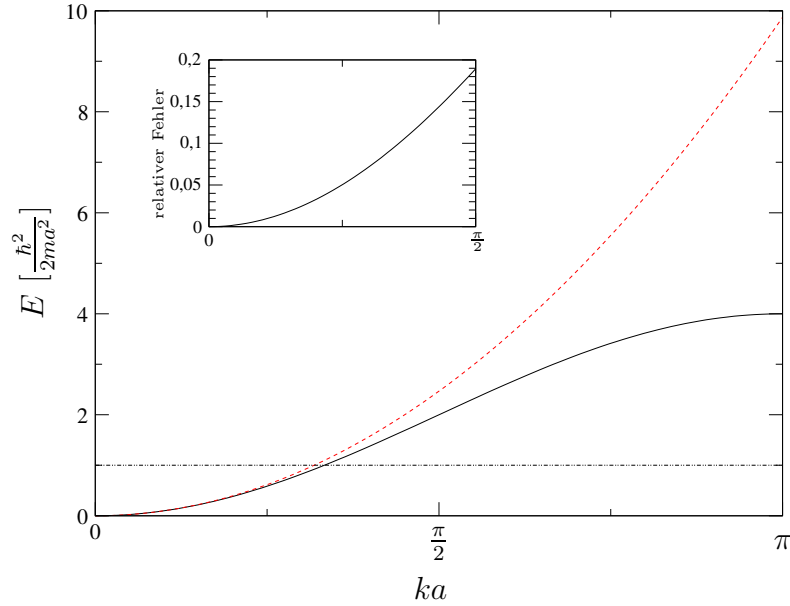
Durch die Diskretisierung des Raumes entsteht also eine Tight-Binding-Beschreibung des Systems. Dabei treten nur *Hopping*-Energien zwischen nächsten Nachbarn auf. Die Hopping-Terme in einem äußeren Magnetfeld  $\vec{B}$  unterscheiden sich von den Hopping-Termen ohne Magnetfeld nur durch eine ortsabhängige Phase  $\exp\left(i2\pi\frac{aA_x(x+\frac{a}{2},y,z)}{\phi_0}\right)$ , usw. Dies ist eine diskretisierte Form der *Peierls-Substitution* [62, 64]; diese wurde von Peierls vorgeschlagen, um den Einfluss eines Magnetfeldes in Tight-Binding-Rechnungen aufzunehmen. In unserem Fall entsteht dieser Phasenfaktor in natürlicher Weise im Verlauf der Diskretisierung der Schrödinger-Gleichung, denn er ist gleichbedeutend damit, das Vektorpotential  $\vec{A}$  durch minimale Substitution  $-i\hbar\vec{\nabla} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla} - q\vec{A}$  in den Hamilton-Operator einzubinden [65].

Der Übergang von einer kontinuierlichen Beschreibung zu einer diskreten Darstellung führt zu einigen begrifflichen Unterschieden bei der Beschreibung eines Elektrons in einem heterogenen Materialsystem: Das Elektron bewegt sich nun nicht mehr durch ein Potential  $U(x)$ , sondern auf Gitterplätzen mit unterschiedlichen *on-site* Energien. An die Stelle verschiedener effektiver Massen treten unterschiedliche *Hopping*-Energien. Der Einfluss eines Magnetfeldes besteht darin, dass das Elektron bei der Bewegung durch das Gitter zusätzliche Phasen aufnimmt. Die Beschreibung entspricht damit for-



**Abb. 2.5:** Übergang von einer kontinuierlichen Beschreibung zu einer Tight-Binding-Darstellung

mal einer Tight-Binding-Beschreibung mit nur einem Orbital pro Gitterplatz (*single band tight binding*). Derartige Modelle werden häufig verwendet, um qualitative Aussagen über Systeme treffen zu können, die zu komplex sind, um mit aufwendigeren Methoden wie der Dichtefunktionaltheorie behandelt zu werden. Auch zur Beschreibung des TMR-Effekts wurden diese Modelle schon verwendet [33–37].



**Abb. 2.6:** Dispersionsrelation der Energie  $E(k)$  für ein freies Elektronengas im Kontinuum (gestrichelte Linie) und in Tight-Binding-Näherung (durchgezogene Linie). Der kleine Graph zeigt den relativen Fehler der Energie in der Tight-Binding-Näherung in Abhängigkeit von  $k \cdot a$ .

Im Gegensatz zu Single-Band-Tight-Binding-Rechnungen sind wir in dieser Arbeit am Kontinuumsliches  $a \rightarrow 0$  interessiert; die Gitterkonstante  $a$  muss daher in unseren Rechnungen hinreichend klein gewählt werden. Da wir die Transmissionskoeffizienten numerisch berechnen, muss sie andererseits genügend groß festgelegt werden, um die Rechenzeit klein zu halten. Es ist daher sinnvoll, die Konvergenz der Diskretisierung (2.26) zu betrachten.

Dazu betrachten wir den diskretisierten Hamilton-Operator mit konstanter Masse  $m$  in einer räumlichen Dimension ohne äußere Felder:

$$H = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \sum_x (2|x\rangle\langle x| - |x\rangle\langle x+1| - |x\rangle\langle x-1|) . \quad (2.27)$$

Damit ergibt sich die Energiedispersion [62]

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (2 - 2 \cos(k \cdot a)) . \quad (2.28)$$

In Abbildung 2.6 ist die Dispersionsrelation für die Energie  $E(k)$  in Abhängigkeit von  $k \cdot a$  sowohl für den Kontinuumsliches als auch für die Tight-Binding-Näherung dargestellt.

Je kleiner  $k \cdot a$ , desto besser ist die Übereinstimmung der beiden Energien. Da  $k$  durch die physikalische Situation im Allgemeinen bereits festgelegt ist, muss also  $a$  genügend klein gewählt werden<sup>9</sup>. Dabei ergibt sich eine gute Übereinstimmung, wenn  $E \ll \frac{\hbar^2}{2ma^2}$  ( $\tilde{E} \ll 1$ ) [62].

Es ist allerdings schwierig, allgemeine Kriterien für die Güte der Tight-Binding-Näherung in Abhängigkeit von der Gitterkonstante anzugeben. So gehen bei Tunnelprozessen kleine Parameteränderungen exponentiell in die Transmission ein, kleine Fehler durch die Diskretisierung können also zu beträchtlichen Fehlern im berechneten Leitwert führen. Es ist daher unerlässlich, in jedem Fall die Güte der Konvergenz durch Vergleich mit analytischen Rechnungen zu prüfen.

## 2.4.2 Rekursiver Algorithmus

Durch die Diskretisierung der Schrödinger-Gleichung im vorigen Abschnitt wird die unendliche Anzahl der Freiheitsgrade der kontinuierlichen Gleichung auf eine endliche Zahl in der Tight-Binding-Näherung reduziert. Die Green'sche Funktion kann daher theoretisch durch Inversion von Gleichung (2.23) berechnet werden:

$$G = (E - H + i\eta)^{-1} .$$

$(E - H + i\eta)$  ist dabei eine  $2M \times 2M$ -Matrix, wobei  $M$  die Gesamtzahl der Gitterplätze ist. In typischen Simulationen ist allerdings  $M \sim 10^4 - 10^6$ ; die Inversion einer so großen Matrix kann auf heutigen Computern nicht in vernünftiger Zeit durchgeführt werden<sup>10</sup>. Es ist daher nötig, einen effizienten Algorithmus zu benutzen.

Ein wohl bekannter Algorithmus zur Lösung dieses Problems ist die *Methode der rekursiven Green-Funktion* wie sie beispielsweise in [42] beschrieben ist. Eine didaktische Einführung findet sich in [62].

Der Algorithmus basiert darauf, nicht die gesamte Green'sche Funktion in einem Schritt zu berechnen, sondern die Green-Funktionen isolierter Abschnitte, die entweder analytisch bekannt sind oder leicht berechnet werden können, zu bestimmen und dann miteinander zu verbinden. Dazu fassen wir alle Gitterpunkte mit derselben longitudinalen Koordinate  $n$  zusammen. Es sei betont, dass die nachfolgenden Überlegungen

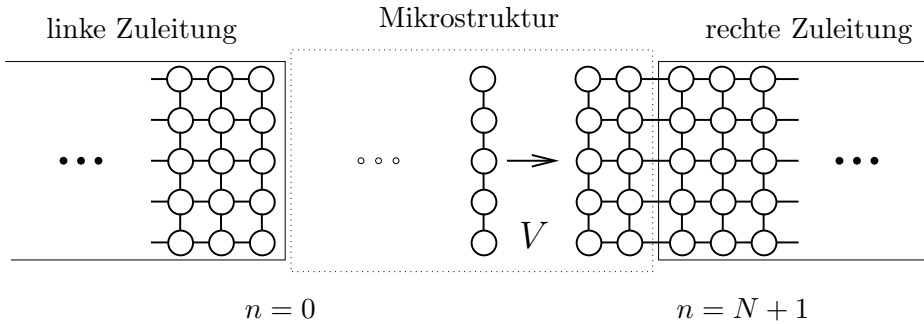
---

<sup>9</sup>Damit ist auch ersichtlich, dass die numerische Simulation von Metallen recht aufwendig sein kann: Der große Fermivektor  $k_F$  erfordert eine sehr kleine Gitterkonstante  $a$

<sup>10</sup>Nach einer Abschätzung dauerte die Inversion einer  $10^5 \times 10^5$ -Matrix ca. 23 Tage auf einem Linux-Rechner (Pentium 4, 1,8 GHz), die Inversion einer  $10^6 \times 10^6$ -Matrix ca. 60 Jahre. Die Speicherkapazität heutiger Rechner erweist sich allerdings als noch problematischer: Bereits eine  $10^4 \times 10^4$ -Matrix aus komplexen Zahlen benötigt ca. 1.5 Gigabyte Speicherplatz.

unabhängig von der Dimensionalität des Problems sind: In einer Dimension beschreibt  $|n\rangle$  einen *Gitterpunkt*, in zwei Dimensionen eine *Spalte* und in drei Dimensionen eine zweidimensionale *Schicht* von Gitterpunkten. Außerdem kann die Zahl der Gitterpunkte, die in einem Abschnitt  $|n\rangle$  enthalten sind, variieren. Somit können auch Strukturen mit variabler Breite mit diesem Algorithmus behandelt werden, wenngleich diese Arbeit sich auf Strukturen mit fester lateraler Größe beschränken wird.

Die Green-Funktion eines isolierten Abschnittes  $n$  kann einfach durch Inversion von  $(E - \tilde{H}_{n,n})$  mit  $\tilde{H}_{i,j} = \langle i | \tilde{H} | j \rangle$  berechnet werden. Dabei ist  $(E - \tilde{H}_{n,n})$  eine  $2M \times 2M$ -Matrix ( $M$  ist die Anzahl der Gitterpunkte in Abschnitt  $n$ ), die numerisch effizient invertiert werden kann, da nun  $M$  sehr viel kleiner als die Gesamtzahl der Gitterpunkte ist.



**Abb. 2.7:** Iterativer Aufbau der Green-Funktion

Der Algorithmus beginnt bei der rechten Zuleitung ( $n = N + 1$ ), deren Green-Funktion  $G^{R,(N+1)}$  analytisch berechnet werden kann [62] (siehe auch Anhang C). Wir wählen dabei die Notation  $G^{R,(n)}$  für die Green'sche Funktion, die alle Abschnitte  $i \geq n$  umfasst. Die Green-Funktion für alle Abschnitte  $i \leq n$  wird mit  $G^{L,(n)}$  bezeichnet. Die Green'sche Funktion des gesamten Systems wird  $G$  genannt. Daraufhin wird die Green-Funktion  $G^{0,(N)}$  von Abschnitt  $N$  berechnet und mit Hilfe der *Dyson-Gleichung*

$$G = G_0 + G_0 V G = G_0 + G V G_0 \quad (2.29)$$

an  $G^{R,(L+1)}$  gekoppelt. Dabei ist  $G_0 = G^{0,(N)} + G^{R,(N+1)}$  und die Kopplung  $V$  zwischen den Abschnitten  $n$  und  $n + 1$  ist durch

$$V = \tilde{H}_{n,n+1} |n\rangle \langle n+1| + \tilde{H}_{n+1,n} |n+1\rangle \langle n| \quad (2.30)$$

gegeben. Damit erhält man  $G^{R,(N)}$  und fährt nun iterativ fort, Abschnitte an die berechnete Green'sche Funktion zu koppeln, bis die linke Zuleitung erreicht ist. Schließlich wird die Green-Funktion der linken Zuleitung hinzugefügt und man erhält  $G_{0,0}$  und  $G_{N+1,0}$  durch die mit Hilfe der Fisher-Lee-Relation die Transmissions- und Reflexionsamplituden berechnet werden können (siehe Abbildung 2.7).

Wir geben im Folgenden eine Zusammenfassung der benötigten Gleichungen und beschreiben die Schritte des rekursiven Algorithmus wie sie in ähnlicher Form auch in [63] und [38] dargestellt sind<sup>11</sup>. Es gilt:

$$G_{n+p,n} = G_{n+p,n+p}^{R,(n+p)} \tilde{H}_{n+p,n+p-1} G_{n+p-1,n+p-1}^{R,(n+p-1)} \tilde{H}_{n+p-1,n+p-2} \cdots \quad (2.31)$$

$$\cdots \cdot G_{n+1,n+1}^{R,(n+1)} \tilde{H}_{n+1,n} G_{n,n} ,$$

$$G_{n,n} = \left( 1 - G_{n,n}^{L,(n)} \tilde{H}_{n,n+1} G_{n+1,n+1}^{R,(n+1)} \tilde{H}_{n+1,n} \right)^{-1} G_{n,n}^{L,(n)} , \quad (2.32)$$

$$G_{n,n}^{R,(n)} = \left[ \left( \tilde{E} - \tilde{H}_{n,n} \right) - \tilde{H}_{n,n+1} G_{n+1,n+1}^{R,(n+1)} \tilde{H}_{n+1,n} \right]^{-1} . \quad (2.33)$$

Zur Berechnung der Transmission und Reflexion an einer Mikrostruktur müssen nun folgende Schritte ausgeführt werden:

1. Berechne die Green-Funktion  $G_{N+1,N+1}^{R,(N+1)}$  der rechten Zuleitung.
2. Iteriere Gleichung (2.33)  $N$  mal, um  $G_{n,n}^{R,(n)}$  für  $n = N, N-1, \dots, 1$  zu erhalten.
3. Berechne die Green-Funktion  $G_{0,0}^{L,(0)}$  der linken Zuleitung.
4. Benutze Gleichung (2.32) um die Green-Funktion  $G_{0,0} = G_{LL}$  für das gesamte System zu erhalten. Nach Gleichung (2.25) kann nun die Reflexionsamplitude berechnet werden.
5. Benutze Gleichung (2.31) um die Green'sche Funktion  $G_{N+1,0} = G_{RL}$  zu berechnen. Nach Gleichung (2.24) erhält man daraus die Transmissionsamplitude.

Der Algorithmus besteht dabei hauptsächlich aus Matrizenmultiplikation und -inversion, die jeweils Rechenzeit  $\propto (2M)^3$  benötigen ( $M$  ist die Anzahl der Gitterplätze pro Abschnitt). Die Rechenzeit des gesamten Algorithmus ist also  $\propto N(2M)^3$ . Eine Verlängerung der Mikrostruktur in longitudinaler Richtung geht also nur linear in die Rechenzeit ein, eine Vergrößerung in transversaler Richtung dagegen kubisch. Aus diesem Grund werden viele der nachfolgenden Rechnungen in zweidimensionalen Systemen durchgeführt. Die deutlich aufwendigeren dreidimensionalen Rechnungen werden dann verwendet, um die Gültigkeit der zweidimensionalen Ergebnisse zu überprüfen.

---

<sup>11</sup>Wir verwenden in unserem Algorithmus Gleichung (2.32) anstatt Gleichung (2.26) in [38], aber beide Vorgehensweisen liefern dasselbe Ergebnis. Es erwies sich bei der Implementierung als günstiger, diesen modifizierten Algorithmus zu verwenden.

## 2.5 Implementierung des numerischen Algorithmus

Im vorherigen Abschnitt wurde ein effizienter numerischer Algorithmus zur Berechnung der Green-Funktion einer Mikrostruktur vorgestellt. Die tatsächliche Effizienz des Algorithmus hängt aber stark von der jeweils benutzten Computerarchitektur und der Implementierung ab. Wir zeigen daher im nächsten Abschnitt, dass durch Optimierung der linearen-Algebra-Routinen ein Geschwindigkeitsgewinn um einen Faktor 10 gegenüber einer naiven Implementierung erzielt werden kann. Danach zeigen wir, wie die Konvergenz der Tight-Binding-Näherung durch geeignete Interpolation der effektiven Masse erhöht werden kann.

### 2.5.1 Effiziente Numerik zur linearen Algebra

Der rekursive Green-Funktionsalgorithmus, der im vorigen Abschnitt vorgestellt wurde, verwendet lediglich lineare Algebra. Unter den verwendeten Rechenoperationen benötigen die Matrixmultiplikation und -inversion die meiste Rechenzeit, da sie mit  $M^3$  skalieren. Die Analyse eines typischen Programmlaufs zeigt, dass bis zu 92% der Rechenzeit des Algorithmus mit Matrixmultiplikationen verbracht werden. Dies scheint auf den ersten Blick erstaunlich, da auch die Matrixinversion ein sehr rechenintensiver Prozess ist. Übliche Routinen zur Matrixinversion verbringen aber einen Großteil ihrer Rechenzeit selbst mit Matrizenmultiplikation, so dass deren hoher Anteil an der Rechenzeit verständlich ist. Deshalb kann also durch Optimierung der Matrixmultiplikation ein erheblicher Geschwindigkeitsgewinn erzielt werden.

Tatsächlich erfordert die Optimierung einer scheinbar trivialen Operation wie der Matrixmultiplikation auf modernen Prozessorarchitekturen beträchtlichen Aufwand. Aktuelle Prozessoren enthalten meist mehrere Recheneinheiten für Gleitkommazahlen, die parallel arbeiten können. Außerdem unterscheiden sich die Zugriffszeiten des Prozessors auf Daten stark, abhängig davon, ob sie im internen Speicher (Cache) des Prozessors oder im Hauptspeicher enthalten sind. Eine optimale Implementierung der Matrixmultiplikation ist daher eine keine triviale Aufgabe.

Im Folgenden vergleichen wir daher mehrere Implementierungen, die auf den Rechnern der Universität Regensburg zur Verfügung stehen.

1. Eine einfache Implementierung in FORTRAN77 der Multiplikation mit drei Schleifen der Form

```
DO 100, J=1, SIZE
  DO 200, I=1, SIZE
```

```
          M1(I,J)=0.0D0
          DO 300,K=1,SIZE
              M1(I,J)=M1(I,J)+M2(I,K)*M3(K,J)
300      CONTINUE
200      CONTINUE
100      CONTINUE
```

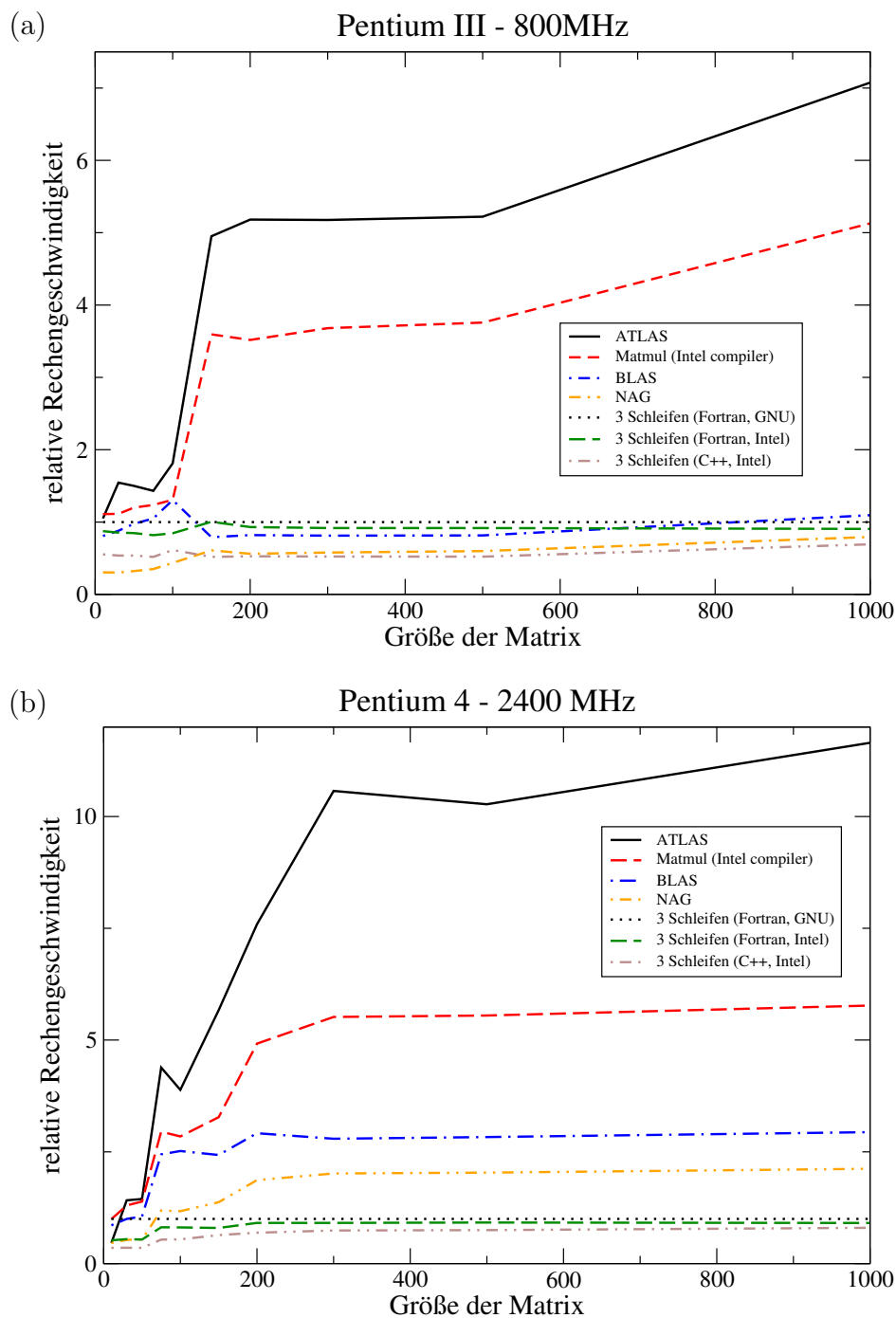
und eine Entsprechung in C++. Die FORTRAN-Variante wurde dabei sowohl mit dem GNU Compiler `g77` als auch dem Intel Compiler `ifc` übersetzt. Für die C++ Version wurde lediglich der Intel Compiler verwendet.

2. Verwendung der *Basic Linear Algebra Subroutines (BLAS)* Bibliothek [66]. Dabei handelt es sich um eine standardisierte Schnittstelle für Matrixoperationen. Eine Referenzimplementierung ist in der Regel auf jedem Linux-Rechner zu finden.
3. Verwendung der *NAG<sup>®</sup>* Bibliothek der *Numerical Algorithms Group*, die auch eine Implementierung der BLAS Routinen enthält.
4. Verwendung der *MATMUL* Routine aus FORTRAN90. Dabei wurde der Intel Compiler `ifc` verwendet.
5. Verwendung der *Automatically Tuned Linear Algebra Software (ATLAS)* Bibliothek [67]. Dabei handelt es sich um eine selbst-optimierende Implementierung der BLAS Schnittstelle, die frei verfügbar ist.

In Abbildung 2.8 werden die Rechengeschwindigkeiten der verschiedenen Implementierungen in Abhängigkeit von der Matrixgröße angegeben. Als Referenz zählt dabei die einfache Umsetzung durch 3 Schleifen in FORTRAN, die mit dem GNU Compiler `g77` übersetzt wurde. Offensichtlich ist bei jeder Matrixgröße die Implementierung mittels ATLAS besonders effizient, gefolgt von der *MATMUL* Version des Intel Compilers. Weder die BLAS noch die *NAG<sup>®</sup>* Bibliothek erscheinen besonders gut optimiert. Gerade bei Matrixgrößen  $> 100$  ist der Geschwindigkeitsgewinn von ATLAS gegenüber den naiven Implementierungen enorm<sup>12</sup>, eine Effizienzsteigerung bis um einen Faktor 10 ist möglich. Die Verwendung der ATLAS Bibliothek in unserer Implementierung des Algorithmus erlaubt uns daher, eine weit größere Anzahl an Gitterpunkten zu verwenden, als in früheren Arbeiten.

---

<sup>12</sup>Bei diesen Größen passen die Matrizen nicht mehr in den Prozessorcaché, was zu einem dramatischen Effizienzverlust in den naiven Implementierungen führt.

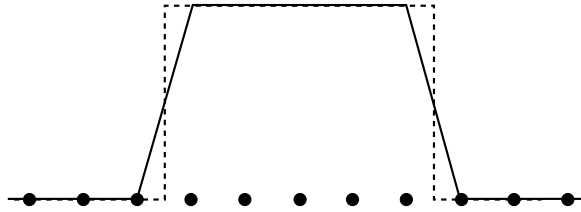


**Abb. 2.8:** Effizienz verschiedener Implementierungen von Matrizenmultiplikationen. Die Rechengeschwindigkeiten wurden für einen Linux-Rechner mit einem Pentium III bei 800 MHz (a) und einem Pentium 4 bei 2.4 GHz (b) in Abhängigkeit von der Matrixgröße angegeben. Die Geschwindigkeiten sind dabei relativ zur Fortran-Implementierung der Multiplikation mit 3 Schleifen angegeben, die mit dem GNU Compiler `g77` übersetzt wurde.

## 2.5.2 Interpolation der effektiven Masse

Die Behandlung einer abrupten Heterostruktur mit Sprüngen im Bandursprung und der effektiven Masse in der Tight-Binding-Näherung erfordert einige Vorsicht.

Anstelle einer abrupten Änderung führt die Diskretisierung zu einer endlichen Steigung an der Sprungstelle im Potential bzw. der effektiven Masse. Je feiner das Gitter, desto steiler ist diese Steigung und desto besser wird dadurch die Sprungstelle angenähert. Dabei muss darauf geachtet werden, dass im Zug der Diskretisierung die effektive Breite einer Stufe konstant gehalten wird [68]. Dies geschieht am einfachsten, indem die Sprungstelle *zwischen* zwei Gitterpunkten gewählt wird. (Vergleiche Abbildung 2.9) Nach Gleichung (2.26) werden zur Diskretisierung der Schrödinger-Gleichung aber die



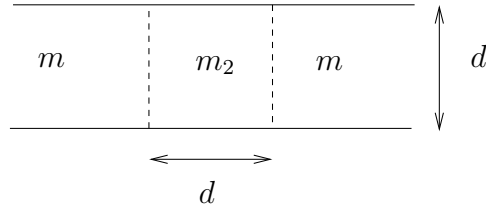
**Abb. 2.9:** Die effektive Breite der Stufe wird bei der Diskretisierung konstant gehalten.

Werte der effektiven Masse auch *zwischen* den Gitterpunkten benötigt, d. h. an der Sprungstelle. Es bieten sich daher folgende Interpolationen an:

- $\tilde{m}(i + \frac{1}{2}) = \tilde{m}(i)$ , eine Verschiebung des Verlaufs der effektiven Masse um eine halbe Gitterkonstante,
- das *arithmetische Mittel*  $\tilde{m}(i + \frac{1}{2}) = \frac{1}{2} (\tilde{m}(i) + \tilde{m}(i + 1))$  und
- das *harmonische Mittel*  $\tilde{m}(i + \frac{1}{2})^{-1} = \frac{1}{2} (\tilde{m}(i)^{-1} + \tilde{m}(i + 1)^{-1})$ .

In [68] wird gezeigt, dass zur Berechnung von Energieeigenwerten eines Quantentrogs das arithmetische Mittel zu besserer Konvergenz der Diskretisierung als das harmonische Mittel führt. Wir wollen daher nun die Konvergenz anhand einer Berechnung für die Transmission überprüfen.

Dazu betrachten wir die Transmission durch ein zweidimensionales freies Elektronengas mit zwei verschiedenen effektiven Massen  $m = m_e$  und  $m_2$ . Die Dicke der Schicht mit Masse  $m_2$  sei  $d$ . Das ganze System sei dabei in transversaler Richtung in einen Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden eingeschlossen. Für die Breite dieser Box wählen



**Abb. 2.10:** Geometrie zur Überprüfung der Interpolation der effektiven Masse

wir ebenfalls  $d$  (vgl. Abbildung 2.10). Dann ist die Transmissionswahrscheinlichkeit für die Mode der niedrigsten Energie<sup>13</sup>

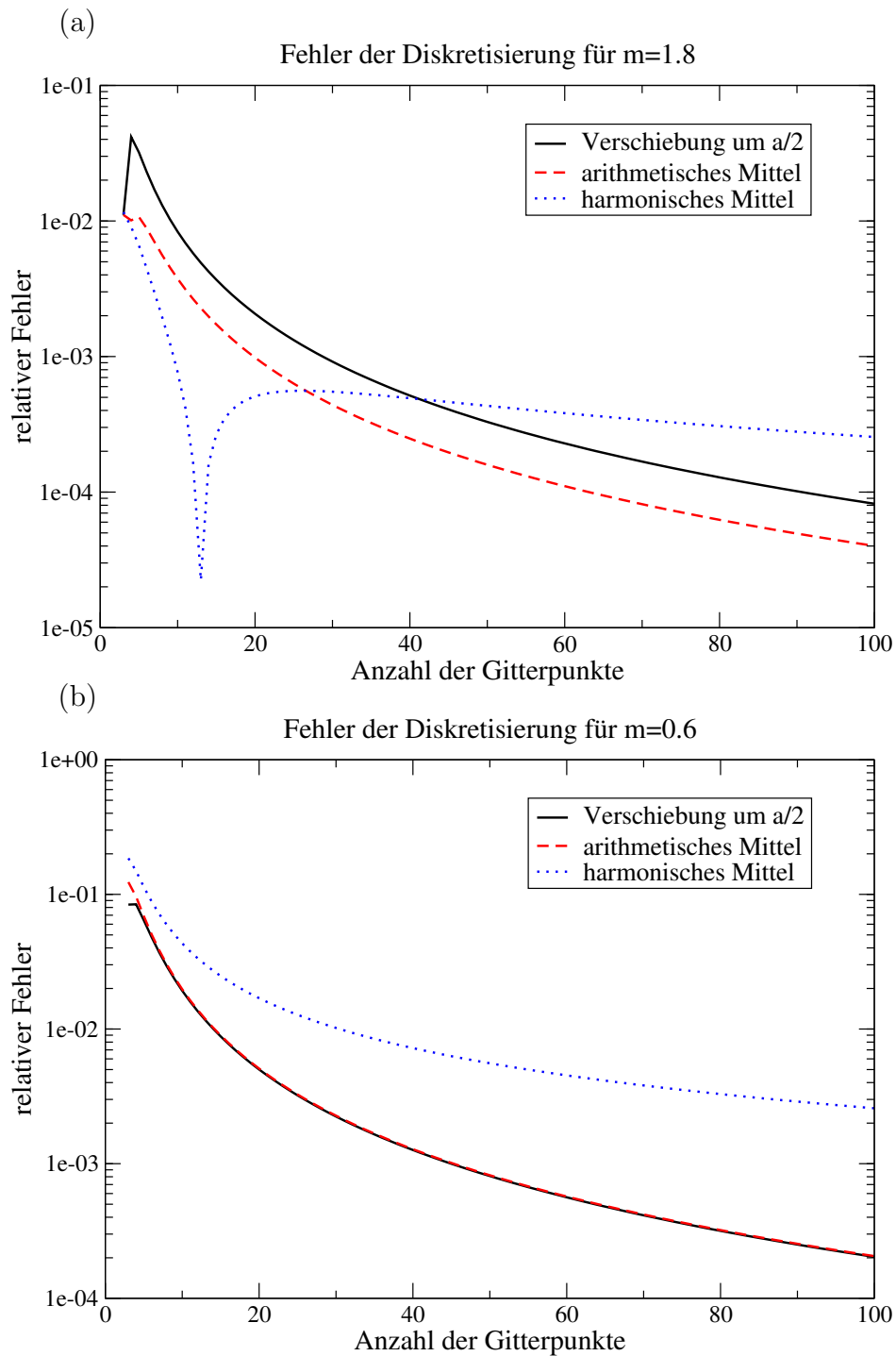
$$T(m_2) = \frac{16 \left(\frac{m_2}{m}\right)^2 k^2 k_2^2}{\left(\cos(2k_2d) \left(k\frac{m_2}{m} - k_2\right)^2 - \left(k\frac{m_2}{m} + k_2\right)^2\right)^2 + \sin^2(2k_2d) \left(k\frac{m_2}{m} - k_2\right)^4}$$

mit  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{\pi^2}{d^2}}$  und  $k_2 = \sqrt{\frac{2m_2E}{\hbar^2} - \frac{\pi^2}{d^2}}$ .

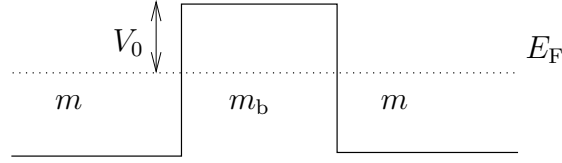
Wir vergleichen dieses analytische Ergebnis mit unserer numerischen Rechnung. In Abbildung 2.11 ist der relative Fehler des numerischen Ergebnisses in Abhängigkeit von der Anzahl der Gitterpunkte, die zur Diskretisierung der Länge  $d$  verwendet wurden, aufgetragen. Die Diskretisierung ist dabei umso feiner, je größer die Zahl der Gitterpunkte ist.

Bei  $m_2 = 1.8 m_e$  führt das arithmetische Mittel für eine große Anzahl an Gitterpunkten zur besten Konvergenz, während das harmonische Mittel ein Minimum des relativen Fehlers bei einer Gitterpunktzahl  $N_0$  zeigt. Der numerisch berechnete Wert überquert dabei den exakten Wert, bevor er schließlich gegen das analytische Ergebnis konvergiert. Ein ähnliches Verhalten wird auch in [68] beobachtet. Bei  $m_2 = 0.6 m_e$  findet man dagegen kein Minimum und sowohl das arithmetische Mittel als auch die Verschiebung um eine halbe Gitterkonstante weisen durchgehend eine bessere Konvergenz auf. Aus diesen Gründen werden wir im Verlauf dieser Arbeit das arithmetische Mittel zur Interpolation der effektiven Masse verwenden.

<sup>13</sup>Die Wellenfunktion muss die Kontinuitätsbedingungen  $\psi(x^+) = \psi(x^-)$  und  $\frac{1}{m(x^+)} \partial\psi/\partial x|_{x^+} = \frac{1}{m(x^-)} \partial\psi/\partial x|_{x^-}$  erfüllen [51]. Die Rechnung erfolgt analog zu Standardproblemen der eindimensionalen Quantenmechanik



**Abb. 2.11:** Fehler in der Transmission durch die Diskretisierung in Abhängigkeit von der Anzahl der verwendeten Gitterpunkte für  $m_2 = 1.8 m_e$  (a) und  $m_2 = 0.6 m_e$  (b). In der Rechnung wurde  $\tilde{E} = 0.2$  für 10 Gitterpunkte gewählt und für andere Anzahlen entsprechend skaliert.



**Abb. 2.12:** Verwendete Geometrie zur Überprüfung des numerischen Algorithmus

## 2.6 Reproduktion bekannter Ergebnisse

Wir haben einen sehr allgemeinen Formalismus zur Berechnung von Leitwerten vorgestellt. In diesem Abschnitt sollen nun analytisch bekannte Ergebnisse numerisch reproduziert werden, um die Zuverlässigkeit der Implementierung sicherzustellen.

### 2.6.1 Tunneln durch eine Barriere

Da der weitere Verlauf dieser Arbeit sich vornehmlich mit Tunnelphänomenen beschäftigt, soll zunächst gezeigt werden, dass der vorgestellte Algorithmus Tunnelprozesse mit ausreichender Genauigkeit beschreiben kann.

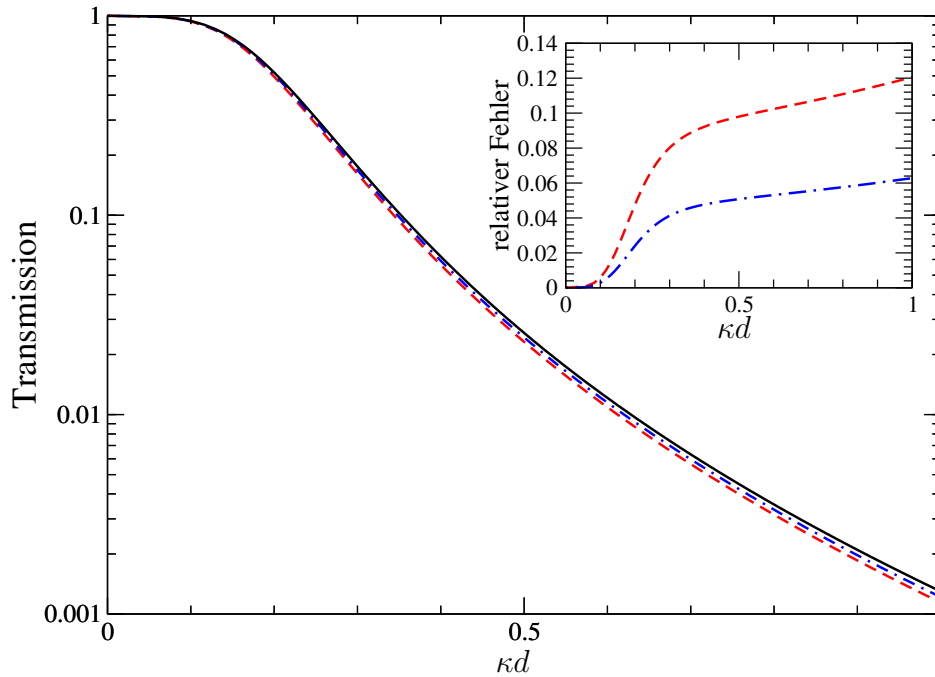
Dazu betrachten wir die Transmission durch eine rechteckige Tunnelbarriere der Höhe  $V_0$  und der Dicke  $d$ , deren effektive Masse  $m_b$  sich von der effektiven Masse der Zuleitungen  $m = m_e$  unterscheidet (siehe Abbildung 2.12).

Die Transmission durch eine solche Barriere ist gegeben durch

$$T = \frac{16m^2 m_b^2 k^2 \kappa^2 e^{2\kappa d}}{((1 + e^{2\kappa d}) 2 m m_b \kappa k)^2 + ((m^2 \kappa^2 - m_b^2 k^2) (1 - e^{2\kappa d}))^2}.$$

Dabei ist  $k = k_F$  der Wellenvektor der einfallenden Elektronen,  $\kappa = \sqrt{\frac{2m_b}{\hbar^2} V_0}$ . In Abbildung 2.13 ist ein Vergleich der numerischen Rechnung für verschiedene Gitterkonstanten mit dem analytischen Ergebnis dargestellt. Dazu wurde die Transmission in einem zweidimensionalen Streifen der Breite  $d$  mit periodischen Randbedingungen berechnet. Bei der gewählten Energie war nur die Mode mit  $k_{\parallel} = 0$  am Transport beteiligt.

Die Übereinstimmung der Ergebnisse für eine niedrige Barriere ist sehr gut, während bei größerer Barrierenhöhe die numerische Rechnung leichte Abweichungen vom analytischen Resultat zeigt. In diesem Fall weicht die Tight-Binding-Näherung weiter vom Kontinuumsmodell ab, und wie bereits erwähnt, können schon kleine Fehler durch die Diskretisierung zu bemerkbaren Abweichungen in der Transmission führen, da die Tunnelwahrscheinlichkeit exponentiell von Parametern wie der Barrierenhöhe oder -dicke



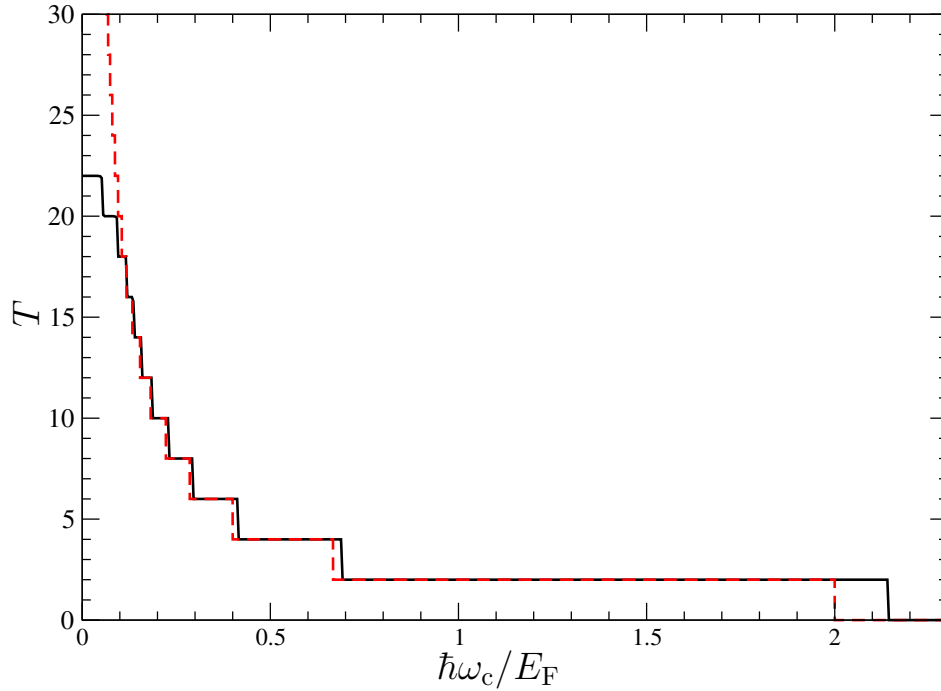
**Abb. 2.13:** Transmission durch eine Barriere der Dicke  $d$  mit effektiver Masse  $m_b = 0.067 m_e$ . Der Fermi-Vektor der einfallenden Elektronen wurde so gewählt, dass  $kd = \sqrt{0.1}$ . Die durchgezogene Linie stellt das analytische Ergebnis dar. Die gestrichelte Linie ist das Ergebnis einer numerischen Rechnung mit 20 Gitterpunkten pro Länge  $d$ , die gestrichelt-gepunktete Linie für 40 Gitterpunkte. Im eingebetteten Graph ist der relative Fehler der numerischen Rechnung dargestellt.

abhängt. Durch Wahl eines feineren Gitters können diese Fehler aber verkleinert werden (vgl. eingebetteter Graph in Abbildung 2.13), die Konvergenz gegen den Kontinuums-limes ist also gewährleistet.

## 2.6.2 Transport im Magnetfeld

Da im Verlauf dieser Arbeit auch Tunnelprozesse unter Einfluss eines externen Magnetfeldes  $B$  untersucht werden, soll hier anhand eines einfachen Beispiels der Nutzen des vorgestellten Formalismus aufgezeigt werden.

Wir betrachten dazu den Transport in einem zweidimensionalen Elektronengas, das in transversaler Richtung in einem Potentialtopf der Breite  $W$  und unendlich hohen Wänden eingeschlossen ist. Durch Anlegen eines Magnetfeldes senkrecht zur Ebene



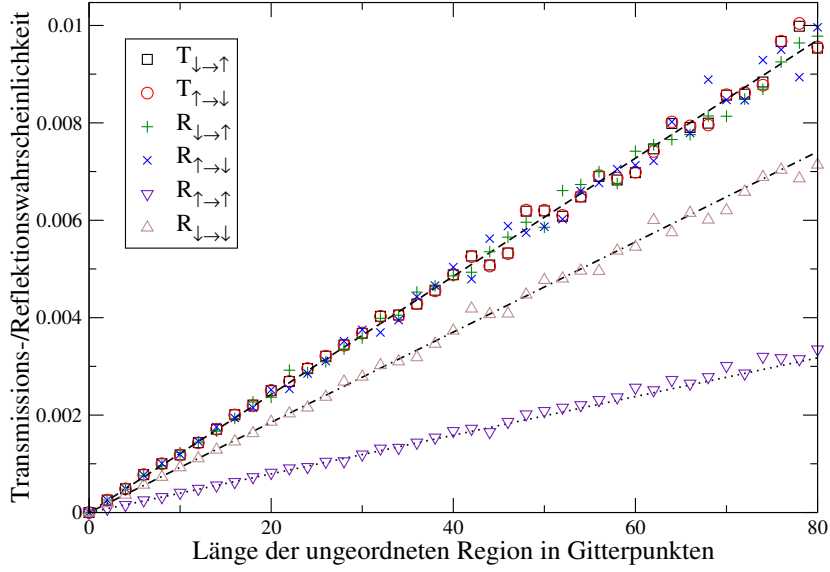
**Abb. 2.14:** Transport durch ein Magnetfeld  $B$ . Die durchgezogene Linie gibt die numerische Rechnung, die gestrichelte Linie das Näherungsergebnis (2.34) wieder. Die Parameter der numerischen Simulation sind  $W = 50$  Gitterpunkte und  $\tilde{E}_F = 0.5$ . Die Länge des Gebiets mit Magnetfeld beträgt 250 Gitterpunkte, dabei wurde das Magnetfeld auf einer Länge von jeweils 50 Gitterpunkten ein- und ausgeschaltet.

des 2DEG werden die transversalen Energiezustände des Potentialtopfes (=Transportkanäle) sukzessive entleert. Dabei ist die Zahl der noch besetzten Kanäle gegeben durch [69]

$$N \approx \text{Int} \left[ \frac{1}{2} + \frac{E_F}{\hbar\omega_c} \right] \quad \text{für } l_{\text{cycl}} < W/2 \quad (2.34)$$

mit  $l_{\text{cycl}} = \frac{\hbar k_F}{eB}$  und  $\omega_c = \frac{eB}{m}$ . Diese Gleichung ist bis auf  $\pm 1$  gültig. Wird das Magnetfeld adiabatisch ein- und wieder ausgeschaltet, so ist die gesamte Transmission durch das Gebiet mit Magnetfeld  $T_{\text{tot}} \approx 2N$ .

Abbildung 2.14 zeigt einen Vergleich zwischen numerischem Resultat und der Näherung (2.34). Im Rahmen der Gültigkeit der Näherungsformel ergibt sich eine hervorragende Übereinstimmung.



**Abb. 2.15:** Vergleich der numerischen Rechnung und der analytischen Vorhersage für Spin-Flip-Streuung. In der Simulation wurde  $\tilde{E}_{\uparrow} = 0.07$ ,  $\tilde{E}_{\downarrow} = 0.03$  und  $\tilde{\varepsilon}_0 = 0.01$  gewählt. Die Ergebnisse der numerischen Rechnung sind durch Symbole, die analytischen Ergebnisse durch Geraden eingetragen.

### 2.6.3 Spin-Flip-Streuung

Um das in Abschnitt 2.2.2 vorgestellte Modell zur Spin-Flip-Streuung zu verifizieren, betrachten wir ein eindimensionales System mit Stoner-Aufspaltung  $\Delta$ . Wir führen auf einer Länge  $L$  Spin-Flip-Unordnung der Stärke  $\varepsilon_0$  ein.

Im Limes schwacher Streuung findet beim Durchgang eines Elektrons durch das ungeordnete Gebiet höchstens ein Streuvorgang statt. Bei einem Streuvorgang findet neben einem möglichen Spin-Flip des Elektrons auch Impulsstreuung statt. Dabei ist die Wahrscheinlichkeit für Reflexion an der Störstelle ebenso wie die Wahrscheinlichkeit für Transmission jeweils  $\frac{1}{2}$ , da es sich um isotrope Streuung handelt. Die Transmissions- bzw. Reflexionswahrscheinlichkeit ist daher einfach durch das Produkt aus der Zeit, die ein Elektron zur Durchquerung des ungeordneten Gebiets benötigt, der Streurrate und einem Faktor  $\frac{1}{2}$  gegeben:

$$T_{s \rightarrow -s} = \frac{1}{2} \frac{L}{v_F} \frac{1}{\tau_{s \rightarrow -s}},$$

$$R_{s \rightarrow s'} = \frac{1}{2} \frac{L}{v_F} \frac{1}{\tau_{s \rightarrow s'}}.$$

Die Streuraten sind in Anhang A.2 aufgeführt.

In Abbildung 2.15 wird die numerische Rechnung mit der theoretischen Vorhersage verglichen. Wir finden dabei eine hervorragende Übereinstimmung zwischen der numerischen und der analytischen Rechnung.

# Kapitel 3

## Tunnelmagnetowiderstand einer geordneten Barriere

Im vorangegangenen Kapitel wurde ein allgemeiner Formalismus zur Berechnung von spinabhängigen Leitwerten vorgestellt. Wir werden in diesem Teil der Arbeit einfache Modelle zur Beschreibung eines idealen Fe/GaAs/Fe-Tunnelsystems vorstellen.

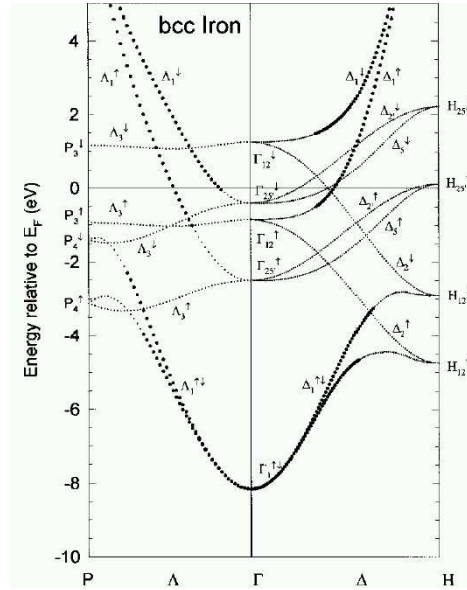
Dazu führen wir zunächst die effektive Tunnelzustandsdichte nach Stearns ein [9], die die Verwendung eines Freien-Elektronengas-Modells zur Beschreibung von Fe rechtfertigt. Anschließend stellen wir kurz die ursprünglichen Tunnelmagnetowiderstands-Experimente und ihre Erklärung durch Juillièrè vor [10], ehe ein Modell zur Berechnung des TMR-Effekts im Rahmen eines freien Elektronengases beschrieben wird [29,30], das Ausgangspunkt der späteren Betrachtungen sein wird. Nach einigen Bemerkungen zur Numerik wird die Magnetfeldabhängigkeit des Tunnelwiderstands in diesem Modell untersucht.

### 3.1 Effektive Tunnelzustandsdichte nach Stearns

Da die elektronische Zustandsdichte an der Fermi-Kante für Ferromagneten vom Spin abhängt (vgl. Abschnitt 2.1.2), ist es sinnvoll, eine Spinpolarisation der Zustandsdichte an der Fermi-Kante einzuführen:

$$P = \frac{D_{\uparrow}(E_F) - D_{\downarrow}(E_F)}{D_{\uparrow}(E_F) + D_{\downarrow}(E_F)} \quad (3.1)$$

wobei  $D_{\uparrow}$  die Zustandsdichte für Majoritäts- und  $D_{\downarrow}$  für Minoritätsladungsträger ist. Diese Spinpolarisation kann durch Tunnelexperimente an Ferromagnet/Isolator/Supra-



**Abb. 3.1:** Bandstruktur für Fe (bcc). Die  $s$ -artigen Bänder sind dicker eingezeichnet (aus [70]).

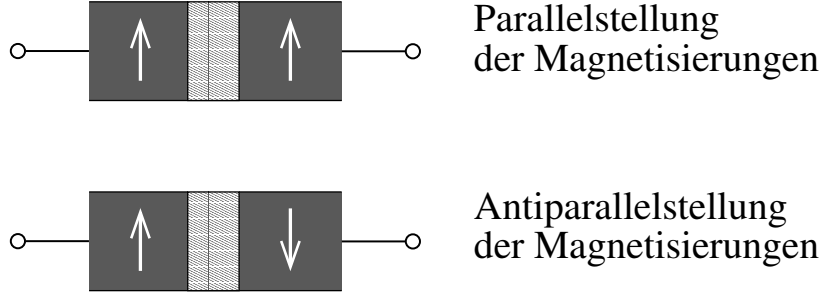
leiter-Tunnelsystemen gemessen werden (siehe dazu z. B. [12]). Die experimentell bestimmten Werte unterscheiden sich aber von den theoretisch berechneten. Diese Diskrepanz wurde von *Stearns* erklärt [9], indem sie berücksichtigte, dass Elektronen aus verschiedenen Bändern unterschiedlich zum Tunnelstrom beitragen.

Die Bandstruktur von Fe ist in Abbildung 3.1 angegeben. An der Fermi-Kante findet sich jeweils ein  $s$ -artiges Band (fett eingezeichnet), mit einer Energiedispersion ähnlich einem freien Elektronengas und einer nahezu sphärischen Fermi-Oberfläche, die *Stearns* als *itinerante d-Elektronen* bezeichnet. Daneben gibt es noch flache, stärker lokalisierte Bänder. Nach *Stearns* können diese flachen Bänder beim Tunnelprozess vernachlässigt werden, da sie mit ihrer größeren effektiven Masse und kleineren Fermi-Geschwindigkeit nur wenig zum Tunnelstrom beitragen. Daher kann man sich zur Beschreibung der Bandstruktur von Fe auf ein Modell eines freien Elektronengases beschränken. Dieses Ergebnis wird von neueren Bandstrukturuntersuchungen [71] und ab-initio Rechnungen [72] unterstützt.

Die Spinpolarisation ist damit gegeben durch

$$P = \frac{k_{F,\uparrow} - k_{F,\downarrow}}{k_{F,\uparrow} + k_{F,\downarrow}} \quad (3.2)$$

wobei  $k_{F,\uparrow}$  und  $k_{F,\downarrow}$  die Fermivektoren für Majoritäts- und Minoritätsladungsträger sind. Die von *Stearns* zur Bestimmung von  $k_{F,\uparrow}$ ,  $k_{F,\downarrow}$  und  $m$  verwendete Bandstruktur



**Abb. 3.2:** Ein Ferromagnet/Isolator/Ferromagnet-Tunnelelement weist je nach relativer Ausrichtung der Magnetisierungen einen unterschiedlichen Widerstand auf.

stimmt nur qualitativ mit neueren Messungen überein. Wir verwenden daher die von Kreuzer bestimmten Parameter [23]:  $k_{F,\uparrow} = 0.86 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$ ,  $k_{F,\downarrow} = 0.29 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$  und  $m \approx m_e$ . Damit ist die Spinpolarisation  $P = 0.5$ , was mit dem experimentell bestimmten Wert von 45% verträglich ist [12]. Wir werden im Folgenden diese Werte zur Beschreibung von Fe verwenden. Mit dieser Argumentation ist auch die Verwendung des einfachen Stoner-Modells aus Abschnitt 2.1.2 gerechtfertigt.

## 3.2 Juillièrè-Modell

Der Tunnelwiderstand eines Ferromagnet/Isolator/Ferromagnet-Tunnelelements hängt von der relativen Ausrichtung der Magnetisierungen der Ferromagneten ab: Der Widerstand ist bei *Parallelstellung* (P) der Magnetisierungen kleiner als bei *Antiparallelstellung* (AP). Dies wird als Tunnelmagnetowiderstandseffekt (TMR-Effekt, nach *tunneling magnetoresistance*) bezeichnet. Man definiert dann das TMR-Verhältnis als

$$TMR = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P} = \frac{G_P - G_{AP}}{G_{AP}}. \quad (3.3)$$

Dabei ist  $R_P$  ( $R_{AP}$ ) der Widerstand bei Parallelstellung (Antiparallelstellung) der Magnetisierungen und  $G_P$  ( $G_{AP}$ ) der Leitwert. In der Literatur findet sich ebenfalls eine Definition, die wir mit

$$TMR^* = \frac{R_{AP} - R_P}{R_{AP}} = \frac{G_P - G_{AP}}{G_P} \quad (3.4)$$

bezeichnen wollen.

Juillièrè wies den TMR-Effekt erstmals 1975 an einem Fe/Ge/Co-Tunnelelement nach [10]. Das dabei gefundene TMR-Verhältnis betrug bis zu 14%.

In [10] wird ebenfalls ein einfaches Modell zur Beschreibung des TMR-Effekts aufgestellt. Dabei wird angenommen, dass der Leitwert des Tunnelements bei einer bestimmten Orientierung der Magnetisierungen proportional zum Produkt der effektiven spinabhängigen Zustandsdichte an der Fermi-Kante ist:

$$\begin{aligned} G_P &\propto D_{1,\uparrow}D_{2,\uparrow} + D_{1,\downarrow}D_{2,\downarrow} \\ G_{AP} &\propto D_{1,\uparrow}D_{2,\downarrow} + D_{1,\downarrow}D_{2,\uparrow} \end{aligned} \quad (3.5)$$

$D_{1,s}$  und  $D_{2,s}$  sind dabei die spinabhängigen Zustandsdichten der linken und rechten Zuleitung, für die die effektive Zustandsdichte nach Stearns eingesetzt werden muss (vgl. Abschnitt 3.1). Setzt man Gleichung (3.5) in Gleichung (3.3) ein und nimmt man die rechte und linke Zuleitung als gleich an, so erhält man folgenden Ausdruck für das TMR-Verhältnis:

$$TMR = \frac{2P^2}{1 - P^2} \quad (3.6)$$

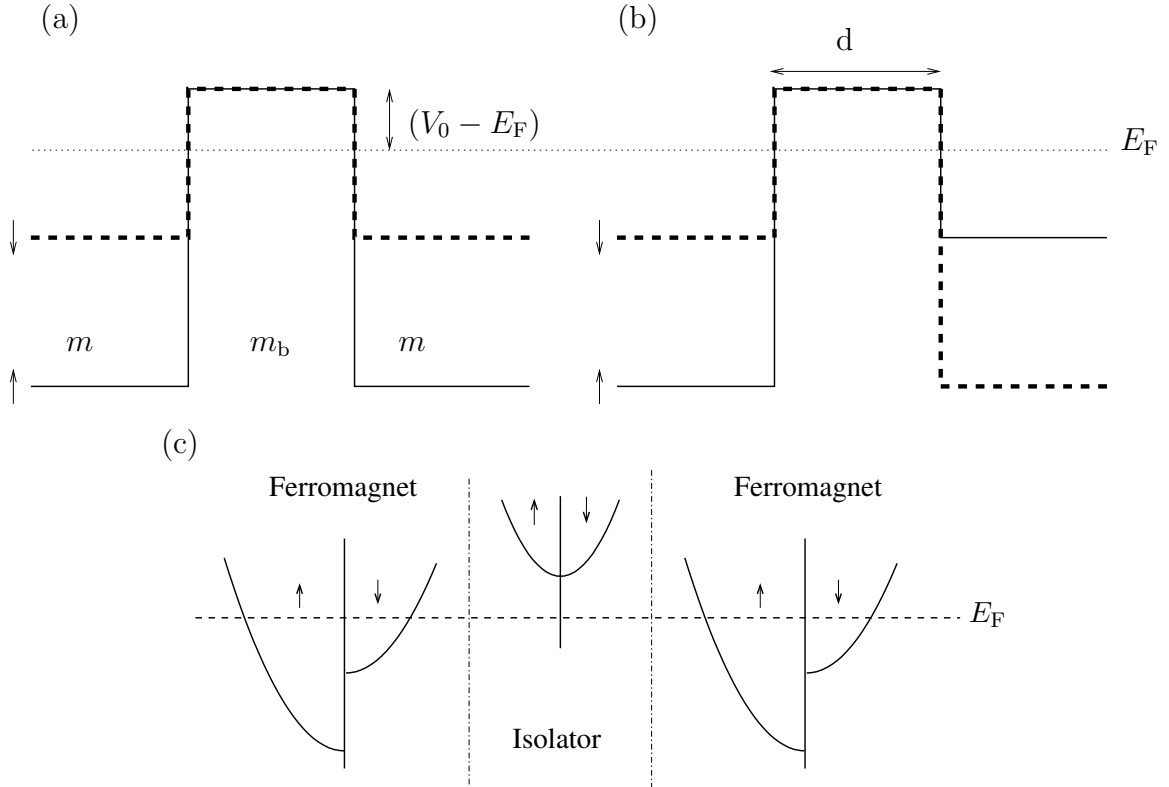
Das TMR-Verhältnis ist nach diesem Modell eine intrinsische Eigenschaft der ferromagnetischen Zuleitungen, Eigenschaften der Barriere gehen nicht in das TMR-Verhältnis ein.

McLaren *et al.* haben die Allgemeingültigkeit des Juillièrè-Modells in Frage gestellt [73]; unter anderem heben sie die Notwendigkeit hervor, auch die Eigenschaften der Barriere selbst mit einzubeziehen. Tatsächlich sind einige drastische Vereinfachungen in den Annahmen des Modells enthalten: Es wird vorausgesetzt, dass der Proportionalitätsfaktor in (3.5) — das Tunnelmatrixelement — unabhängig vom transversalen Impuls der einfallenden Elektronen, von der Spinrichtung und der relativen Ausrichtung der Magnetisierungen ist.

Im nächsten Abschnitt wird daher ein Modell untersucht, das auch die Tunnelbarriere zur Berechnung des TMR-Effekts mit einbezieht.

### 3.3 Bratkovsky-Modell

Ein weiteres einfaches Modell für den TMR-Effekt basiert auf der Näherung eines freien Elektronengases. Ein Isolator der Dicke  $d$  wird von zwei ferromagnetischen Zuleitungen umgeben. Die isolierende Schicht wird durch eine Potentialstufe der Höhe  $V_0$  und eine effektive Masse  $m_b$  beschrieben, die Ferromagneten durch ein Stoner-Modell mit effektiver Masse  $m$ . Im Fall paralleler und antiparalleler Magnetisierungen ergibt sich dann ein einfaches, stufenförmiges Potentialprofil, das spinabhängig ist (vgl. dazu Abbildung 3.3). Dieses Modell für den TMR-Effekt wurde zunächst von Slonczewski vorgestellt [29]. Bratkovsky erweiterte später das Modell, um verschiedene effektive Massen in Ferromagnet und Isolator zu verwenden [30].



**Abb. 3.3:** Verlauf der spinabhängigen Potentiale im Bratkovsky-/Slonczewski-Modell. (a) Parallelstellung, (b) Antiparallelstellung der Magnetisierungen, (c) Bandstruktur bei Parallelstellung der Magnetisierungen.

Wir wollen zunächst kurz die Berechnung des TMR-Effekts in diesem Modell skizzieren und auf Näherungen eingehen, die von Slonczewski und Bratkovsky durchgeführt wurden. Dabei folgen wir [73].

Die  $z$ -Komponente des Wellenvektors eines Elektrons mit transversalem Wellenvektor  $k_{\parallel}$  ist in der linken Zuleitung durch  $k_1 = \sqrt{k_{F,1}^2 - k_{\parallel}^2}$  und in der rechten Zuleitung durch  $k_2 = \sqrt{k_{F,2}^2 - k_{\parallel}^2}$  gegeben, wobei  $k_{F,1}$  und  $k_{F,2}$  die Fermivektoren auf der linken und rechten Seite der Barriere sind. Das System ist in transversaler Richtung translationsinvariant,  $k_{\parallel}$  bleibt demnach beim Tunnelvorgang erhalten. Der Transmissionskoeffizient durch die Barriere ist dann durch

$$T(k_{\parallel}) = \frac{16 m^2 m_b^2 k_1 \kappa^2 k_2 e^{2d\kappa}}{(m m_b \kappa (k_1 + k_2) [1 + e^{2d\kappa}])^2 + ((m^2 \kappa^2 - m_b^2 k_1 k_2) [1 - e^{2d\kappa}])^2} \quad (3.7)$$

gegeben ( $\kappa = \sqrt{\frac{2m_b}{\hbar^2}(V_0 - E_F) + k_{\parallel}^2}$ ). Mit Hilfe der Landauer-Formel kann der Leitwert

$G$  des Tunnелеlements berechnet werden

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_{k_{||}} T(k_{||}) = \frac{e^2}{h} \frac{A}{(2\pi)^2} \int d^2 k_{||} T(k_{||}) . \quad (3.8)$$

Bei paralleler Ausrichtung der Ferromagneten muss dabei für die Majoritätsladungsträger  $k_1 = k_2 = k_{\uparrow} = \sqrt{k_{F,\uparrow}^2 - k_{||}^2}$  und  $k_1 = k_2 = k_{\downarrow} = \sqrt{k_{F,\downarrow}^2 - k_{||}^2}$  für die Minoritätsladungsträger gewählt werden, bei Antiparallelstellung jeweils  $k_1 = k_{\uparrow}$  und  $k_2 = k_{\downarrow}$ .

Das Integral in Gleichung (3.8) kann im Allgemeinen nur numerisch berechnet werden. In [29, 30] werden daher einige Näherungen durchgeführt.

Anstatt des exakten Transmissionskoeffizienten aus Gleichung (3.7) wird der Transmissionskoeffizient

$$T(k_{||}) = \frac{16 m^2 m_b^2 k_1 \kappa^2 k_2 e^{-2d\kappa}}{(m m_b \kappa (k_1 + k_2))^2 + (m^2 \kappa^2 - m_b^2 k_1 k_2)^2} \quad (3.9)$$

für den Grenzfall  $\kappa d \gg 1$  verwendet. Bei der Integration in (3.8) wird die  $k_{||}$ -Abhängigkeit des rationalen Faktors vernachlässigt und nur im exponentiellen Term  $e^{2\kappa d}$  berücksichtigt. Außerdem werden nur lineare Terme in  $1/d$  mitgenommen. Der Ausdruck für den Leitwert des Tunnелеlements nimmt dann eine besonders einfache Form an:

$$G = \frac{e^2 V \kappa_0}{4\pi h} \frac{1}{d} T(0) .$$

Der Leitwert ist damit proportional zur Transmission senkrecht auf die Barriere einfallender Ladungsträger ( $k_{||} = 0$ ), da das Tunneln für schrägen Einfall exponentiell unterdrückt ist. Im Fall einer idealen Barriere ergibt sich also ein praktisch *eindimensionales* Problem.

Mit diesen Näherungen kann das TMR-Verhältnis durch den Ausdruck (3.6) des Juillièrè-Modells mit einer effektiven Polarisation

$$P_{\text{eff}} = P \frac{\kappa_0 - (m_b/m)^2 k_{F,\uparrow} k_{F,\downarrow}}{\kappa_0 + (m_b/m)^2 k_{F,\uparrow} k_{F,\downarrow}} \quad (3.10)$$

beschrieben werden.

Das Juillièrè- und das Bratkovsky-Modell sollen nun zur Berechnung des TMR-Effekts an einem Fe/GaAs/Fe-Tunnелеlement, das an der Universität Regensburg vermessen wurde [23], verwendet und mit einer numerischen Berechnung von Gleichung (3.8) verglichen werden.

Galliumarsenid bildet an der Grenzfläche zu Eisen eine Schottky-Barriere aus. Aufgrund der geringen Dicke der einkristallinen Halbleiterbarriere wird die Fermi-Energie in der Mitte der Bandlücke von GaAs, zwischen Valenz- und Leitungsband, festgehalten. Die Barriere kann daher gut durch eine Potentialstufe mit einer Höhe von ungefähr

0.75 eV beschrieben werden (vgl. [23]). Für die effektive Masse  $m_b$  der Barriere verwenden wir den Wert der Leitungsbandelektronen von GaAs  $m_{\text{GaAs}} = 0.067 m_e$  (z. B. [43]). In Tabelle 3.1 sind die in dieser Arbeit verwendeten Parameter zur Beschreibung von Fe/GaAs-Tunnelsystemen nochmals zusammengefasst.

$k_{\text{F},\uparrow}$	$k_{\text{F},\downarrow}$	$m_{\text{Fe}}$	$V_0 - E_{\text{F}}$	$m_{\text{GaAs}}$
$0.86 \text{ \AA}^{-1}$	$0.29 \text{ \AA}^{-1}$	$1.0 m_e$	$0.75 \text{ eV}$	$0.067 m_e$

**Tabelle 3.1:** Parameter für Fe/GaAs/Fe-Tunnelement

Zunächst vergleichen wir die Polarisationsabhängigkeit des TMR-Effekts im Juilliére-Modell, im Bratkovsky-Modell und bei numerischer Integration. Dazu halten wir den Fermi-Vektor  $k_{\text{F},\uparrow} = 0.86 \text{ \AA}^{-1}$  konstant und variieren  $k_{\text{F},\downarrow}$ . Die Polarisation ist durch (3.2) gegeben,  $P = 0.5$  entspricht damit unseren Parametern für Eisen.

In Abbildung 3.4 a) wird das Verhältnis  $TMR^*$ <sup>1</sup> für die drei betrachteten Modelle in Abhängigkeit von der Spinpolarisation der Zuleitungen dargestellt. Dabei fällt auf, dass für dickere Barrieren die numerische Lösung von (3.8) zunehmend besser mit dem von Bratkovsky berechneten Ausdruck übereinstimmt. In diesem Fall gelten die Näherungen des Bratkovsky-Modells — Vernachlässigung von  $1/d^2$ -Termen, Vernachlässigung von schrägem Einfall auf die Barriere — immer besser. Im Gegensatz zu McLaren [73], der das Juilliére-Modell mit dem Slonczewski-Modell verglichen hat, finden wir dagegen nur eine relativ kleine Abweichung des Bratkovsky-Modells vom Juilliére-Modell. Da die effektive Masse der Barriere  $m_b = m_{\text{GaAs}}$  gegenüber der Elektronenmasse  $m_e$  sehr klein ist, unterscheidet sich die effektive Spinpolarisation nach Bratkovsky  $P_{\text{eff}}$  nur wenig von der freien Spinpolarisation  $P$ .

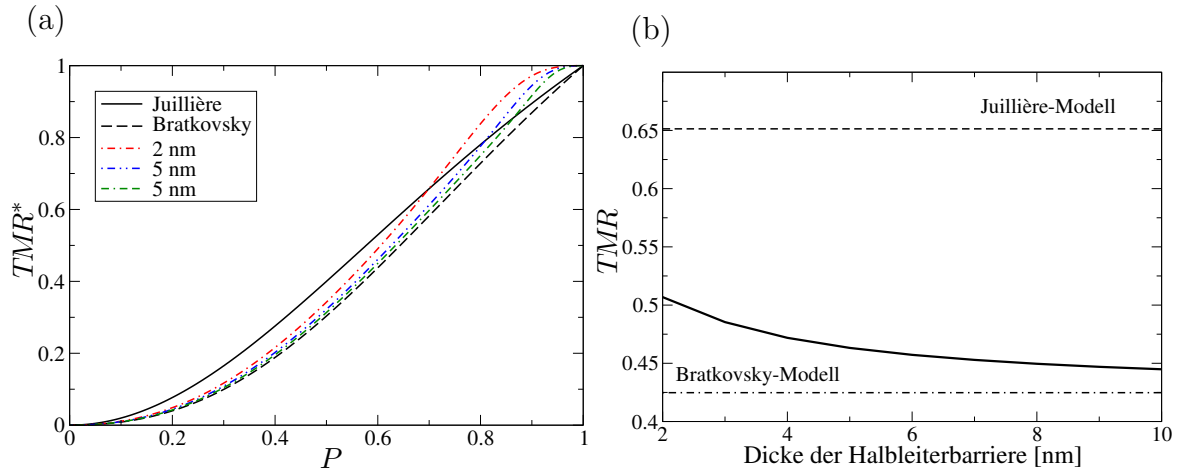
Die Dickenabhängigkeit der exakten numerischen Integration ist in Abbildung 3.4 b) gezeigt. Dabei finden wir einen größeren TMR-Effekt für kleine Dicken  $d$  der Barriere. Dieser nähert sich mit wachsender Dicke an das Bratkovsky-Modell an. Das Juilliére-Modell überschätzt dabei den TMR-Effekt im Vergleich zum Bratkovsky-Modell um 40-50%, liefert aber zumindest die gleiche Größenordnung.

In diesem Abschnitt wurde damit gezeigt, dass das Juilliére-Modell für ein Fe/GaAs/Fe-Tunnelement ähnliche Ergebnisse liefert wie ein Modell, das den TMR-Effekt im Rahmen eines freien Elektronengases mit unterschiedlicher effektiver Masse berechnet.

Weder das Juilliére-Modell noch das Bratkovsky-Modell noch eine numerische Be-

---

<sup>1</sup>Wir verwenden an dieser Stelle die Definition (3.4) anstatt (3.3), da sich diese für eine Auftragung in Abhängigkeit von der Spinpolarisation besser eignet ((3.3) divergiert für  $P \rightarrow 1$ ). Ansonsten wird jedoch durchgängig die auch zur Interpretation der Experimente in [23] verwendete Definition (3.3) benutzt.



**Abb. 3.4:** TMR-Effekt für ein Fe/GaAs/Fe-Tunnelsystem. (a) zeigt einen Vergleich zwischen verschiedenen Modellen zur Berechnung des TMR-Effekts in Abhängigkeit von der Polarisierung der Ferromagneten: Juillièrè-Modell (durchgezogene Linie), Bratkovsky-Modell (gestrichelte Linie) und numerische Berechnung von Gleichung (3.8) für verschiedene Barrierendicken (gepunktet-gestrichelte Linien). (b) zeigt die Dickenabhängigkeit des TMR-Effekts der numerischen Berechnung von (3.8) (durchgezogene Linie).

rechnung des TMR-Effekts an einer geordneten Barriere können jedoch den um eine Größenordnung kleineren TMR-Effekt von 0.21-1.7%, der im Experiment beobachtet wurde [26, 27], erklären. Es gibt experimentelle Hinweise darauf, dass Unordnung an den Grenzflächen der Barriere, wie z. B. Interdiffusion von Fe-Atomen, eine Reduktion des TMR-Effekts bewirkt [27]. Ebenfalls wurde Spin-Flip-Streuung als mögliche Ursache einer Verringerung des TMR-Effekts genannt [26].

Wir werden daher im nächsten Kapitel das Bratkovsky-Modell erweitern, um Unordnung und Spin-Flips in das System aufzunehmen. Zunächst betrachten wir jedoch eine geordnete Tunnelbarriere unter dem Einfluss eines externen Magnetfelds. Dazu verwenden wir die in Abschnitt 2.4 vorgestellte numerische Methode.

### 3.4 Bemerkungen zur Numerik

Zur numerischen Berechnung des Leitwerts der Tunnelbarriere wird auf die in Abschnitt 2.4.1 vorgestellte Diskretisierung des Hamiltonians zurückgegriffen. Die Wahl der Gitterkonstante  $a$  wird dabei von mehreren Abwägungen beeinflusst: Zum einen muss die

Gitterkonstante klein genug gewählt werden, um Übereinstimmung mit dem Kontinuumslimit zu gewährleisten. Da numerisch nur endliche Systeme behandelt werden können, darf das System zum anderen in transversaler Richtung nicht zu viele Gitterpunkte enthalten, um die Rechenzeit klein zu halten. Wählt man daher die Gitterkonstante zu klein, so kann es zu Verfälschungen des Ergebnisses aufgrund der geringen Breite des Systems kommen.

Wir haben gefunden, dass eine Wahl von  $a = 1 \text{ \AA}$  einen guten Kompromiss darstellt. Die Fermi-Wellenlänge im Ferromagneten ist für die Majoritätsladungsträger  $\lambda_{F,\uparrow} = \frac{2\pi}{k_{F,\uparrow}} = 7.3 \text{ \AA}$ , für die Minoritätsladungsträger  $\lambda_{F,\downarrow} = 21.7 \text{ \AA}$ , also jeweils deutlich größer als die Gitterkonstante  $a$ . Wie jedoch bereits in Abschnitt 2.6.1 erwähnt, können bereits kleine Abweichungen von der Kontinuumsbeschreibung exponentiell in die berechnete Transmission eingehen und zu signifikanten Fehlern führen.

In den nachfolgenden Rechnungen betrachten wir zunächst ein zweidimensionales System einer festen Breite (*Streifen*), das in transversaler Richtung von einem Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden (*harte Wände*) begrenzt ist. Für eine Breite von 15 nm, eine Tunnelbarriere von 5 nm Dicke und den in Tabelle 3.1 angegebenen Parametern für Fe und GaAs ergibt eine exakte Lösung der Kontinuumsbeschreibung ein TMR-Verhältnis von 45.6%, während die numerische Simulation für  $a = 1 \text{ \AA}$  einen Wert von 50.4% berechnet. Das Ergebnis der Numerik überschätzt also das Ergebnis des Kontinuumslimites um ca. 10%. Da von einer einfachen, phänomenologischen Beschreibung sowieso nur *qualitative* Aussagen erwartet werden, ist die Übereinstimmung der Numerik mit dem Kontinuumslimit zufrieden stellend.

$\tilde{E}_{\uparrow}$	$\tilde{E}_{\downarrow}$	$\tilde{m}_{\text{Fe}}$	$\tilde{V}_0 - \tilde{E}_{\text{F}}$	$\tilde{m}_{\text{GaAs}}$
0.74	0.0846	1.0	0.2	0.067

**Tabelle 3.2:** Dimensionslose Größen, die in der Simulation verwendet werden.

In Tabelle 3.2 sind die Werte der in Abschnitt 2.4 eingeführten, dimensionslosen Größen angegeben, die sich bei der Wahl der Gitterkonstante  $a = 1 \text{ \AA}$  ergeben. Dabei ist  $\tilde{E}_{\uparrow(\downarrow)} = \frac{2ma^2}{\hbar^2} E_{\uparrow(\downarrow)}$  die Fermi-Energie für Majoritäts-(Minoritäts-) Elektronen und  $\tilde{V}_0 - \tilde{E}_{\text{F}} = \frac{2ma^2}{\hbar^2} (V_0 - E_{\text{F}})$  die Höhe der Barriere. Im Rest dieser Arbeit verwenden wir diese Diskretisierung für die numerischen Rechnungen.

### 3.5 Magnetfeldabhängigkeit des Tunnelwiderstands

Der Tunnelstrom durch eine Barriere in einem Magnetfeld wurde zuerst von Eaves in WKB-Näherung berechnet [28]. Er fand dabei für ein konstantes Magnetfeld in der

Ebene der Tunnelbarriere eine Verringerung des Tunnelstroms:

$$I(B) = I(B = 0) \cdot e^{-\beta B^2} \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{e^2 d^3 \kappa}{6m^* \phi_0}. \quad (3.11)$$

Dabei ist  $d$  die Dicke der Tunnelbarriere,  $\kappa = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E_F)}$  der komplexe Wellenvektor in der Tunnelbarriere,  $m^*$  die effektive Masse der Barriere und  $\phi_0 = (V_0 - E_F)$  die Höhe der Tunnelbarriere. Damit steigt der Tunnelwiderstand mit wachsendem Magnetfeld  $B$  an. Für  $\beta B^2 \ll 1$  ist dieser Anstieg  $\propto B^2$ .

Im Experiment an Fe/GaAs/Fe-Tunnelementen wird bei Parallelstellung der Magnetisierungen ein komplexes Verhalten des Tunnelwiderstands unter Einfluss eines Magnetfeldes gefunden: Man findet ein quadratisches Anwachsen des Widerstands mit steigendem Magnetfeld, dem ein linearer Abfall überlagert scheint [23, 27]. Bei kleinen Magnetfeldern dominiert dabei der lineare, bei größeren Feldern der quadratische Anteil.

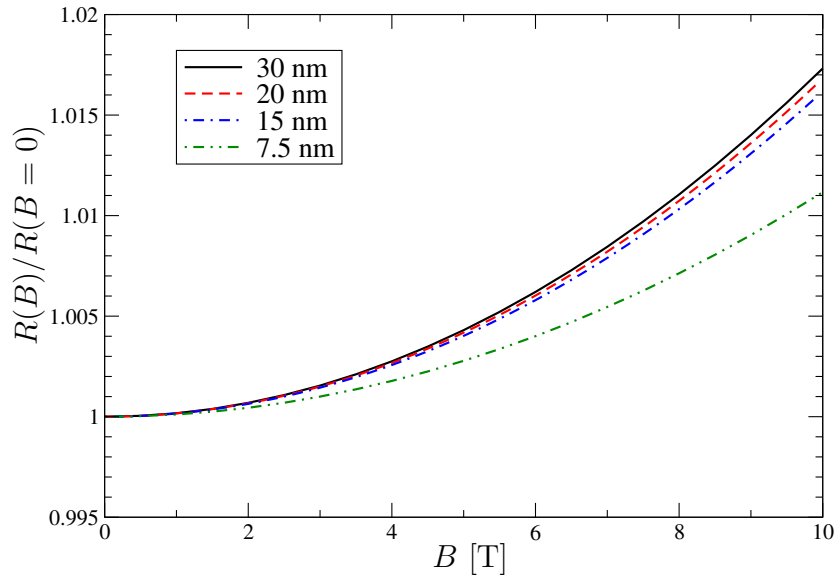
In diesem Abschnitt untersuchen wir den Einfluss eines Magnetfelds auf den Tunnelwiderstand in einem Fe/GaAs/Fe-Tunnelement jenseits der WKB-Näherung. Dazu betrachten wir einen zweidimensionalen Streifen mit harten Wänden<sup>2</sup> und ein Magnetfeld senkrecht zu dieser Ebene.

In Abbildung 3.5 zeigen wir das relative Anwachsen des Tunnelwiderstands  $R(B)$  mit größer werdendem Magnetfeld  $B$ . Wir erhalten dabei für verschiedene Ausdehnungen des Systems unterschiedliche Ergebnisse, die jedoch mit wachsender Breite auf einen Wert zu konvergieren scheinen. Die Ergebnisse hängen dabei nicht davon ab, ob das Magnetfeld abrupt in der Barriere beginnt und endet, wie von Eaves angenommen, oder ob es in den Zuleitungen adiabatisch ein- und ausgeschaltet wird.

Wie Eaves finden wir ein quadratisches Anwachsen des Tunnelwiderstands. Dieser Anstieg fällt jedoch etwas schwächer aus, als von Eaves vorhergesagt: Für  $m^* = 0.067 m_e$ ,  $\phi_0 = 0.75 \text{ eV}$  und  $d = 10 \text{ nm}$  ergibt Gleichung (3.11) ein Anwachsen des Tunnelwiderstands von 6.9%, während die numerische Simulation lediglich einen Anstieg von ca. 1.7% findet. Diese Diskrepanz kann mehrere Ursachen haben: Im Gegensatz zu Eaves gehen wir jenseits der WKB-Näherung und betrachten eine ortsabhängige effektive Masse. *Qualitativ* stimmen die Ergebnisse jedoch überein und der numerisch berechnete Wert liegt auch näher am experimentell gefundenen Anteil [27], der vom Ausdruck (3.11) überschätzt wird.

---

<sup>2</sup>Die Verwendung periodischer Randbedingungen ist bei Rechnungen mit Magnetfeldern *nicht* möglich. Anschaulich betrachtet führen periodische Randbedingungen zu einem „Aufrollen“ eines zweidimensionalen Streifens zu einem Zylinder. Aufgrund dieser Topologie erscheint ein konstantes Magnetfeld *senkrecht* zum Streifen dann als *radiales* Feld.



**Abb. 3.5:** Tunnelwiderstand in Abhängigkeit von einem externen Magnetfeld für verschiedene Breiten des Systems. Der Widerstand  $R(B)$  ist dabei auf den Widerstand ohne Magnetfeld  $R(B = 0)$  normiert.

Wir erhalten also durch Berücksichtigung eines äußeren Magnetfelds einen quadratischen Anstieg des Tunnelwiderstands mit wachsendem  $B$ -Feld, in qualitativer Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Eaves. Das auf einer ortsabhängigen effektiven Masse beruhende Modell kann also gewisse, im Experiment beobachtete Erscheinungen korrekt reproduzieren. Zur Beschreibung des linearen Anteils in der Magnetfeldabhängigkeit des Tunnelwiderstands muss das vorliegende Modell jedoch erweitert werden, eine Aufgabe, die jenseits der Ziele dieser Arbeit liegt.



# Kapitel 4

## Auswirkung von Unordnung auf den TMR-Effekt

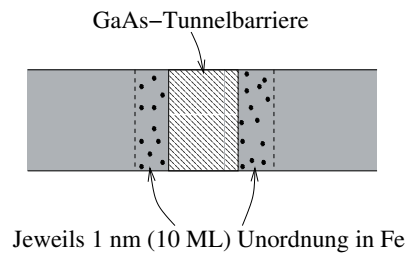
Im vorherigen Kapitel wurde gezeigt, dass einfache Modelle wie das Bratkovsky-Modell nicht den im Experiment an einem Fe/GaAs/Fe-Tunnelement beobachteten TMR-Effekt beschreiben können. Sie überschätzen das TMR-Verhältnis um eine Größenordnung.

Es gibt experimentelle Hinweise, dass Unordnung an der Grenzfläche eine Reduktion des TMR-Effekts bewirken kann [27], ebenso wurde auf den möglichen Einfluss von Spin-Flip-Streuung verwiesen [26]. Wir wollen daher in diesem Kapitel das Bratkovsky-Modell um Unordnung erweitern. Dazu verwenden wir die in Abschnitt 2.2 vorgestellte Beschreibung von Spin erhaltender und Spin-Flip-Streuung. Die im Experiment verwendete Tunnelbarriere besteht aus einkristallinem GaAs [23]. Es ist daher zu erwarten, dass Störstellen hauptsächlich an den Grenzflächen der Barriere zu finden sind, z. B. durch die Interdiffusion von Fe-Atomen. Wir untersuchen daher in diesem Abschnitt den Einfluss von Unordnung nahe an den Grenzflächen der Barriere.

Zunächst wird der Einfluss von Störstellen in einem kleinen Bereich auf beiden Seiten der Barriere untersucht. Dabei zeigen wir die Auswirkungen auf die Transmission und das TMR-Verhältnis. Außerdem wird das Verhalten ohne und mit Spin-Flip-Streuung gesondert untersucht. Anschließend gehen wir auf moderate Unordnung in einem ausgedehnten Bereich in den Zuleitungen (diffusiver Transport) und auf das unterschiedliche Verhalten des TMR- und des GMR-Effekts mit wachsender Unordnung ein. Danach werden die Auswirkungen auf das Tunnelmagnetowiderstandsverhältnis von Unordnung in der Tunnelbarriere selbst untersucht. Schließlich untersuchen wir den Einfluss von Randbedingungen und räumlicher Dimensionalität auf unsere Ergebnisse.

## 4.1 Unordnung nahe der Grenzflächen

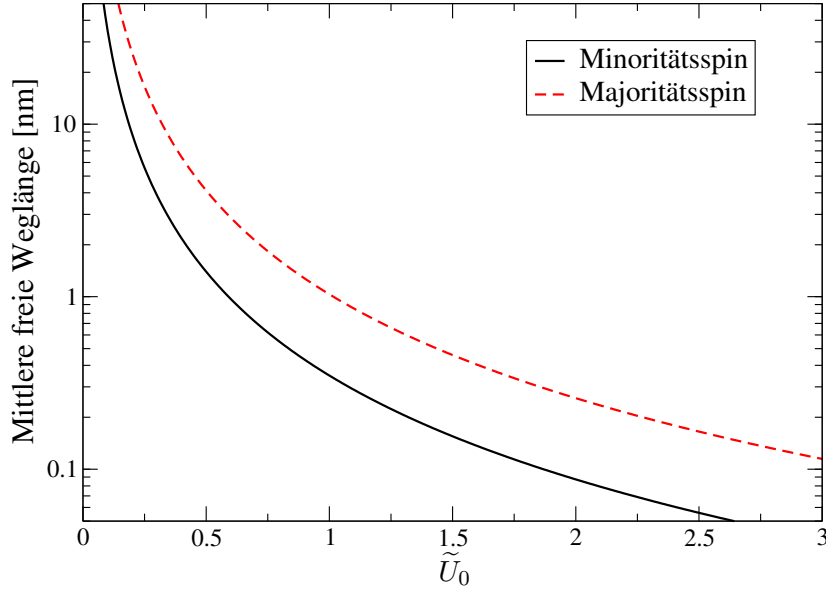
Wir betrachten zunächst Unordnung in einem kleinen Bereich von 1 nm vor und hinter der Tunnelbarriere ein (vgl. Abbildung 4.1), entsprechend 10 Gitterlagen in der Tight-Binding-Beschreibung. Zur Berechnung des Leitwerts verwenden wir einen zwei-dimensionalen Streifen mit harten Wänden. Sofern nicht anders angegeben, beträgt die Breite des Streifens 149 Gitterpunkte (entsprechend 15 nm).



**Abb. 4.1:** Unordnung kurz vor und nach der Barriere.

Dabei unterscheiden wir zwischen Störstellen ohne Spin-Flips ( $\tilde{U}_0 \neq 0$ ,  $\tilde{\varepsilon}_0 = 0$ , *Anderson-Unordnung*) und mit Spin-Flips ( $\tilde{U}_0 = 0$ ,  $\tilde{\varepsilon}_0 \neq 0$ , *Spin-Flip-Unordnung*). Der Vorteil, die Störstellen *vor* bzw. *nach* der Barriere zu setzen, liegt darin, dass nun die mittlere freie Weglänge der Elektronen in der ungeordneten Region berechnet werden kann. Es sei nochmals betont, dass die Unordnungsenergien  $\tilde{U}_0$  bzw.  $\tilde{\varepsilon}_0$  selbst keinerlei physikalische Bedeutung besitzen, lediglich die abgeleiteten Weglängen. Die mittleren freien Weglängen geben somit ein anschauliches Maß für die Stärke der Unordnung. In Abbildung 4.2 wird die mittlere freie Weglänge für Majoritäts- und Minoritätselektronen in Fe gezeigt. Zur Berechnung wurde das Ergebnis von Fermis goldener Regel verwendet (vgl. Abschnitt 2.2). Da dieses Ergebnis nur im Grenzfall schwacher Streuung ( $\lambda_F \ll \lambda$ ) gültig ist, können die Werte für die mittlere freie Weglänge bei starker Unordnung nur als grobe Näherung angesehen werden. Dennoch sind sie zur Abschätzung der Unordnungsstärke geeignet.

Im Folgenden wird zunächst die Auswirkung von Unordnung auf die Transmission durch die Tunnelbarriere sowohl bei Parallelstellung (P) als auch bei Antiparallelstellung (AP) der Magnetisierungen betrachtet. Danach zeigen wir die Folgen für den TMR-Effekt und untersuchen die Unterschiede zwischen Anderson- und Spin-Flip-Unordnung genauer.



**Abb. 4.2:** Mittlere freie Weglängen für Majoritäts- und Minoritätselektronen in Fe in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke  $\tilde{U}_0$ .

### 4.1.1 Auswirkungen auf die Transmission

Zur Charakterisierung der Transmission durch die Tunnelbarriere unter dem Einfluss von Unordnung ist es nützlich, die gesamte Transmission  $T_{\text{tot}} = \sum_{s,s'} \sum_{n,n'} T_{n,n'}^{s,s'}$  durch die Barriere in einzelne Komponenten aufzuteilen. Wir können die Transmission *ohne Spin-Flip* als  $T_{\text{se}} = \sum_s \sum_{n,n'} T_{n,n'}^{s,s}$  und die Transmission *mit Spin-Flip* als  $T_{\text{sf}} = \sum_s \sum_{n,n'} T_{n,n'}^{s,-s}$  definieren. Ebenso ist es sinnvoll, die Transmission in einen Anteil aufzuteilen, der *ungestreut* durch die Barriere geht, und in einen Anteil, der vor oder nach der Barriere an einer Störstelle *gestreut* wird. Da beim Tunnelvorgang ohne Streuung der transversale Anteil des Wellenvektors erhalten bleibt, können wir näherungsweise<sup>1</sup>  $T_{\text{ungestreut}} = \sum_{s,s'} \sum_n T_{n,n}^{s,s'}$  und  $T_{\text{gestreut}} = \sum_{s,s'} \sum_{n,n' \neq n} T_{n,n'}^{s,s'}$  annehmen.

Da die Transmission und, wie später noch gezeigt wird, auch der TMR-Effekt stark von der einzelnen Konfiguration des Unordnungspotentials abhängen kann, muss zur Berechnung des Leitwerts über viele Unordnungsconfigurationen gemittelt werden. Der

<sup>1</sup>Wir vernachlässigen dabei die Möglichkeit, dass ein Elektron nach einem oder mehreren Streuvorgängen wieder in einen Kanal mit dem ursprünglichen transversalen Wellenvektor gelangt.

Mittelwert der Transmission ist dann gegeben durch

$$\langle T \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N T_i ,$$

wobei  $T_i$  die Transmissionswahrscheinlichkeit bei einer bestimmten Realisierung  $i$  des Störstellenpotentials und  $N$  die Zahl der verschiedenen Konfigurationen ist. Der Fehler des Mittelwerts ist durch

$$\Delta T = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sqrt{\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2}$$

gegeben [74]. Den Mittelwert des Leitwerts berechnet man dann mit  $\langle G \rangle = \frac{e^2}{h} \langle T_{\text{tot}} \rangle$ .

In Abbildung 4.3 zeigen wir die Transmission durch die Barriere sowohl für Anderson- als auch Spin-Flip-Unordnung. Dabei fällt auf, dass sowohl bei Parallel- als auch Antiparallelstellung der Magnetisierungen zunächst ein leichtes Absinken der Transmissionswahrscheinlichkeit beobachtet wird. Durch die Störstellen kommt es zu einer erhöhten Rückstreuung, die den leichten Rückgang erklärt. Ab  $\tilde{U}_0/\tilde{\varepsilon}_0 \approx 0.3$  sehen wir jedoch einen nahezu monotonen Anstieg der Transmission mit zunehmender Unordnungsstärke. Dabei überwiegt sowohl bei Anderson- als auch Spin-Flip-Unordnung ab  $\tilde{U}_0/\tilde{\varepsilon}_0 \approx 0.5$  der gestreute Anteil der Transmission, d. h. die Mehrzahl der Elektronen erleidet während der Transmission einen Streuvorgang.

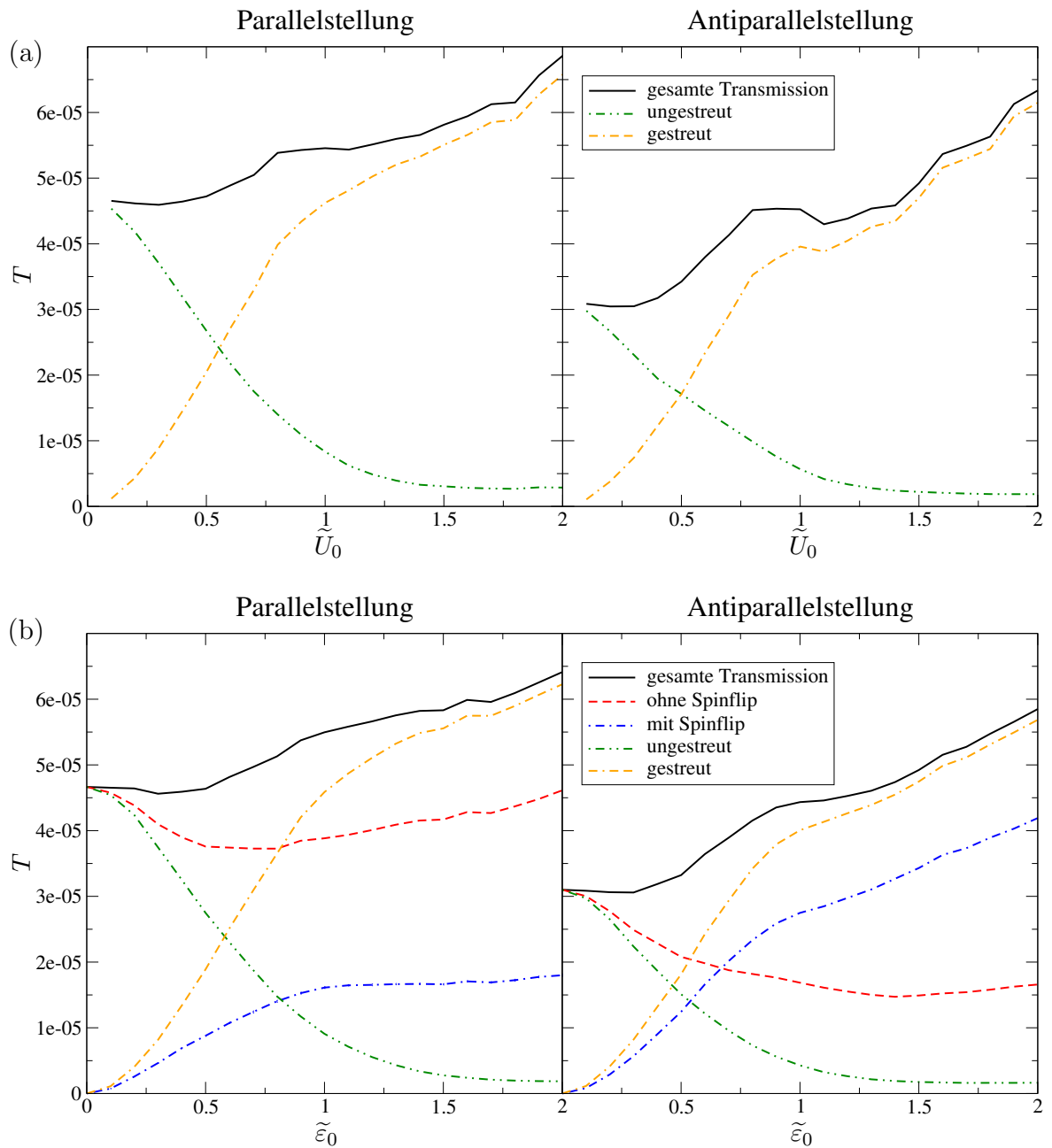
Der Anstieg der Transmission mit zunehmender Unordnung kann mit der Aufhebung der  $k_{\parallel}$ -Erhaltung erklärt werden.

Im Fall einer idealen Barriere ist aufgrund der transversalen Translationssymmetrie (*Bloch*-Theorem [53]) der transversale Anteil des Wellenvektors  $k_{\parallel}$  während des Tunnelvorgangs erhalten<sup>2</sup>. Ebenso ist der Spin eine erhaltene Größe. Dies bedeutet jedoch, dass bei Antiparallelstellung der Magnetisierungen nur die Transportkanäle der Majoritätsladungsträger durch die Barriere tunneln können, für die in der zweiten Zuleitung ein Kanal in den Minoritätselektronen mit demselben transversalen Wellenvektor  $k_{\parallel}$  existiert, d. h. mehrere Majoritätskanäle können wegen Symmetriegründen nicht zum Transport beitragen (siehe Abbildung 4.5 (c)).

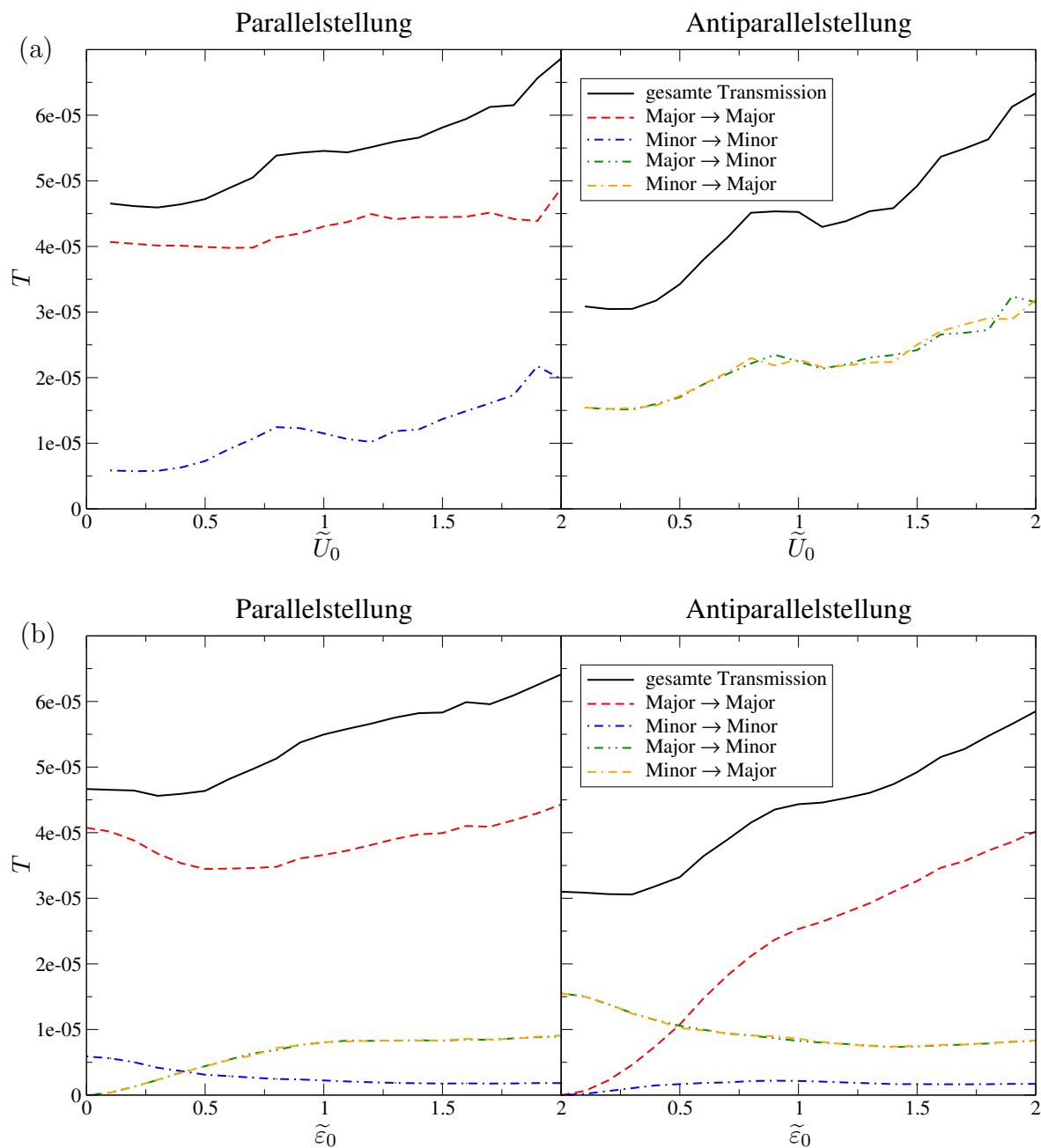
Durch Unordnung wird die  $k_{\parallel}$ -Erhaltung aufgehoben und die Transportkanäle können nun mischen. Damit stehen mehr Möglichkeiten für die Transmission zur Verfügung und die Transmissionswahrscheinlichkeit steigt sowohl für Parallel- als auch Antiparallelstellung an. Der Anstieg ist dabei stärker für Antiparallelstellung der Magnetisierungen, da nun *alle* Kanäle zum Transport beitragen können (siehe Abbildungen 4.5

---

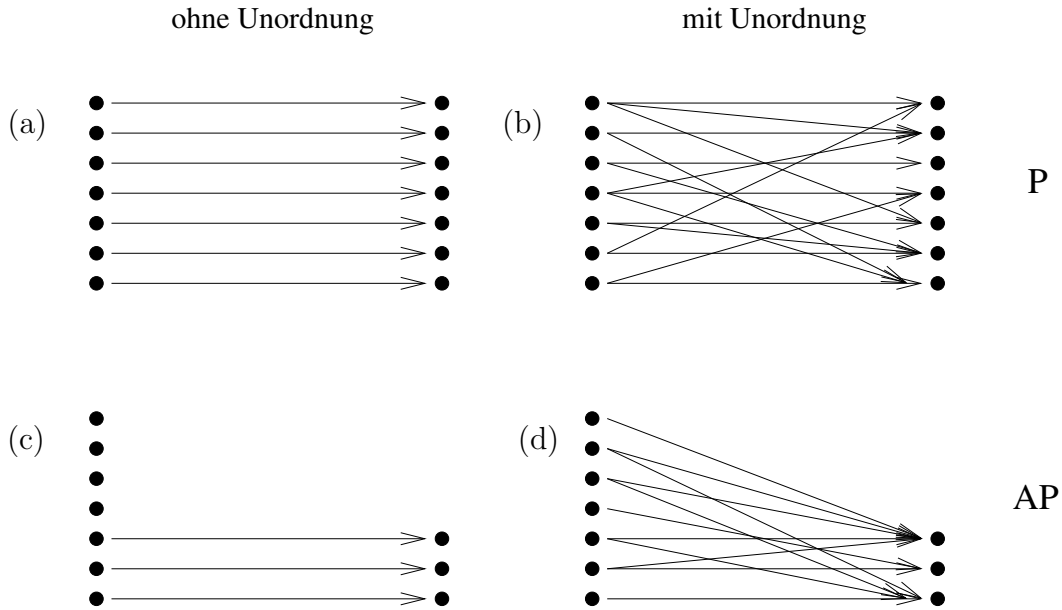
<sup>2</sup>Da ein Streifen mit harten Wänden betrachtet wird, ist hier die Quantenzahl des transversalen Potentialtopfs  $n$  während des Tunnelvorgangs erhalten. Man kann dann  $k_{\parallel} = \frac{n\pi}{W}$  als erhaltene Größe definieren, wobei  $W$  die Breite des Streifens ist.



**Abb. 4.3:** Transmission durch eine Fe/GaAs/Fe Tunnelbarriere (5 nm Dicke) in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke  $\tilde{U}_0/\tilde{\epsilon}_0$ . (a) Anderson-Unordnung, (b) Spin-Flip-Unordnung. Die Transmission wurde dabei über 500–3000 Unordnungs konfigurierungen gemittelt, die Fehler liegen jeweils unter 2%. Daher wurde auf die Abbildung von Fehlerbalken verzichtet



**Abb. 4.4:** Transmission aus Abbildung 4.3 aufgeschlüsselt nach Transmission von Minoritäts- (*Minor*) und Majoritätselektronen (*Major*). (a) Anderson-Unordnung, (b) Spin-Flip-Unordnung. Dabei wird jeweils die Transmission aus Spinzuständen der linken Zuleitung in die entsprechenden Zustände der rechten Zuleitung gezeigt. Die relativen Fehler der Transmission liegen unter 2%, daher wurde wieder auf Abbildung der Fehlerbalken verzichtet.



**Abb. 4.5:** Auswirkung von Unordnung auf den Leitwert. Ohne Unordnung ist  $k_{\parallel}$  beim Tunnelprozess erhalten: (a) bei Parallelstellung, (c) Antiparallelstellung der Magnetisierungen. Mit Unordnung kommt es zu einer Mischung der Transportkanäle, der Effekt ist dabei bei (d) Antiparallelstellung größer als bei (b) Parallelstellung.

(b) und (d)).

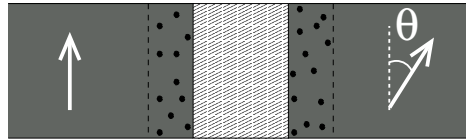
Dies führt auch zu einer Reduzierung des TMR-Verhältnisses.

Das Modell zur Spin-Flip-Unordnung wurde durch eine Erweiterung des Anderson-Modells um die Möglichkeit eines Spin-Flips beim Streuvorgang gewonnen. Beide Modelle zeigen daher ein ähnliches Verhalten im gestreuten und ungestreuten Anteil der Transmission. Tatsächlich ist die *gesamte* Streurrate für Spin-Flip- und Anderson-Unordnung gleich, wenn  $\tilde{U}_0 = \tilde{\varepsilon}_0$ , wie ein Vergleich der spinabhängigen Streuraten in Anhang A.2 zeigt. Bei Spin-Flip-Unordnung im System ergibt sich jedoch im Vergleich zu Anderson-Unordnung durch die Möglichkeit von Spin-Flip-Prozessen ein qualitativ anderes Verhalten beim Tunnelvorgang. Bei paralleler Magnetisierung steigt die Transmission mit Spin-Flip kontinuierlich an, bis sie ab  $\tilde{\varepsilon}_0 \approx 0.8$  schließlich sättigt. Bei Antiparallelstellung dominiert jedoch ab  $\tilde{\varepsilon}_0 \approx 0.8$  der Spin-Flip-Anteil, denn in diesem Fall stehen durch den Spin-Flip mehr Zustände in der rechten Zuleitung zur Verfügung.

Aus Abbildung 4.4 ist ersichtlich, dass bei Parallelstellung der Magnetisierungen sowohl für Anderson- als auch Spin-Flip-Unordnung der Transport von Majoritätselektronen dominiert wird. Diese besitzen einen größeren Fermi-Vektor und eine größere Anzahl

von Zuständen an der Fermi-Kante. Sie können damit effektiver durch die Barriere tunneln. Im antiparallelen Fall zeigt sich jedoch ein völlig anderes Bild. Für Anderson-Unordnung wird der Transport zu gleichen Teilen durch die Transmission von Majoritäts- nach Minoritätsladungsträgern und umgekehrt getragen. Der Spin des Elektrons bleibt dabei erhalten.

Im Gegensatz dazu wird der Strom bei Antiparallelstellung der Magnetisierungen mit zunehmender Stärke der Spin-Flip-Unordnung hauptsächlich durch Spin-Flip-Transport von den Majoritätselektronen der linken Zuleitung in die Majoritätsspins der rechten Zuleitung getragen. Wir finden daher im antiparallelen Fall völlig verschiedene Transportcharakteristiken für Anderson- und Spin-Flip-Unordnung.



**Abb. 4.6:** Nicht-kollineare Magnetisierung: Verdrehung um einen Winkel  $\theta$ .

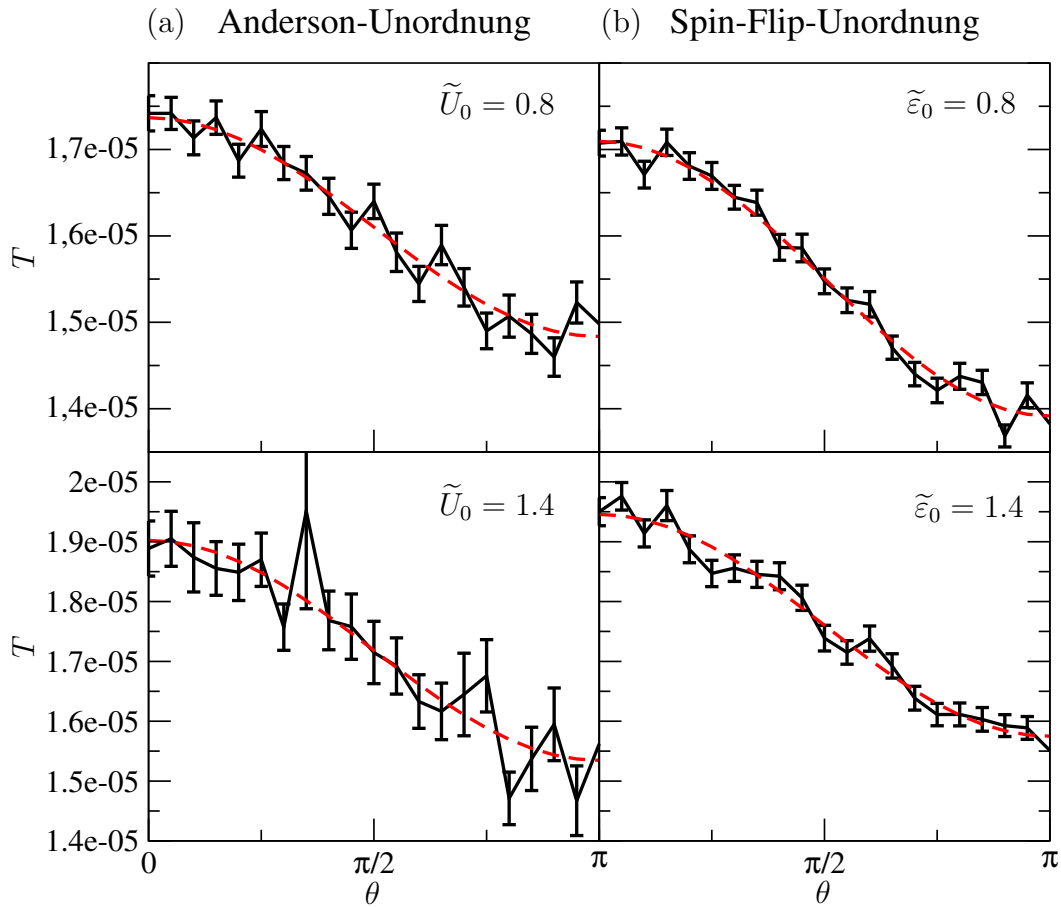
Der Grenzfall paralleler und antiparalleler Magnetisierungen definiert das TMR-Verhältnis. Es ist jedoch auch von Interesse, nicht kollineare Magnetisierungen zuzulassen. Wir betrachten dazu die Transmission durch das Tunnелеlement, wenn die Magnetisierungen einen Winkel  $\theta$  einschließen. Für eine ideale Barriere kann dann im Bratkovsky-Modell der Leitwert zu

$$G = G_0 (1 + P_{\text{eff}}^2 \cos(\theta)) \quad (4.1)$$

berechnet werden. Dabei ist  $P_{\text{eff}}$  die effektive Spinpolarisation (3.10) des Ferromagneten im Bratkovsky-Modell.

Die Winkelabhängigkeit der Transmission im Fall von Unordnung an der Grenzfläche ist in Abbildung 4.7 gezeigt. Dabei findet man, dass sowohl für Anderson- als auch Spin-Flip-Unordnung das Verhalten der Transmissionswahrscheinlichkeit  $T$  durch ein Gesetz der Form von Gleichung (4.1) beschrieben werden kann. Durch einen Fit von (4.1) an die berechnete Transmission kann eine effektive Spinpolarisation des ungeordneten Systems bestimmt werden. Dabei ergibt sich beispielsweise  $P \approx 0.28$  für Anderson-Unordnung mit  $\tilde{U}_0 = 0.8$  und  $P \approx 0.32$  für Spin-Flip-Unordnung mit  $\tilde{\varepsilon}_0 = 0.8$ . Der Effekt der Unordnung besteht also hauptsächlich in einer Reduzierung der effektiven Spinpolarisation. Tatsächlich wird auch im Experiment ein kosinusförmiges Verhalten des Leitwerts gefunden [75].

Wir erwarten daher eine Reduktion des TMR-Verhältnisses durch die Unordnung. Im nächsten Abschnitt wird dies näher betrachtet.



**Abb. 4.7:** Transmission durch Tunnelbarriere (Dicke 5 nm) in Abhängigkeit vom Winkel  $\theta$  zwischen den Magnetisierungsrichtungen. (a) Anderson-Unordnung, (b) Spin-Flip-Unordnung. Das numerische Resultat ist mit einer durchgezogenen Linie eingezeichnet, die Fitfunktion mit einer gestrichelten Linie. Die Breite des Streifens betrug 99 Gitterpunkte. Die Mittelung erfolgte über 1000 (Anderson-Unordnung) bzw. 500 (Spin-Flip-Unordnung) Gitterpunkte.

### 4.1.2 Auswirkungen auf den TMR-Effekt

Das TMR-Verhältnis wird mit

$$TMR = \frac{\langle G_P \rangle - \langle G_{AP} \rangle}{\langle G_{AP} \rangle} = \frac{\langle T_P \rangle - \langle T_{AP} \rangle}{\langle T_{AP} \rangle}$$

berechnet. Dabei ist die Reihenfolge der Mittelung wichtig: Berechnet man das TMR-Verhältnis jeder einzelnen Konfiguration und bildet daraus den Mittelwert, so entspricht dies der Messung des TMR-Effektes an vielen kleinen Systemen (vgl. z. B. [76]).

Indem zuerst über die Transmission gemittelt wird, entspricht dies der Beschreibung eines effektiv größeren Systems (siehe auch [33]). Den Fehler des TMR-Verhältnisses berechnen wir mittels der Bootstrap-Methode [74].

In Abbildung 4.8 wird das TMR-Verhältnis in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke gezeigt.

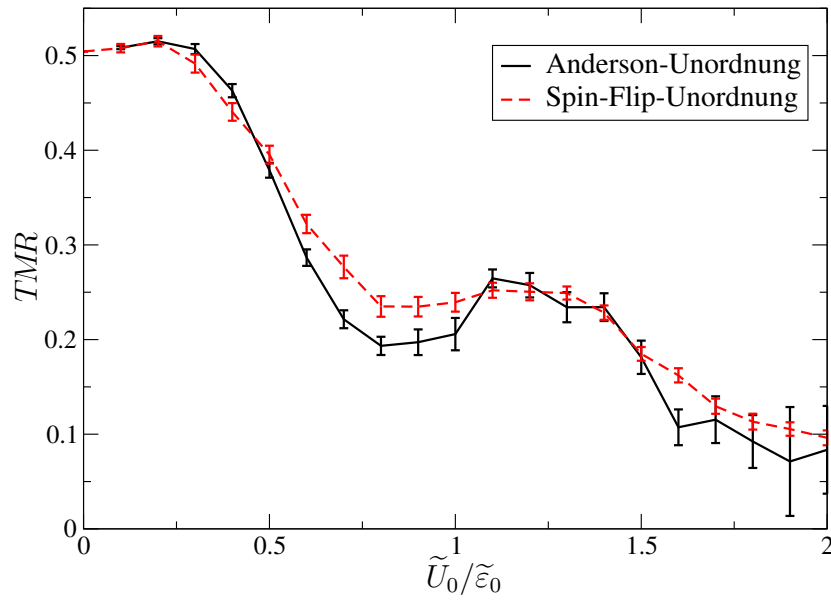
Wir finden dabei für Anderson- und Spin-Flip-Unordnung gleichermaßen eine Abschwächung des TMR-Effektes. Dieser fällt zunächst monoton ab, bis er bei  $\tilde{U}_0/\tilde{\varepsilon}_0 \approx 0.8$  ein Minimum (Anderson-) bzw. ein Plateau (Spin-Flip-Unordnung) erreicht. Danach wird er mit steigender Unordnungsstärke weiter reduziert. Bei  $\tilde{U}_0/\tilde{\varepsilon}_0 \approx 0.8$  beträgt die Verringerung des TMR-Verhältnisses dabei ca. 50%, bei  $\tilde{U}_0/\tilde{\varepsilon}_0 \approx 2.0$  sogar rund 80%. Überraschend ist aber die Tatsache, dass die Reduktion des TMR-Verhältnisses sowohl für Spin-Flip-Unordnung als auch Anderson-Unordnung beinahe *identisch* ist. Beide Modelle führen zwar zu ähnlichen gestreuten und ungestreuten Anteilen an der Transmission, die zusätzliche Möglichkeit eines Spin-Flips führt aber zu einer völlig anderen Transmissionscharakteristik, wie im Abschnitt 4.1.1 gezeigt wurde. Tatsächlich würde man naiv erwarten, dass Spin-Flips das TMR-Verhältnis effizienter verringern, da durch einen Spin-Flip die Transmission im antiparallelen Fall wieder einer Parallelstellung der Magnetisierung entspricht. Dieses Ergebnis wird im nächsten Abschnitt genauer untersucht.

Ein Vergleich des TMR-Effektes für verschiedene Tunnelbarrieren zeigt, dass die Reduktion des TMR-Verhältnisses praktisch unabhängig von der Dicke der Barriere ist. Dies ist in Abbildung 4.9 gezeigt.

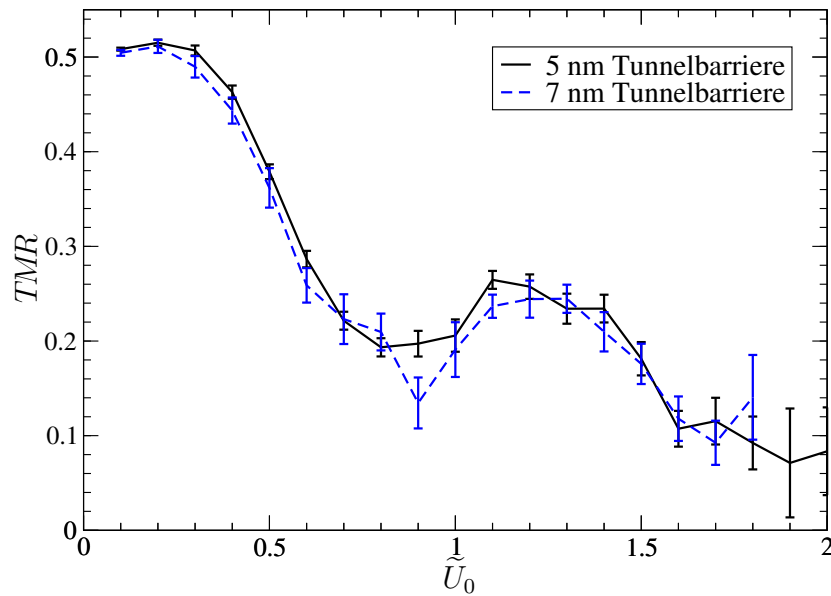
Obwohl zur Bestimmung des TMR-Effektes zuerst über die Leitwerte gemittelt wird, ist es dennoch von Interesse, die TMR-Verhältnisse der einzelnen Störstellenkonfigurationen zu betrachten. In Abbildung 4.10 wird die Verteilung dieser Verhältnisse für verschiedene Unordnungsstärken gezeigt.

Wachsende Unordnung führt dabei zu immer größerer Streuung der einzelnen TMR-Verhältnisse. Diese Streuung ist dabei stärker für Anderson-Unordnung als für Spin-Flip-Unordnung, daher ergeben sich auch größere Fehlerbalken für den TMR-Effekt in Abbildung 4.8. Bei Anderson-Unordnung fehlt der Spin-Flip als Transportmechanismus. Diese Einschränkung gegenüber der Spin-Flip-Unordnung ist ein möglicher Grund dafür, dass verschiedene Störstellenkonfigurationen eine größere Streuung als bei Spin-Flip-Unordnung aufweisen.

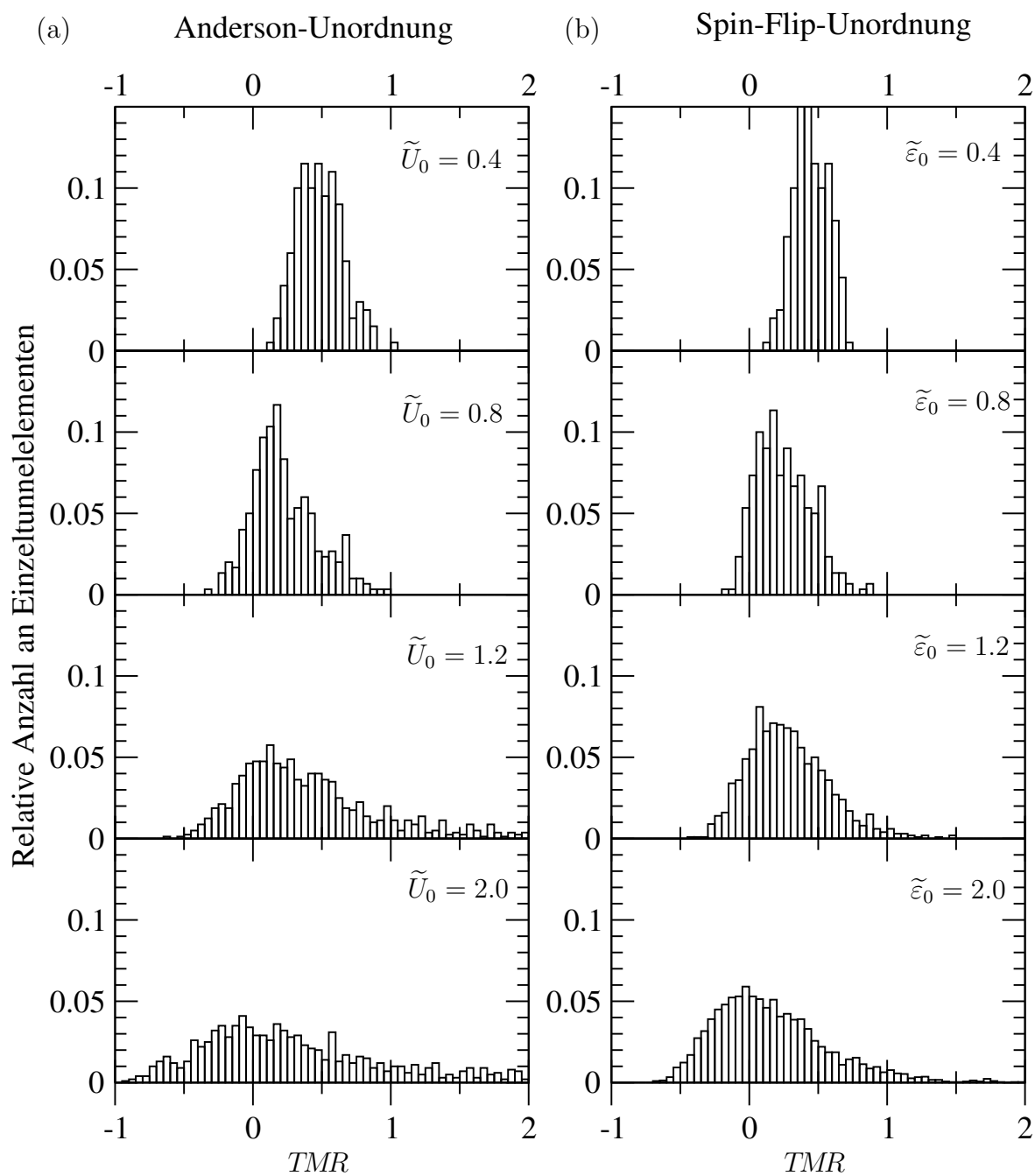
Die statistischen Fluktuationen führen auch für einen gewissen Anteil der Störstellenkonfigurationen zu einem *negativen* TMR-Verhältnis. Diese Inversion des TMR-Effektes wird auch experimentell an Nano-Tunnelementen beobachtet [76]. Dieses Phänomen wurde dort durch statistische Fluktuationen von Unordnung *in* der Tunnelbarriere erklärt. Wir haben damit gezeigt, dass auch Unordnung nahe der Grenzfläche in kleinen Tunnelementen zu einer Inversion des TMR-Verhältnisses führen kann.



**Abb. 4.8:** Abhängigkeit des TMR-Verhältnisses von der Stärke der Unordnung. Die Transmission wurde dabei über 500–3000 Unordnungsconfigurationen gemittelt.



**Abb. 4.9:** Dickenabhängigkeit des TMR-Effekts. Sowohl für eine 5 nm als auch eine 7 nm dicke Barriere finden wir ähnliches Verhalten.



**Abb. 4.10:** Anteil der TMR-Verhältnisse für einzelne Störstellenkonfigurationen für verschiedene Unordnungsstärken bei (a) Anderson-Unordnung und (b) Spin-Flip-Unordnung. Dabei wurden 500–3000 Störstellenkonfigurationen betrachtet.

Vedyayev *et al.* haben in [77] ebenfalls den Einfluss von Streuung an den Grenzflächen einer Tunnelbarriere auf den TMR-Effekt untersucht. Dabei wurden störungstheoretische Methoden im Rahmen eines freien Elektronengases eingesetzt. Das dabei eingesetzte Störstellenmodell hat aber einen nicht-verschwindenden Mittelwert des Störstellenpotentials, so dass die Autoren dort eine Abnahme der Transmission durch die Barriere beobachten. Der nicht-verschwindende Mittelwert modifiziert also die Form der Barriere. Der TMR-Effekt reagiert aber sehr empfindlich auf die Form der Barriere [78]. Außerdem werden in [77] für die beiden Spinrichtungen unterschiedliche Störstellenpotentiale verwendet, daher beobachten die Autoren dort sowohl Zu- als auch Abnahme des TMR-Effekts mit wachsender Unordnung. Im Gegensatz dazu verwenden wir in dieser Arbeit ein spinunabhängiges Unordnungspotential mit verschwindendem Mittelwert. In [77] werden auch Spin-Flips betrachtet: Dabei verwenden die Autoren ein Modell zur Streuung an Magnonen und finden ähnlich wie diese Arbeit eine Zunahme der Transmission und eine Abnahme des TMR-Effekts durch Spin-Flips.

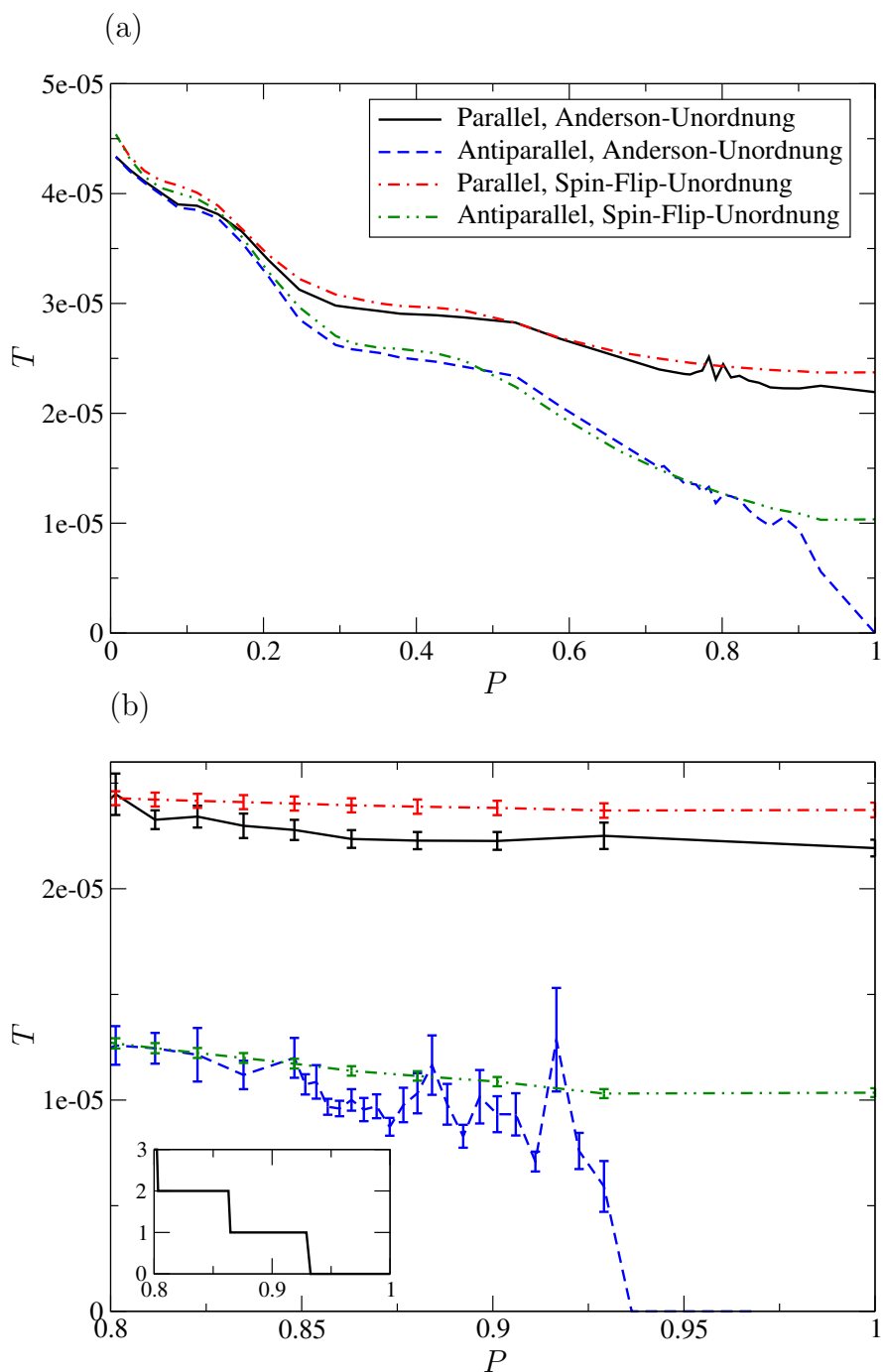
### 4.1.3 Vergleich von Streuung mit und ohne Spin-Flip

In den vorherigen Abschnitten haben wir gesehen, dass die Transmission durch das Fe/GaAs/Fe-Tunnelement für Anderson- und Spin-Flip-Unordnung durch sehr unterschiedliche Mechanismen getragen werden kann, die resultierende Reduktion des TMR-Effekts aber in beiden Fällen beinahe gleich ausfällt. Daher soll in diesem Abschnitt der Unterschied zwischen Spin erhaltender und Spin-Flip-Streuung näher untersucht werden.

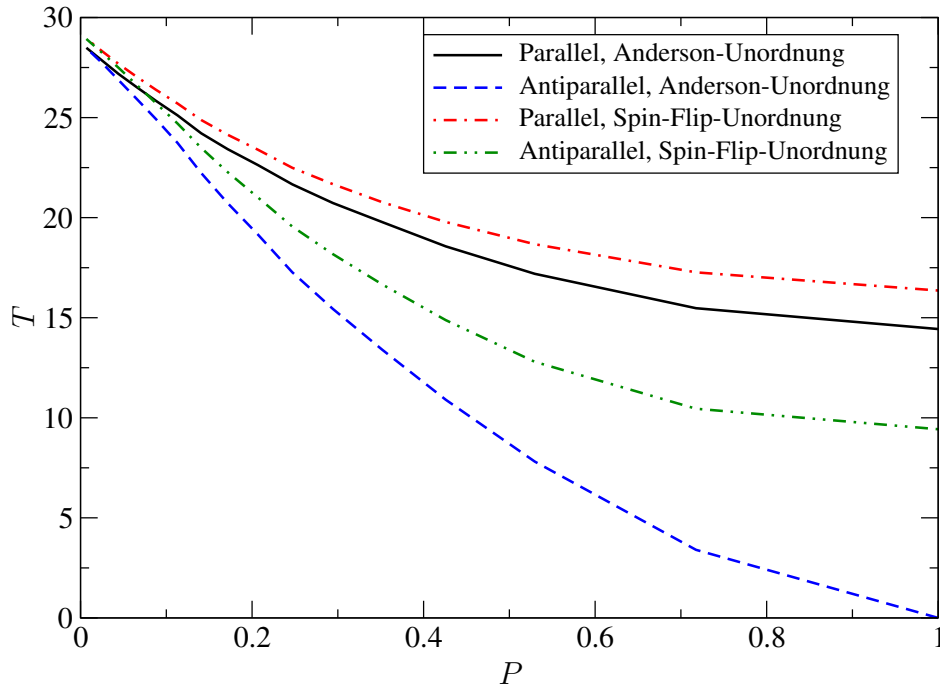
Dazu betrachten wir die Polarisationsabhängigkeit der Transmission durch die Barriere bei fester Unordnungsstärke  $\tilde{U}_0/\tilde{\varepsilon}_0$ . Dabei wird die Fermi-Energie der Majoritätselektronen konstant gehalten und die Fermi-Energie der Minoritätsladungsträger variiert. Die Spinpolarisation ist dann gegeben durch (vgl. Gleichung (3.2))

$$P = \frac{\sqrt{\tilde{E}_\uparrow} - \sqrt{\tilde{E}_\downarrow}}{\sqrt{\tilde{E}_\uparrow} + \sqrt{\tilde{E}_\downarrow}}.$$

Wir zeigen für  $\tilde{U}_0/\tilde{\varepsilon}_0 = 0.8$  die Transmission in Abhängigkeit von der Spinpolarisation  $P$  der Ferromagneten in Abbildung 4.11 (a). Bei Parallelstellung der Magnetisierungen findet man sowohl für Anderson- als auch Spin-Flip-Unordnung ein ähnliches Verhalten. In beiden Fällen steigt die Transmission mit sinkender Spinpolarisation an, da dann die Zahl der Transportkanäle für den Minoritätsspin zunimmt. Die Tunnelwahrscheinlichkeit mit Spin-Flip ist dabei meist etwas größer als ohne Spin-Flip, da dadurch mehr Möglichkeiten für den Transport durch die Barriere zur Verfügung stehen.



**Abb. 4.11:** Polarisationsabhängigkeit der Transmission durch eine Tunnelbarriere der Dicke 5 nm für Anderson- und Spin-Flip-Unordnung. Abbildung (b) zeigt einen vergrößerten Ausschnitt von Abbildung (a). Der eingebettete Graph in Abbildung (b) zeigt die Anzahl der Transportkanäle für den Minoritätsspin in Abhängigkeit von der Spinpolarisation  $P$ . Die Breite des Streifens betrug 99 Gitterpunkte, die Mittelung erfolgte über 500–2000 Störstellenkonfigurationen.



**Abb. 4.12:** Transmission in Abhängigkeit von der Polarisierung der Ferromagneten *ohne* Tunnelbarriere. Die Breite des Systems betrug 99 Gitterpunkte. Es wurde über 400 Störstellenkonfigurationen gemittelt.

Im antiparallelen Fall zeigt sich jedoch ein Unterschied: Während auch bei  $P = 1$  durch Spin-Flips eine endliche Transmissionswahrscheinlichkeit existiert, ist der Widerstand der Barriere, ohne die Möglichkeit den Spin eines Elektrons beim Tunneln zu ändern, unendlich. Spin-Flip-Streuung führt also nahe  $P = 1$  zu einer signifikant stärkeren Reduktion des TMR-Effekts als Anderson-Unordnung. Dieser Unterschied zwischen den beiden Unordnungstypen verschwindet allerdings für  $P < 0.9$ .

In Abbildung 4.11 (b) wird ein vergrößerter Ausschnitt der Polarisationsabhängigkeit der Tunnelwahrscheinlichkeit gezeigt. Im eingebetteten Graph in Abbildung 4.11 (b) zeigen wir dabei gleichzeitig die Zahl der Transportkanäle für den Minoritätsspin in Abhängigkeit von der Polarisierung. Dabei zeigt sich, dass mit Auftreten des ersten Transportkanals bei Anderson-Unordnung eine endliche Tunnelwahrscheinlichkeit durch die Barriere besteht, die schnell bis auf den Wert für den Fall mit Spin-Flips ansteigt. Die Transmission zeigt danach ein oszillierendes Verhalten, das abklingt, sobald zwei Transportkanäle im Minoritätsspin geöffnet sind. Ab diesem Zeitpunkt scheint der Transport über Spin erhaltende Streuung genauso effektiv zu sein, wie Spin-Flip-Streuung.

Um dieses Verhalten näher zu untersuchen, betrachten wir ein idealisiertes System oh-

ne Tunnelbarriere, bei dem die beiden Ferromagneten direkt aneinander stoßen, und führen ebenfalls vor und nach der Grenzfläche Unordnung ein. In Abbildung 4.12 wird das Ergebnis für die Transmission in Abhängigkeit von der Spinpolarisation aufgetragen ( $\tilde{U}_0/\tilde{\varepsilon}_0 = 0.8$ ). Bei Parallelstellung der Magnetisierungen beobachtet man wieder ähnliches Verhalten für Anderson- und Spin-Flip-Unordnung, die Tunnelwahrscheinlichkeit ist dabei für letztere etwas höher. Dagegen zeigt sich ein großer Unterschied bei Antiparallelstellung: Die Transmission ohne Spin-Flips ist über den gesamten Polarisationsbereich deutlich kleiner als die Transmission mit Spin-Flips. Somit ergibt sich für den Magnetowiderstand dieses idealisierten Systems eine signifikant stärkere Reduktion aufgrund von Spin-Flip-Prozessen als durch Anderson-Unordnung, ganz im Gegensatz zum Fall mit Tunnelbarriere.

Eine mögliche Erklärung dieser Diskrepanz liegt in den Unterschieden der Transmissionswahrscheinlichkeit. Ohne Barriere liegt diese in der Größenordnung von 1. Findet nur Spin erhaltende Streuung statt, so werden die Transportkanäle der Minoritätsladungsträger durch elastische Streuung von den Majoritätsladungsträgern aus der anderen Zuleitung gefüllt. Dabei ist die maximale Transmission durch die Anzahl der Minoritätskanäle gegeben. Im Gegensatz dazu ermöglicht Spin-Flip-Streuung Transport innerhalb der Majoritätskanäle, die maximale Transmissionswahrscheinlichkeit ist daher nur durch die Gesamtzahl der Transportkanäle gegeben.

Dieses Verhalten ist deutlich in Abbildung 4.12 zu erkennen. Bei  $P = 0.8$  sind beispielsweise drei Minoritätskanäle offen, die maximale Transmission bei Beibehaltung der Spinrichtung liegt daher bei 6, die Transmission mit Spin-Flips ist aber für  $P = 0.8$  bereits größer als 10. Somit können wir schlussfolgern, dass Spin-Flip-Streuung in dieser Situation zu einer effektiveren Reduktion des Magnetowiderstandseffektes führt als Anderson-Unordnung.

Im Gegensatz dazu ist die Transmission für eine Tunnelbarriere mit 5 nm Dicke von der Größenordnung  $10^{-5}$ , d. h. 5 Größenordnungen kleiner. Daher werden die oben genannten Grenzen der Tunnelwahrscheinlichkeit aufgrund der Kanalzahl nie erreicht. Vorausgesetzt es existiert ein Mechanismus zur Mischung der Transportkanäle, so findet ein tunnelndes Elektron immer einen nicht gefüllten Zustand. Dies könnte die von uns gefundene Unabhängigkeit der Tunnelwahrscheinlichkeit von der Art der Unordnung erklären.

## 4.2 Diffusiver Transport im Ferromagneten

Nachdem im vorherigen Abschnitt der Einfluss von Unordnung nahe an der Grenzfläche untersucht wurde, soll hier die Auswirkung von diffusivem Transport in den ferromagnetischen Zuleitungen auf den TMR-Effekt betrachtet werden. Anstatt starke Unordnung in einer kleinen Region wird nun schwächere Unordnung in einem ausge-

dehnten Gebiet in den Zuleitungen untersucht.

Der spezifische Widerstand von Fe liegt bei Zimmertemperatur bei ca.  $10 \mu\Omega \text{ cm}$  [53]. Unter Verwendung des Drude-Ausdrucks für den spezifischen Widerstand [53]

$$\rho = \frac{m}{ne^2\tau}$$

und der Fermi-Energien aus Tabelle 3.1 kann die mittlere Streuzeit in Fe zu  $\tau \approx 3 \cdot 10^{-14} \text{ s}$  abgeschätzt werden. Damit ergibt sich in zwei räumlichen Dimensionen die mittlere freie Weglänge für Majoritätselektronen  $\lambda_{\uparrow} \approx 30 \text{ nm}$  und für Minoritätselektronen  $\lambda_{\downarrow} \approx 10 \text{ nm}$ .

Wir betrachten wieder eine Tunnelbarriere der Dicke 5 nm. Auf der Länge von 30 nm wird in den Ferromagneten Unordnung eingeführt. Dabei wird das Verhältnis von mittlerer freier Weglänge und Spin-Flip-Länge  $\lambda_{\downarrow}/l_{\downarrow} = 0.17$  konstant gehalten<sup>3</sup>. In Abbildung 4.13 zeigen wir die Auswirkungen der Unordnung auf Transmission und TMR-Verhältnis. Dabei ist zu beachten, dass eine kleinere mittlere freie Weglänge stärkerer Unordnung entspricht. Wir sehen sowohl bei Parallelstellung als auch Antiparallelstellung der Magnetisierungen ein ähnliches Verhalten der Tunnelwahrscheinlichkeit wie bei Unordnung an der Grenzfläche. Es dominiert in beiden Fällen der gestreute Anteil der Transmission, bei Antiparallelstellung die Transmission mit Spin-Flip. Dennoch ist kein Effekt auf das TMR-Verhältnis zu erkennen. Dieses bleibt im Rahmen der Fehlerbalken konstant.

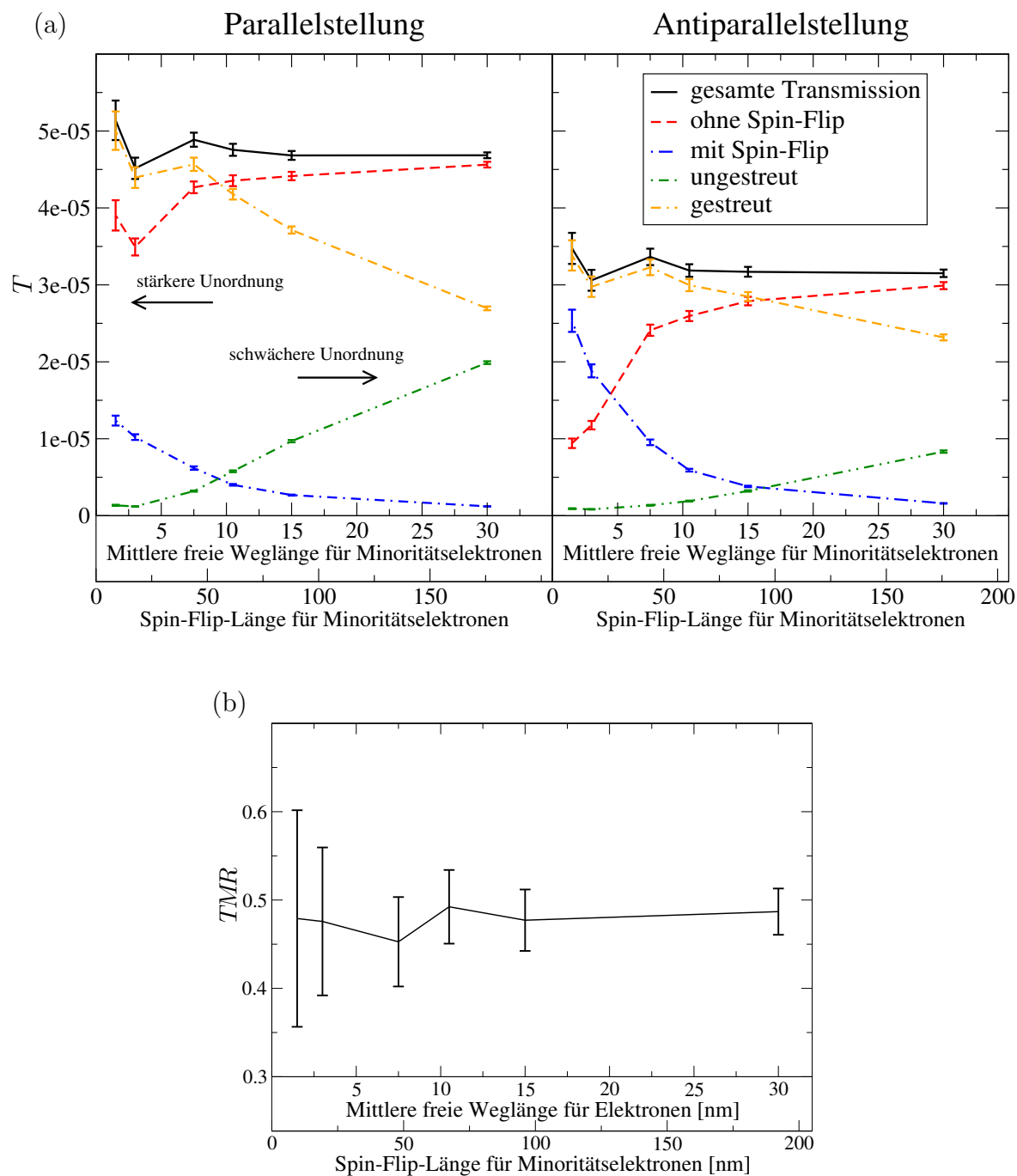
Tunnelt ein Elektron in einen energetisch verbotenen Zustand des Ferromagneten, so sinkt seine Aufenthaltswahrscheinlichkeit exponentiell mit dem Abstand von der Barriere ab. Durch Unordnung kann es jedoch in einen erlaubten Zustand gestreut werden und zum Transport beitragen. Lediglich Störstellen nahe der Grenzfläche beeinflussen daher den Tunnelvorgang, im diffusiven System mit verhältnismäßig kleiner Unordnung<sup>4</sup> findet dagegen die Mehrzahl der Streuprozesse weit entfernt von der Barriere und damit ohne Auswirkungen auf den Tunnelprozess statt.

### 4.3 Vergleich mit GMR

Wird anstelle der Tunnelbarriere ein metallischer Leiter oder ein genügend dotierten Halbleiter zwischen zwei ferromagnetischen Zuleitungen betrachtet, so findet man

<sup>3</sup>Für  $\lambda_{\downarrow} = 10 \text{ nm}$  bedeutet dies  $l_{\downarrow} = 58 \text{ nm}$ , was der Spin-Flip-Länge in Co entspricht.

<sup>4</sup>Zum Vergleich:  $\lambda_{\downarrow} = 1 \text{ nm}$ ,  $l_{\downarrow} = 5.8 \text{ nm}$  entspricht  $\tilde{U}_0 \approx 0.59$  und  $\tilde{\varepsilon}_0 \approx 0.09$ .



**Abb. 4.13:** (a) Transmission durch eine Tunnelbarriere der Dicke 5 nm mit diffusivem Transport in den Zuleitungen in Abhängigkeit von der mittleren freien Weglänge der Minoritätselektronen  $\lambda_{\perp}$ . (b) TMR-Verhältnis in Abhängigkeit von  $\lambda_{\perp}$ . Es wurde über 500 Störstellenkonfigurationen gemittelt.

ähnliche Phänomene wie beim spinabhängigen Tunneln. Die Leitwerte für parallele und antiparallele Magnetisierungen unterscheiden sich ebenfalls und man definiert ein Verhältnis

$$GMR = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P}.$$

Der Effekt wird in diesem Fall *Gigantischer Magnetowiderstand* (GMR, *giant magnetoresistance*) genannt.

Die Erklärung dieses Effekts ist ähnlich wie beim spinabhängigen Tunneln: Aufgrund der größeren Zustandsdichte an der Fermi-Kante für Majoritätselktronen weisen diese eine höhere Leitfähigkeit auf als die Minoritätsladungsträger. Im nicht-magnetischen Material ist dagegen die Leitfähigkeit für beide Spin-Richtungen gleich. Nimmt man nun an, dass der Spin eines Elektrons während des Transports erhalten bleibt (*two current model*), so kann der GMR-Effekt in einem einfachen Widerstandsmodell erklärt werden [19]. Eine genauere theoretische Beschreibung greift auf die Boltzmann-Gleichung zurück [19, 60].

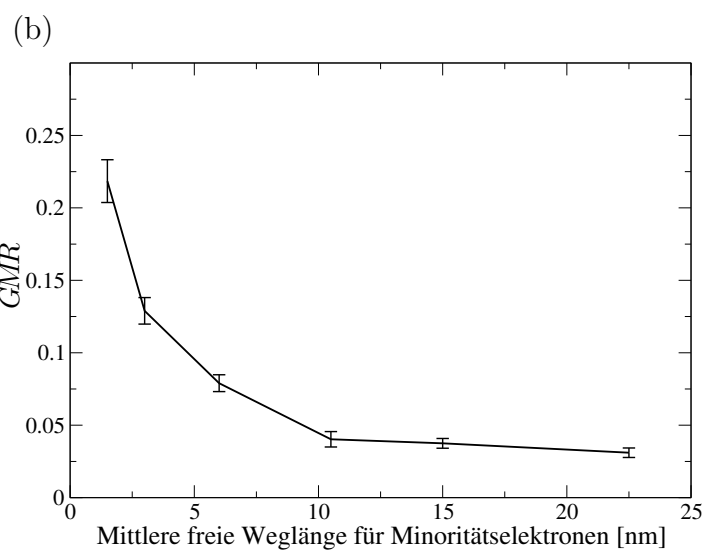
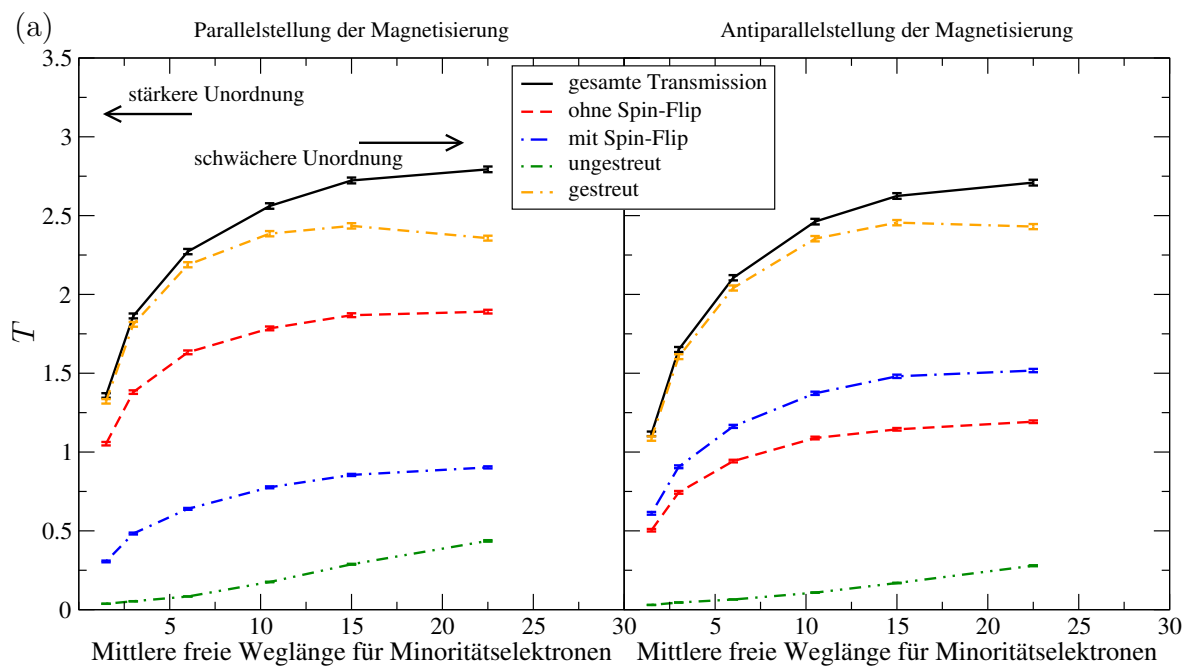
Wir interessieren uns in diesem Zusammenhang nur für die konzeptionelle Ähnlichkeit des GMR- zum TMR-Effekt und untersuchen daher mit den bisher verwendeten Techniken den Einfluss von zunehmender Unordnung auf den diffusiven Transport durch ein Ferromagnet/Halbleiter/Ferromagnet-System, das keine Tunnelbarriere ausbildet. Dazu wird ein idealisiertes System betrachtet, das aus ferromagnetischen Zuleitungen (Fe), in denen auf einer Länge von 30 nm Unordnung eingeführt wurde, und einem 20 nm langen Halbleiter besteht. Die Breite des Systems betrug 149 Gitterpunkte (=15 nm), die Fermi-Energie des Halbleiter wurde auf  $\tilde{E}_{hl} = 0.067 (\approx 250 \text{ meV})^5$  gesetzt. Die Spin-Flip-Länge im Ferromagneten wurde bei  $l_{sf}^{fm} = 20 \text{ nm}$  konstant gehalten, im Halbleiter die mittlere freie Weglänge  $\lambda_{\uparrow,hl} = \lambda_{\downarrow,hl} = 15 \text{ nm}$  und die Spin-Flip-Länge  $l_{sf}^{hl} = 1 \mu\text{m}$  gewählt.

In Abbildung 4.14 (a) wird die Transmission durch das diffusive System in Abhängigkeit von der mittleren freien Weglänge der Minoritätsladungsträger gezeigt. Mit zunehmender Unordnung nimmt dabei die Transmissionswahrscheinlichkeit *ab*. Dies ist bei diffusivem Transport zu erwarten, da mit zunehmender Unordnung der Widerstand des Systems ansteigt. Im Gegensatz dazu stieg beim durch Störstellen assistierten Tunneln die Transmission mit zunehmender Unordnung *an*.

Ebenso steigt der in Abbildung 4.14 (b) gezeigte GMR-Effekt mit stärker werdender Streuung an. Eine auf der Boltzmann-Theorie basierende Beschreibung des GMR-

---

<sup>5</sup>Diese recht hohe Fermi-Energie wurde aus numerischen Gründen gewählt. Sie entspricht drei offenen Transportkanälen pro Spin im Halbleiter.



**Abb. 4.14:** (a) Diffusiver Transport durch ein Fe/Halbleiter/Fe-System in Abhängigkeit von der mittleren freien Weglänge der Minoritätselektronen. (b) GMR-Verhältnis in Abhängigkeit von der mittleren freien Weglänge der Minoritätselektronen. Es wurde über je 800 Störstellenkonfigurationen gemittelt.

Effekts sagt ein GMR-Verhältnis von

$$GMR = \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} \left( \frac{l_{sf}^{fm} \rho_{fm}}{x_0 \rho_{hl}} \right)^2 \frac{4}{\left( 2 \frac{l_{sf}^{fm} \rho_{fm}}{x_0 \rho_{hl}} + 1 \right)^2 - \beta^2}$$

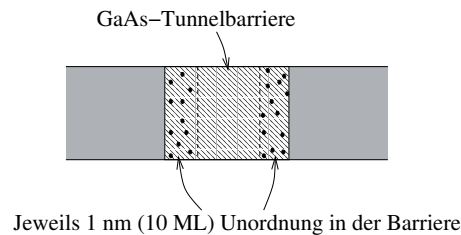
voraus [19], wobei  $\beta$  die Spinpolarisation des Ferromagneten,  $\rho_{fm}$  ( $\rho_{hl}$ ) der spezifische Widerstand des Ferromagneten (Halbleiters) und  $x_0$  die Dicke des Halbleiters ist.

Da im Halbleiter deutlich weniger Transportkanäle als im Ferromagneten vorhanden sind, ist  $\rho_{hl} \gg \rho_{fm}$  und damit das GMR-Verhältnis klein. Durch stärkere Unordnung wird  $\rho_{fm}$  und damit das GMR-Verhältnis vergrößert.

Die Auswirkungen von Unordnung auf den GMR-Effekt sind also völlig *gegensätzlich* zu den Folgen für den TMR-Effekt: Während Unordnung die Tunnelwahrscheinlichkeit *erhöht*, *sinkt* die Transmission bei diffusivem Transport mit zunehmender Streuung. Ebenso bewirkt stärkere Unordnung eine *Reduktion* des TMR-Effekts, dagegen führt sie zu einer *Erhöhung* des GMR-Effekts.

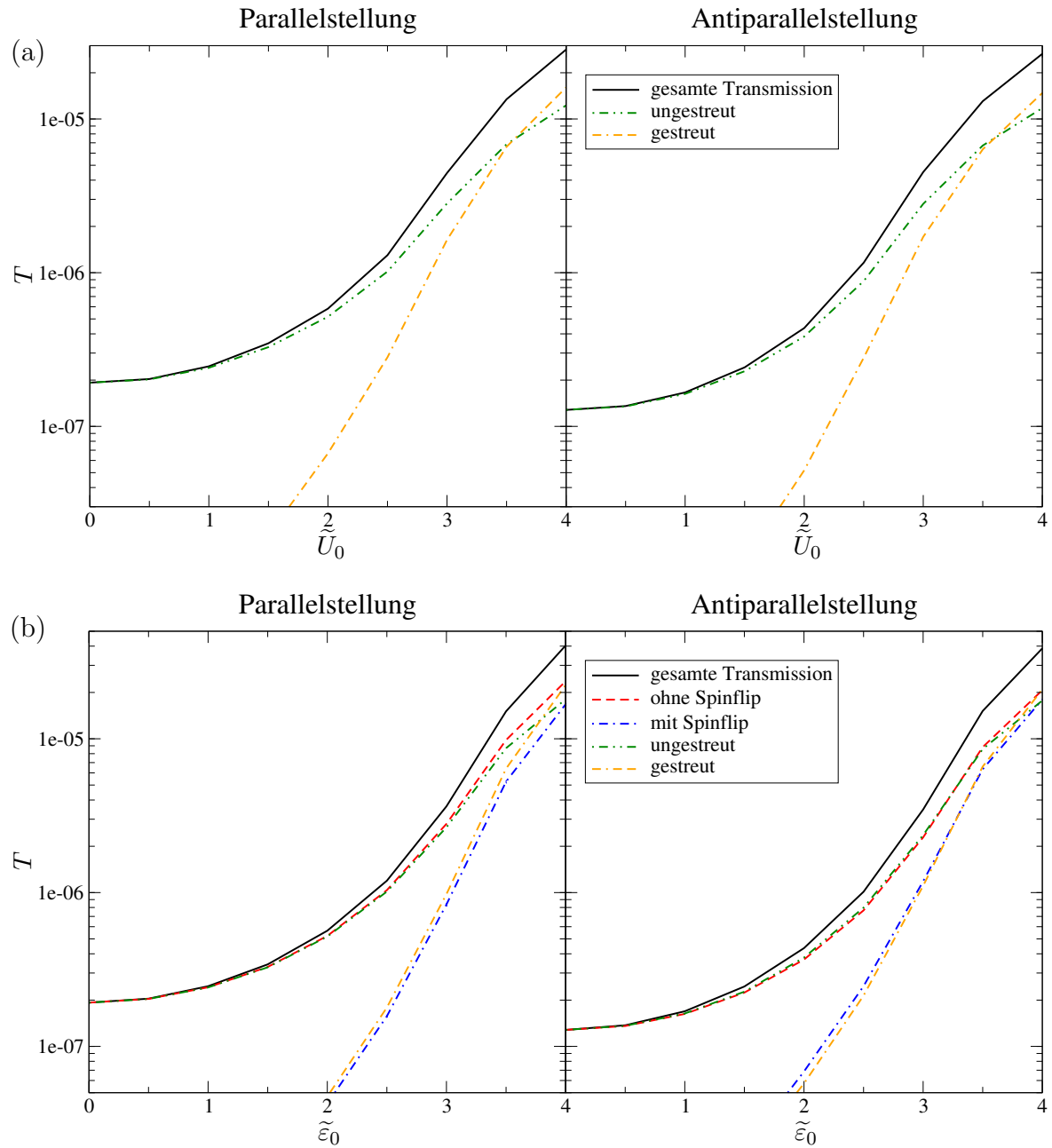
## 4.4 Unordnung in der Barriere

Bisher hatten wir nur den Fall von Störstellen außerhalb der Barriere untersucht, um Streuung an den Grenzflächen der Tunnelbarriere zu simulieren. Die Barriere selbst blieb unangetastet. Tsymbal und Pettifor haben aber im Rahmen eines Single-Band-Tight-Binding-Modells gezeigt, dass Unordnung in der Barriere selbst eine starke Reduktion des TMR-Effekts hervorrufen kann [33]. Daher wird in diesem Abschnitt auch der Einfluss von Unordnung in der Tunnelbarriere untersucht.



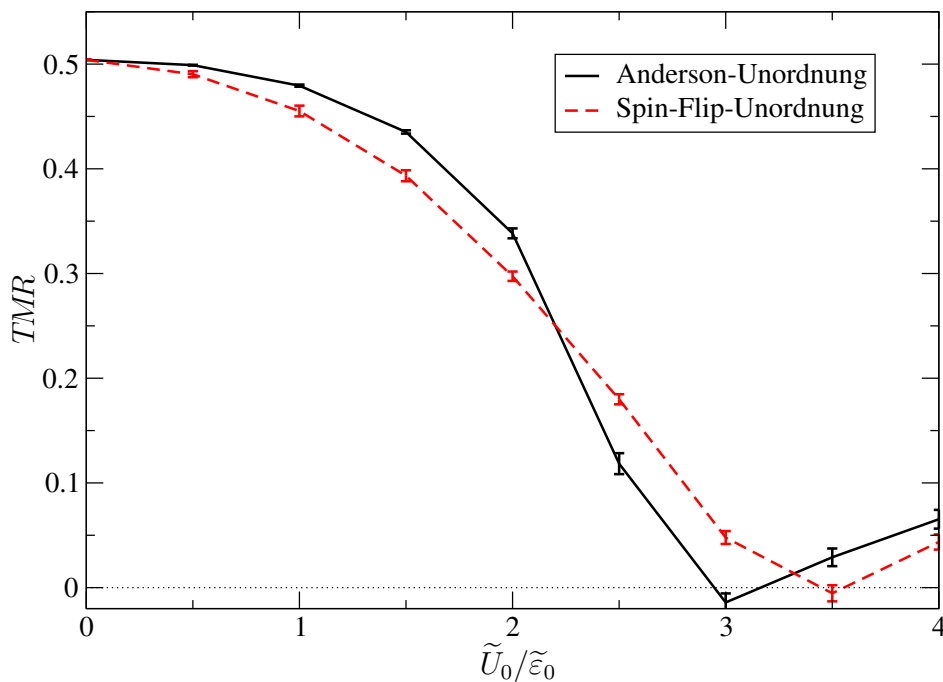
**Abb. 4.15:** Unordnung nahe der Grenzflächen in der Tunnelbarriere.

Dazu betrachten wir eine GaAs-Tunnelbarriere von 7 nm Dicke. Im Gegensatz zu [33] führen wir zunächst nur auf einer Länge von 1 nm Unordnung an den Grenzflächen in der Tunnelbarriere ein (vgl. Abbildung 4.15).

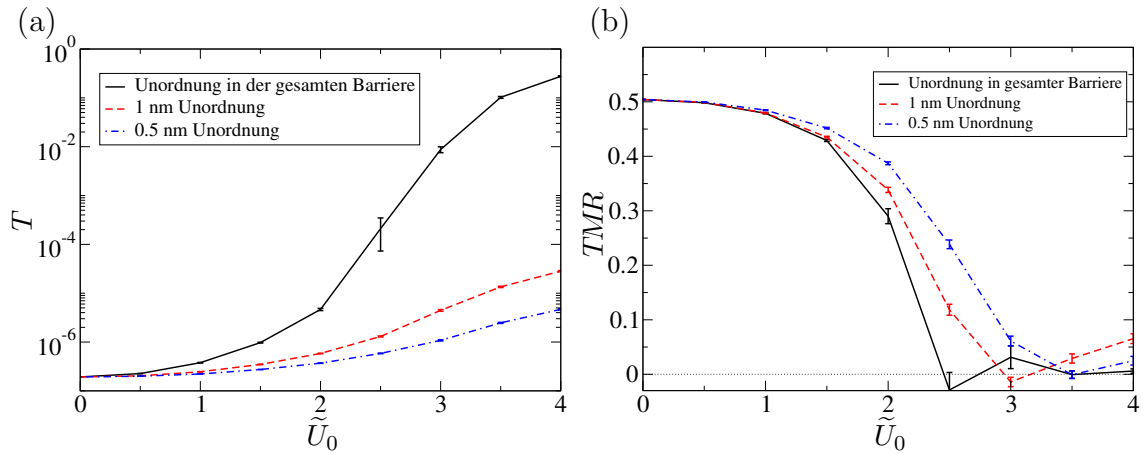


**Abb. 4.16:** Transmission durch ein Fe/GaAs/Fe-Tunnelement mit der Barriere­dicke 7 nm und Unordnung nahe den Grenzflächen in der Barriere in Abhängigkeit von  $\tilde{U}_0/\tilde{\epsilon}_0$ . (a) Anderson-Unordnung, (b) Spin-Flip-Unordnung. Die Breite des Systems betrug 99 Gitterpunkte. Zur Bestimmung der Transmission wurde über 500–3000 Störstellenkonfigurationen gemittelt, die Fehler sind jeweils unter 2%.

In Abbildung 4.16 wird die Transmission in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke gezeigt. Dabei finden wir sowohl für Anderson- als auch Spin-Flip-Unordnung einen deutlich stärkeren Anstieg der Tunnelwahrscheinlichkeit als für den Fall von Unordnung in den Zuleitungen. Zwar ändert das Unordnungspotential *im Mittel* die Höhe der Barriere nicht, *lokal* führen die statistischen Fluktuationen des Störstellenpotentials zu einer Verringerung der Barrierenhöhe. Damit können sich lokalisierte Zustände bilden, durch die der Großteil des Tunnelstroms fließt. Die effektive Barrierenbreite wird dadurch reduziert und führt damit zu einem exponentiellen Anstieg der Tunnelwahrscheinlichkeit. Der Effekt von Streuung scheint dabei für die Erhöhung der Tunnelwahrscheinlichkeit vernachlässigbar zu sein, da erst für  $\tilde{U}_0/\tilde{\varepsilon}_0 > 3$  der gestreute Anteil der Transmission eine mit dem ungestreuten Anteil vergleichbare Größe erreicht. Bei dieser Unordnungsstärke wird jedoch bereits eine Zunahme der Tunnelwahrscheinlichkeit um eine Größenordnung beobachtet. Im Fall von Spin-Flip-Unordnung folgt der Spin-Flip-Anteil der Tunnelwahrscheinlichkeit dem gestreuten Anteil. Fast jeder Streuvorgang führt also zu einer Änderung des Spin-Zustandes. Wieder finden wir, dass die Tunnelwahrscheinlichkeit bei Antiparallelstellung der Magnetisierungen stärker ansteigt als bei Parallelstellung. Es ergibt sich also auch in diesem Fall eine Reduktion des TMR-Verhältnisses.



**Abb. 4.17:** Abhängigkeit des TMR-Verhältnisses von der Stärke der Unordnung in der Barriere. Das TMR-Verhältnis wurde durch Mittelung über 500–3000 Störstellenkonfigurationen bestimmt.



**Abb. 4.18:** (a) Transmission in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke  $\tilde{U}_0$ . Dabei wurden die Fälle unterschieden, in denen die Störstellen in der gesamten Barriere oder nur in einem Bereich von 1 nm (0.5 nm) an der Grenzfläche verteilt sind. In (b) wird für diese Fälle das Verhalten des TMR-Verhältnisses gezeigt.

Die Auswirkungen auf den TMR-Effekt werden in Abbildung 4.17 gezeigt. Das TMR-Verhältnis fällt dabei für  $\tilde{U}_0/\tilde{\varepsilon}_0 > 2$  schnell auf einen Wert nahe 0 ab. Wiederum ist aber die Reduktion für Anderson- und Spin-Flip-Unordnung von vergleichbarer Größe.

Um ein besseres Verständnis für die Vorgänge beim Tunneln durch die ungeordnete Barriere zu bekommen, vergleichen wir die Effekte von Unordnung in verschiedenen Bereichen der Barriere. Dazu wird Unordnung auf der ganzen Länge der Barriere betrachtet, wie in [33] untersucht. Dies vergleichen wir mit Störstellen, die auf ein Gebiet nahe der Grenzflächen beschränkt sind. Für dieses Gebiet wählen wir die Längen 1 nm und 0.5 nm. In Abbildung 4.18 (a) zeigen wir die Tunnelwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke für Anderson-Unordnung für diese Fälle. Dabei wird ein deutlich stärkerer Anstieg der Transmission für Unordnung in der gesamten Tunnelbarriere gefunden. Bleibt die Unordnung auf ein Gebiet nahe der Grenzfläche begrenzt, so ist die Tunnelwahrscheinlichkeit durch den geordneten Teil der Barriere beschränkt. Das Ergebnis für die gänzlich ungeordnete Barriere ist dabei in qualitativer Übereinstimmung mit den Ergebnissen in [33].

Betrachtet man das Verhalten des TMR-Verhältnisses in Abbildung 4.18 (b), so findet man den stärksten Abfall des TMR-Effekts für eine gänzlich ungeordnete Barriere. Allerdings zeigen auch die Tunnelemente, bei denen Unordnung nur nahe der Grenzfläche vorhanden ist, eine vergleichbare Reduktion des TMR-Verhältnisses. Dies ist erstaunlich, bedenkt man, dass beispielsweise das Verhältnis von der Länge des ungeordneten Bereichs in der Barriere zur Gesamtdicke der Barriere für Unordnung auf

einer Länge von 0.5 nm lediglich 1:7 beträgt. Dennoch sehen wir ebenfalls eine effiziente Reduktion des TMR-Effekts. Da in diesem Fall die beiden Zuleitungen noch durch eine geordnete Barriere der Dicke 6 nm getrennt sind, ist die Interpretation, die Spinpolarisation der Ferromagneten sinke durch Kopplung der Zuleitungen über lokalisierte Zustände [33], zumindest fragwürdig.

Unordnung in der Barriere führt also ebenfalls zu einer Reduktion des TMR-Verhältnisses, ebenso finden wir wieder ähnliches Verhalten für Anderson- und Spin-Flip-Unordnung.

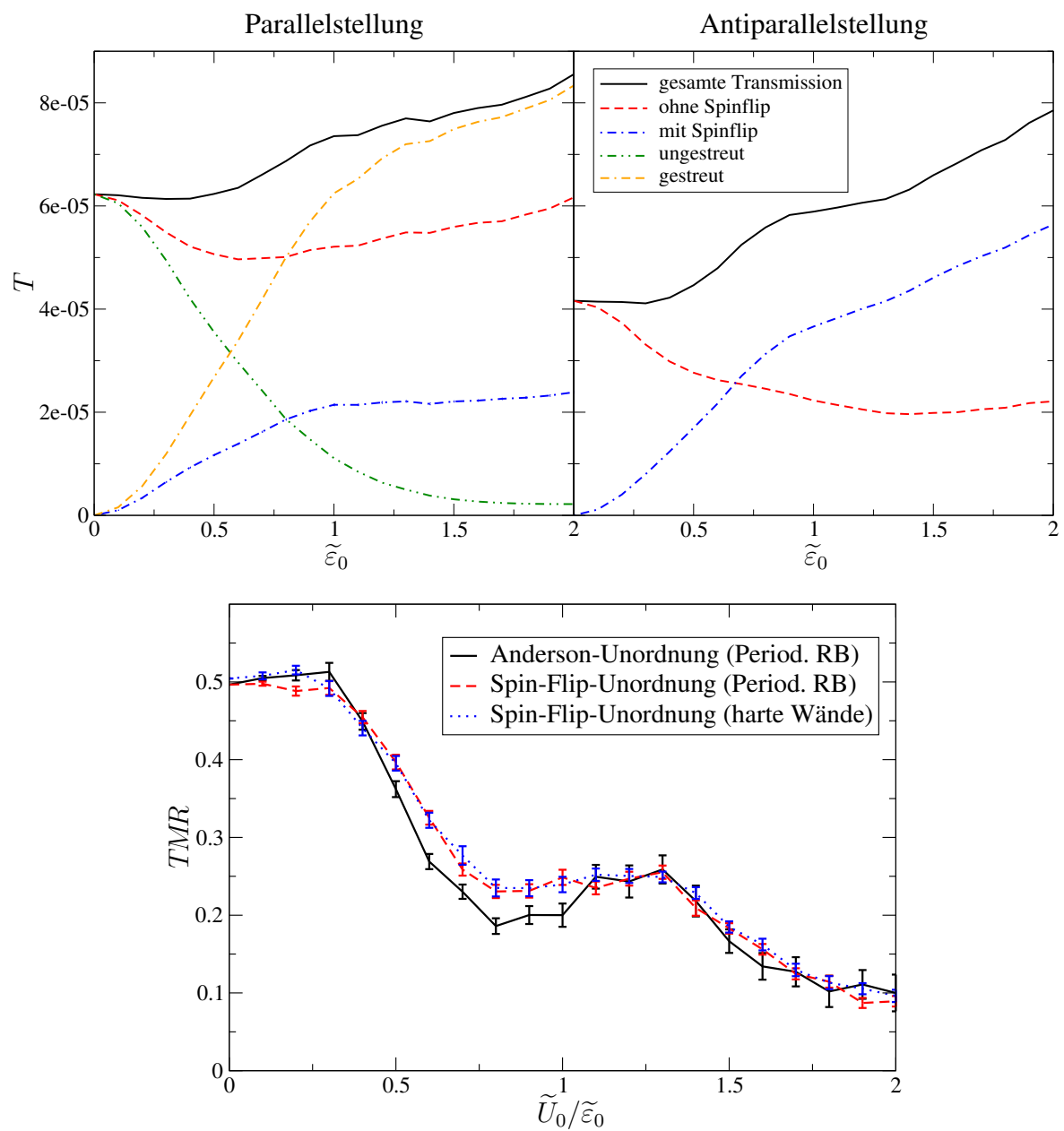
Im Gegensatz zur Unordnung in den Zuleitungen kann für die Tunnelbarriere keine mittlere freie Weglänge definiert werden, die ein Maß für die Stärke der Unordnung angibt. Daher ist es schwierig einzuschätzen, welche Stärke von physikalischer Relevanz ist. Die in diesem Abschnitt betrachteten Fluktuationen des Störstellenpotentials sind viel größer als die Höhe der Barriere (0.2 in dimensionslosen Einheiten), aber auch viel kleiner als die Hopping-Energien ( $\frac{1}{\tilde{m}_{\text{GaAs}}} \approx 15$ ). Im Gegensatz dazu sind die in Single-Band-Tight-Binding-Modellen betrachteten Störstellenenergien meist von der Größenordnung der Barrierenhöhe, aber deutlich größer als die Hopping-Energien [33, 35, 36].

## 4.5 Einfluss von Randbedingungen und Dimensionalität

In den vorangegangenen Abschnitten wurden alle Rechnungen in zweidimensionalen Systemen mit harten Wänden durchgeführt. Um einen Einfluss der Randbedingungen auszuschließen, zeigen wir daher im nächsten Abschnitt, dass auch bei Verwendung periodischer Randbedingungen praktisch identische Resultate erzielt werden. Danach wird demonstriert, dass Rechnungen an dreidimensionalen Systemen zu Ergebnissen führen, die qualitativ mit den bisher an zweidimensionalen Systemen gewonnenen übereinstimmen.

### 4.5.1 Einfluss der Randbedingungen

Anstelle eines Potentialtopfs mit unendlich hohen Wänden werden nun in transversaler Richtung periodische Randbedingungen verwendet. Das bisher endliche System wird dadurch formal unendlich ausgedehnt. Allerdings wird eine künstliche Periodizität von der Breite des betrachteten Systems eingeführt.



**Abb. 4.19:** (a) Transmission durch Tunnelbarriere der Dicke 5 nm (mit Spin-Flip-Unordnung), (b) TMR-Verhältnis in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke. Die Rechnungen wurden in einem zweidimensionalen Streifen mit periodischen Randbedingungen durchgeführt, die Zahl der Gitterpunkte in transversaler Richtung betrug 150. Es wurde über 500–3000 Störstellenkonfigurationen gemittelt.

Eine ausgewählte Zahl der bisher vorgestellten Rechnungen wurde unter Verwendung von periodischen Randbedingungen wiederholt. Dabei wurden keine qualitativen Abweichungen von den bisherigen Ergebnissen gefunden. Wir zeigen dazu das Beispiel von Spin-Flip-Streuung in Fe nahe der Grenzfläche der Barriere.

In Abbildung 4.19 (a) wird die Transmission durch eine Barriere der Dicke 5 nm gezeigt. Bei Verwendung von periodischen Randbedingungen liegt die Transmission etwas höher als bei harten Wänden, ansonsten finden wir qualitativ dasselbe Verhalten wie in Abbildung 4.3 (b). Bei harten Wänden führt die Einschränkung der transversalen Ausdehnung im Potentialtopf zu einer endlichen Grundzustandsenergie, die nicht als kinetische Energie zur Verfügung steht, und damit zu einer kleineren Tunnelwahrscheinlichkeit.

Auch das Verhalten des TMR-Verhältnisses (Abbildung 4.19 (b)) folgt dem bisher erhaltenen Ergebnis.

Aus diesen Gründen kann ein signifikanter Einfluss der endlichen Ausdehnung der betrachteten Systeme ausgeschlossen werden.

## 4.5.2 Dreidimensionale Systeme

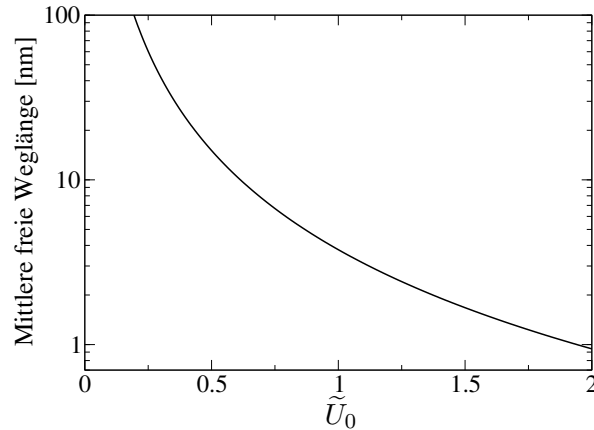
Alle in diesem Kapitel vorgestellten Rechnungen wurden an zweidimensionalen Systemen durchgeführt, da Rechnungen in diesen Systemen weniger Zeit benötigen als in drei Dimensionen. In diesem Abschnitt wollen wir daher die Rechnungen zum TMR-Effekt aus Abschnitt 4.1 in einer dreidimensionalen Geometrie wiederholen.

Dazu verwenden wir ein System mit einem Querschnitt von  $22 \times 22$  Gitterplätzen mit periodischen Randbedingungen, entsprechend einer Fläche von  $2.2 \text{ nm} \times 2.2 \text{ nm}$ . Eine transversale Schicht enthält damit 484 Gitterpunkte. Dies ist um einen Faktor 5–10 größer als in bisherigen Tight-Binding-Rechnungen zum TMR-Effekt [33, 35, 36]. Die Zahl der offenen Transportkanäle beträgt damit 23 für Majoritäts- und 5 für Minoritätselektronen. Die mittlere freie Weglänge in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke wird für den dreidimensionalen Fall in Abbildung 4.20 gezeigt<sup>6</sup>.

Die in Abbildung 4.21 (a) gezeigte Transmission für Spin-Flip-Unordnung zeigt ein Verhalten, wie es bereits aus dem zweidimensionalen Fall bekannt ist. Das Argument, die Aufhebung der  $k_{\parallel}$ -Erhaltung führe zu einer Erhöhung der Tunnelwahrscheinlichkeit, ist unabhängig von der betrachteten Dimension. Der gestreute Anteil der Transmission

---

<sup>6</sup>Diese ist im Rahmen des verwendeten Modells spinunabhängig, da  $\frac{1}{\tau} \propto \sqrt{E}$  und  $v \propto \sqrt{E}$ . Somit fällt die Energieabhängigkeit weg.



**Abb. 4.20:** Mittlere freie Weglänge für Unordnungsstärke  $\tilde{U}_0$  in drei Dimensionen.

ist kleiner als in den zweidimensionalen Rechnungen, da die betrachtete Unordnungsstärke in drei Dimensionen kleiner ist als in zwei räumlichen Dimensionen (vgl. Abbildung 4.20). Der Bereich, in dem der gestreute Anteil der Transmission zu überwiegen beginnt, wird aber erreicht.

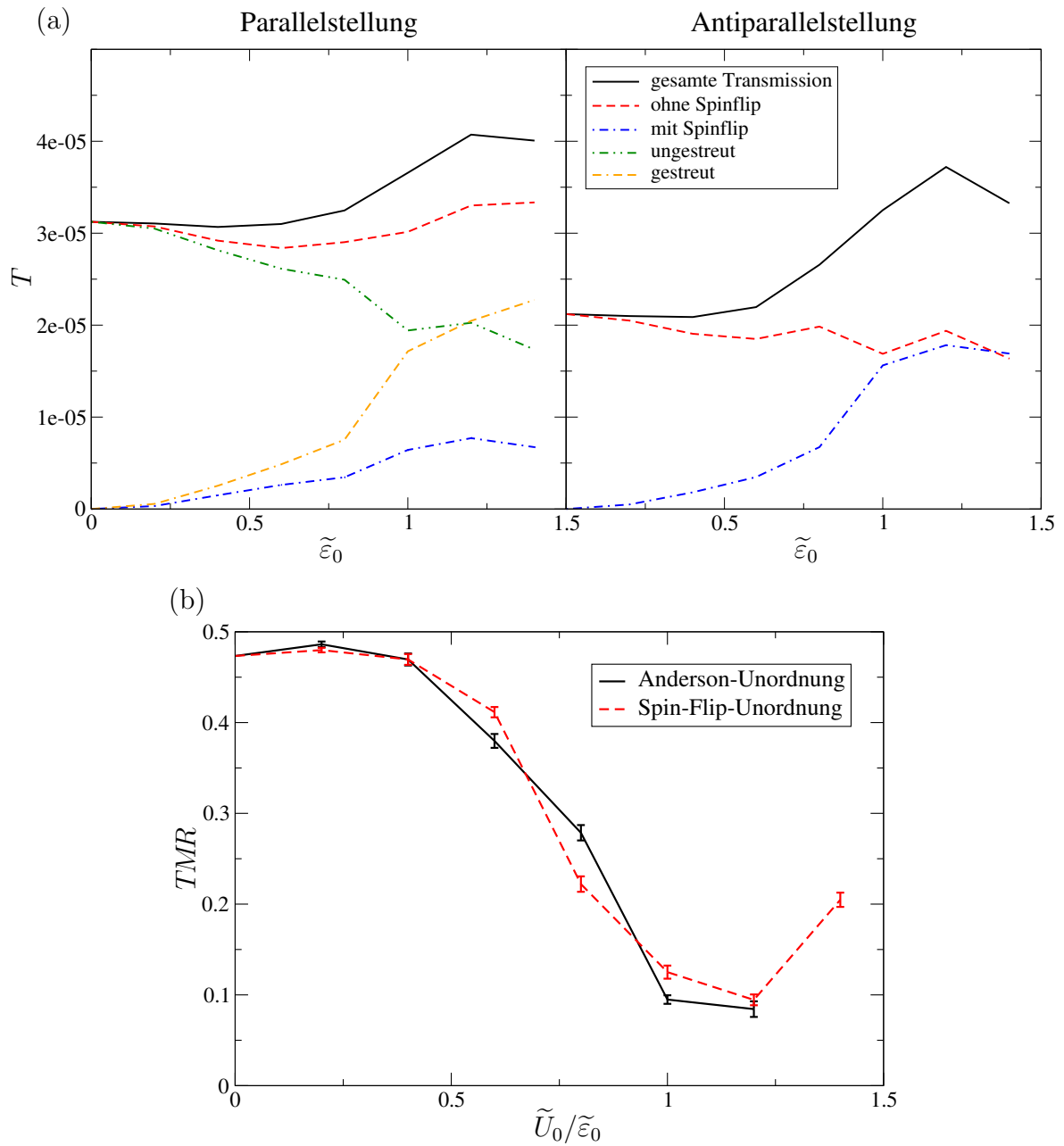
Ebenso finden wir mit wachsender Unordnungsstärke eine Abschwächung des TMR-Effekts, die qualitativ mit den zweidimensionalen Rechnungen übereinstimmt (siehe Abbildung 4.21 (b)). Dabei fällt die Verringerung des TMR-Effekts sogar etwas stärker aus, da in drei Dimensionen eine etwas schwächere Unordnung betrachtet wurde. Für  $\tilde{U}_0 = 1.2$  ist der TMR-Effekt auf 8.4% gefallen — eine Reduktion um etwa 80%. Dabei beträgt die mittlere freie Weglänge, die dieser Unordnung entspricht, 2.6 nm<sup>7</sup>. Auch in diesem Fall beobachtet man kaum einen Unterschied zwischen Spin-Flip- und Anderson-Unordnung.

Diese Ergebnisse bestätigen die bereits an zweidimensionalen Systemen gewonnenen Beobachtungen.

## 4.6 Zusammenfassung

Die Ergebnisse dieses Kapitels können wie folgt zusammengefasst werden: Streuvorgänge an den Grenzflächen der Barriere führen zu einer signifikanten Reduktion des

<sup>7</sup>Zum Vergleich: Für Permalloy ist  $\lambda^* = 2 \left( \frac{1}{\lambda_{\uparrow}} + \frac{1}{\lambda_{\downarrow}} \right)^{-1} \approx 2.4$  nm. Dieser Wert liegt dabei näher an der kürzeren der beiden freien Weglängen. In erster Näherung kann man dabei Permalloy als Ni mit Fe Störstellen betrachten [58].



**Abb. 4.21:** (a) Transmission (mit Spin-Flip-Unordnung), (b) TMR-Verhältnis in Abhängigkeit von der Unordnungstärke in drei Dimensionen. Es wurde über 500 Störstellenkonfigurationen gemittelt.

Tunnelmagnetowiderstandseffekts. Wir haben die Aufhebung der  $k_{\parallel}$ -Erhaltung und die dadurch mögliche Mischung der Transportkanäle als Ursache für diesen Effekt identifiziert. Dadurch kommt es zu einer Erhöhung des Tunnelstroms, die bei Antiparallelstellung der Magnetisierungen stärker als bei Parallelstellung ausfällt. Der assistierende Einfluss der Störstellen auf die Tunnelwahrscheinlichkeit ist dabei umso höher, je näher sich die Störstellen an der Barrierengrenze befinden.

Wir haben sowohl den Einfluss von Spin erhaltender als auch Spin-Flip-Streuung untersucht. In beiden Fällen finden wir eine vergleichbare Reduktion des TMR-Effekts, obwohl der Tunnelstrom unter dem Einfluss von Spin-Flip-Streuung eine völlig andere Charakteristik aufweist als bei Spin erhaltender Streuung. Nur bei sehr hoher Polarisation der Ferromagneten  $P \approx 1$  ist ein Unterschied erkennbar. Die Reduktion des TMR-Effekts scheint also kaum von den Details des Streumechanismus abzuhängen. Eine mögliche Erklärung für dieses Verhalten ist die geringe Tunnelwahrscheinlichkeit  $T \ll 1$ .

Ein Vergleich der verwandten Phänomene des TMR- und GMR-Effekts zeigt den Unterschied der Auswirkungen von Unordnung in beiden Fällen: Im Falle des TMR-Effekts führt Unordnung zu einer Erhöhung der Transmission und einer Reduktion des Magnetowiderstandsverhältnisses, dagegen bewirkt stärkere Streuung beim diffusiven Transport im GMR-Effekt eine Verringerung der Transmission, aber eine Erhöhung des GMR-Verhältnisses. Wir haben dies durch die Unterschiede von Tunnelprozess und diffusivem Transport erklärt.

Außerdem wurde der Einfluss von Unordnung in der Barriere selbst untersucht. Dabei wurde wie in [33] eine starke Reduktion des TMR-Effekts beobachtet. Auch wenn die Unordnung in einem kleinen Bereich an der Grenzfläche der Barriere konzentriert ist und das Zentrum der Barriere selbst frei von Störstellen ist, wird eine ähnlich effiziente Reduktion gefunden wie im Fall einer gänzlich ungeordneten Barriere. Leider ist es im Rahmen des Kontinuumsmodells nicht möglich, eine einfache Interpretation der Stärke der Unordnung in der Barriere zu geben. Daher ist es in diesem Fall schwer abzuschätzen, welche Unordnungsstärke von physikalischer Relevanz ist.

Schließlich wurde gezeigt, dass die gewählten Randbedingungen keinen bemerkbaren Einfluss auf den TMR-Effekt haben. Zur Überprüfung der aus Gründen der Rechenzeit an zweidimensionalen Systemen gefundenen Ergebnisse wurden schließlich dreidimensionale Kontrollrechnungen durchgeführt. Diese ergeben qualitative Übereinstimmung mit den zweidimensionalen Resultaten.

Können diese Ergebnisse nun das sehr kleine TMR-Verhältnis des Experiments erklären? Wie wir durch Vergleich mit den mittleren freien Weglängen gesehen haben, entsprechen die betrachteten Unordnungsstärken durchaus physikalisch relevanten Streustärken. Jedenfalls sind Weglängen im Bereich von mehreren Å bis einigen nm für starke Streuung denkbar, wie beispielsweise ein Vergleich mit mittleren freien Weglängen in Permalloy zeigt. Daher sind die hier vorgestellten Effekte eine mögliche

Erklärung für eine Verringerung des TMR-Verhältnisses im Experiment. Der extrem kleine Wert (0.21–1.7%) jedoch, der im Experiment beobachtet wird, entspräche in unseren Betrachtungen extrem starker Unordnung. Daher ist anzunehmen, dass mehrere Effekte für die Reduktion des TMR-Effekts verantwortlich sind. Unordnung an der Grenzfläche spielt aber vermutlich eine wichtige Rolle.



# Kapitel 5

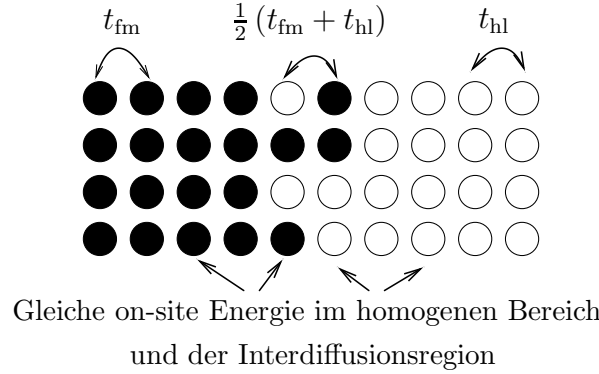
## Modelle zur Interdiffusion an den Grenzflächen

Das vorherige Kapitel hat gezeigt, dass Unordnung einen signifikanten Einfluss auf den TMR-Effekt haben kann. In allen Rechnungen wurde jedoch immer eine abrupte Tunnelbarriere verwendet und Unordnung in den wohldefinierten Bereichen von Ferromagnet und Halbleiterbarriere eingeführt. Experimentelle Beobachtungen weisen daraufhin, dass Interdiffusion von Fe-Atomen in die Barriere eine Reduktion des TMR-Effekts bewirken kann [27]. Nimmt man diese Interdiffusion als Ursache für Streuung an den Grenzflächen der Barriere an, so stellt sich in der bisherigen Betrachtung die konzeptionelle Frage, ob Fe-Atome als Störstellen in GaAs oder Barrierenmaterial als Verunreinigung der Fe-Zuleitungen betrachtet werden soll. Tatsächlich wird aber Interdiffusion den Charakter der Barrierengrenze selbst ändern.

Daher werden in diesem Kapitel verschiedene Möglichkeiten zur Modellierung der Interdiffusion an der Grenzfläche vorgestellt und das TMR-Verhältnis berechnet. Wir finden dabei, dass der erhaltene TMR-Effekt sehr stark vom gewählten Modell abhängen kann.

### 5.1 TMR-Effekt im Kirczenow-Modell

Kirczenow hat in [32] den Einfluss von Unordnung an der Trennfläche auf die elektrische Spininjektion von Ferromagneten in Halbleiter untersucht. Während an geordneten Grenzflächen die Spininjektion aufgrund von Symmetriegründen ( $k_{\parallel}$ -Erhaltung) hoch sein kann, führt Unordnung zu einer starken Reduktion der Injektionseffizienz. Da Spininjektion und spinabhängiges Tunneln verwandte Phänomene sind, liegt es nahe, das in [32] verwendete Modell auch zur Berechnung des TMR-Effekts zu verwenden.



**Abb. 5.1:** Tight-Binding-Modell zur Beschreibung von Unordnung an der Grenzfläche nach Kirczenow [32].

Zur Beschreibung des Ferromagneten benutzt Kirczenow ein Single-Band-Tight-Binding-Modell auf einem kubischen Gitter mit Gitterkonstante  $a$  und Wechselwirkung nur zwischen nächsten Nachbarn:

$$H = \sum_{i,\sigma} \epsilon_{i,\sigma} |i\sigma\rangle \langle i\sigma| - \sum_{i,j} t_{i,j} |i\sigma\rangle \langle j\sigma|$$

Dabei ist  $|i\sigma\rangle$  der Zustand für ein Teilchen mit Spin  $\sigma$  am Gitterplatz  $i$ . Die on-site Energien sind  $\epsilon_{\text{fm},\sigma}$  ( $\epsilon_{\text{hl}}$ ) für den Ferromagneten (Halbleiter) und die Hopping-Energien  $t_{\text{fm}}$  ( $t_{\text{hl}}$ ). Die on-site Energie  $\epsilon_{\text{hl}}$  im Halbleiter ist spinunabhängig, während der Ferromagnet durch ein Stoner-Modell beschrieben wird:  $\epsilon_{\text{fm},\uparrow/\downarrow} = \epsilon_{\text{fm},0} \mp f/2$ , mit Austauschspaltung  $f$ . An der Grenzfläche selbst wird der Anteil an Ferromagnet- bzw. Halbleiter-Gitterplätzen auf einer Länge  $d$  linear variiert, die Gitterplätze entsprechend dieser Verteilung zufällig besetzt (vgl. Abbildung 5.1). In diesem Interdiffusionsgebiet werden die on-site Energien zu  $\epsilon_{i,\uparrow/\downarrow} = \epsilon_{\text{hl}} \mp \alpha f/2$  oder  $\epsilon_{i,\uparrow/\downarrow} = \epsilon_{\text{fm},0} \mp \alpha f/2$  gewählt, je nachdem, ob es sich um einen Halbleiter- oder Ferromagnet-Gitterplatz handelt;  $\alpha$  ist dabei die Konzentration der ferromagnetischen Gitterplätze. Diese Annahme bedeutet, dass sich die Austauschspaltung der Majoritäts- und MinoritätsElektronen des Ferromagneten in dem gemischten Gebiet auch auf die Halbleiterplätze auswirkt und mit der Konzentration der Ferromagnet-Gitterplätze abnimmt. Man nimmt also eine linear abnehmende effektive Magnetisierung im Interdiffusionsgebiet an. Die Hopping-Matrixelemente im gemischten Bereich wählt man als  $t_{ij} = t_{\text{hl}}(t_{\text{fm}})$ , wenn die benachbarten Gitterplätze beide Halbleiterplätze (Ferromagnetplätze) sind, ansonsten wird das arithmetische Mittel  $t_{ij} = (t_{\text{fm}} + t_{\text{hl}})/2$  verwendet (vgl. Abbildung 5.1).

Ein ähnliches Modell wurde schon von Itoh *et al.* verwendet [34,35], um den Einfluss von Unordnung an der Grenzfläche auf das TMR-Verhältnis zu untersuchen. Im Gegensatz zu dem allgemeineren, von Kirczenow vorgestellten Modell wird dort der Hopping-Parameter sowohl für den Ferromagneten als auch für den Halbleiter gleich gewählt.

In Kapitel 4 wurde bereits für das dort betrachtete Modell gezeigt, dass zwei- und dreidimensionale Rechnungen vergleichbare Resultate ergeben. In Abbildung 5.2 wird das Ergebnis einer zweidimensionalen Rechnung im Kirczenow-Modell für die in [32] verwendeten Parameter<sup>1</sup> abgebildet. Qualitativ stimmen diese numerischen Resultate mit den von Kirczenow gefundenen überein, so dass die Verwendung eines zweidimensionalen Modells also auch in diesem Fall gerechtfertigt scheint.

$\epsilon_{\text{fm},\uparrow}$	$\epsilon_{\text{fm},\downarrow}$	$t_{\text{fm}}$	$\epsilon_{\text{hl}}$	$t_{\text{hl}}$
4	4.6554	1	60.64	14.93

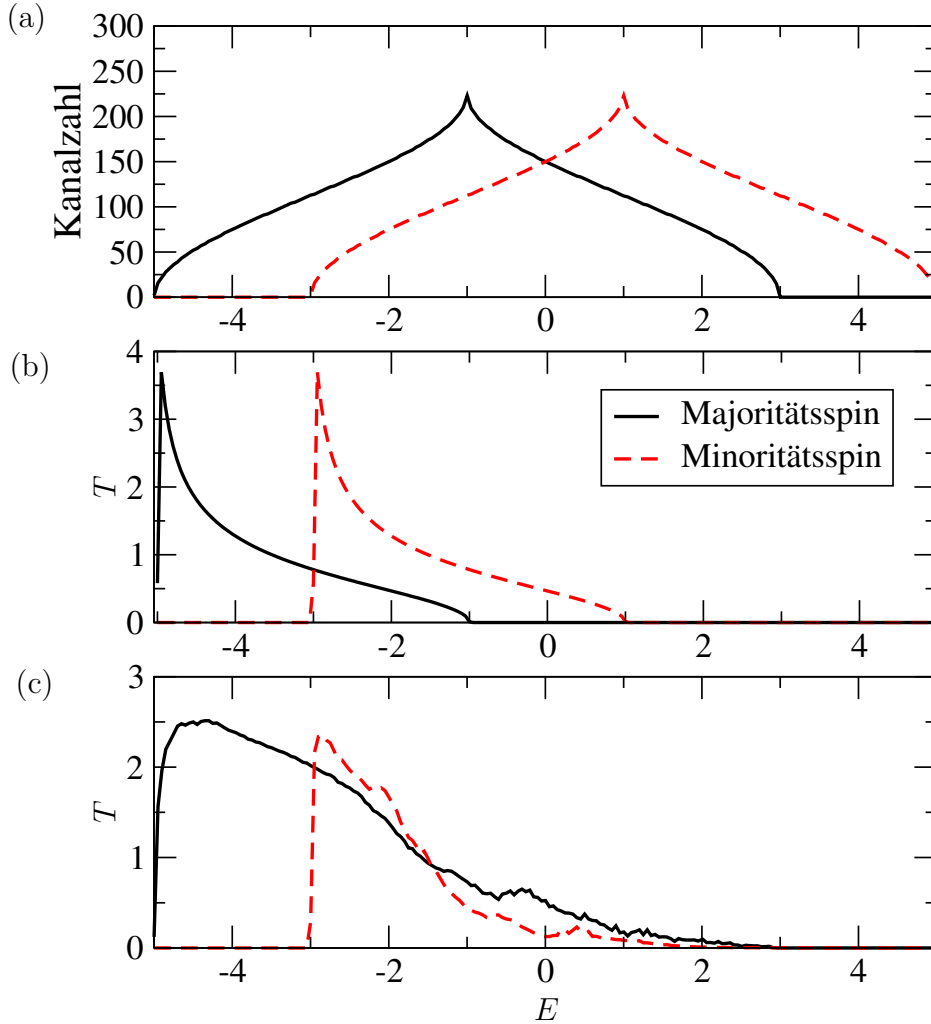
**Tabelle 5.1:** Im Kirczenow-Modell verwendete Tight-Binding-Parameter. Sie entsprechen den in Tabelle 3.2 angegebenen dimensionslosen Parametern für ein Fe/GaAs-System.

Um das Kirczenow-Modell auf den TMR-Effekt in einem Fe/GaAs/Fe-Tunnelelement anzuwenden, verwenden wir für die Tight-Binding-Parameter die aus Kapitel 3 bekannten Werte zur Annäherung an den Kontinuumsfall. Im homogen ausgedehnten Material weit weg von der Grenzfläche finden wir dann nahezu parabelförmige Bänder wie bisher. Die on-site Energie ist durch  $\epsilon_{\uparrow/\downarrow} = \frac{4}{m} + V_0 \mp \frac{\Delta}{2}$ , die Hopping-Energie durch  $t = \frac{1}{m}$  gegeben (siehe auch Anhang B). Damit ergeben sich die in Tabelle 5.1 gezeigten Werte für die Tight-Binding-Parameter.

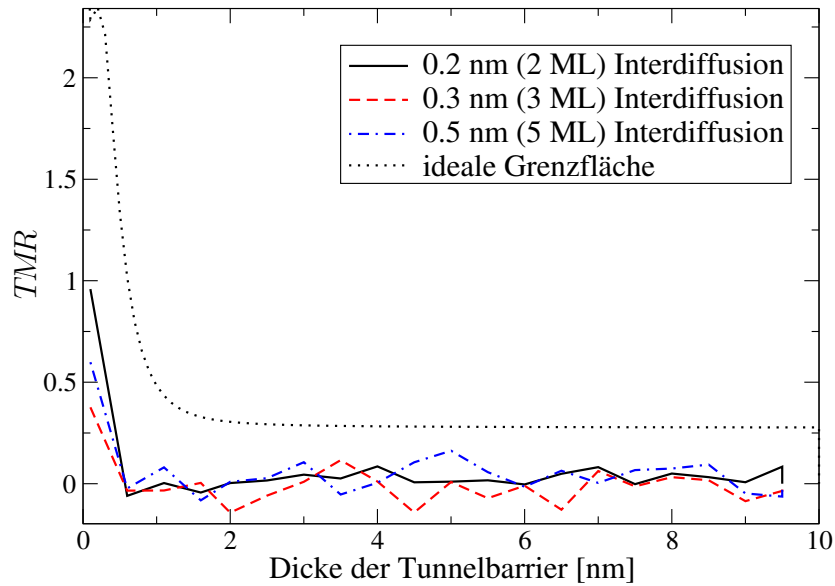
Die Berechnung des TMR-Effekts erfolgt wieder in einer zweidimensionalen Geometrie der Breite von 149 Gitterpunkten. Auf beiden Seiten der Tunnelbarriere wird im Rahmen des Kirczenow-Modells ein Bereich mit Mischung von Ferromagnet- und Halbleiter-Gitterplätzen eingeführt, um Interdiffusion an der Grenzfläche zu simulieren. Mit diesem Modell und den in Tabelle 5.1 aufgeführten Tight-Binding-Parametern findet man bereits bei lediglich 2 Monolagen (ML) Durchmischung ein weitgehendes Verschwinden des TMR-Effekts, wie in Abbildung 5.3 gezeigt ist. Dort ist das TMR-Verhältnis in Abhängigkeit von der Dicke der Tunnelbarriere aufgetragen. Wir sehen für verschiedene Dicken der Interdiffusionsregion ein ähnliches Verhalten, in jedem Fall wird der TMR-Effekt drastisch reduziert. Die Durchmischung der Gitterplätze an der Grenzfläche hat in diesem Modell also dramatische Auswirkungen auf den Tunnelmagnetowiderstand.

Das Kirczenow-Modell geht allerdings im Allgemeinen für  $a \rightarrow 0$  *nicht* in eine Kontinuumsbeschreibung über. Ein Vergleich mit einer Beschreibung durch ein freies Elektronengas, wie dem Bratkovsky-Modell, ist also nicht möglich. Wie in Abschnitt 2.4.1 gezeigt, führt eine Diskretisierung der Kontinuumsbeschreibung dazu, dass die on-site

<sup>1</sup>Es wurde lediglich der Wert für die Spin-Aufspaltung  $f$  etwas kleiner gewählt, da in einem zweidimensionalen Tight-Binding-Modell der erlaubte Energiebereich kleiner als in drei Dimensionen ist.



**Abb. 5.2:** Spininjektion in einen Halbleiter im Kirczenow-Modell in zwei Dimensionen. (a) zeigt die Kanalzahl in Abhängigkeit von der Fermi-Energie  $E$  für Majoritäts- und Minoritätselektronen. In (b) wird die Transmission durch eine geordnete und in (c) durch eine auf 8 Gitterlagen ungeordnete Grenzfläche gezeigt. Die verwendeten Parameter waren  $t_{\text{fm}} = 1$ ,  $t_{\text{hl}} = 1/2$ ,  $f = 2$ ,  $E - \epsilon_{\text{hl}} = 0.0041156$  (Die Zahl der Transportkanäle pro Spin im Halbleiter wird unabhängig von der Fermi-Energie konstant bei 6 gehalten) und  $\epsilon_{\text{fm},0} = -4$ . Die Breite des Systems betrug 225 Gitterplätze. Die Daten in (c) sind über 180 Unordnungs-konfigurationen gemittelt.



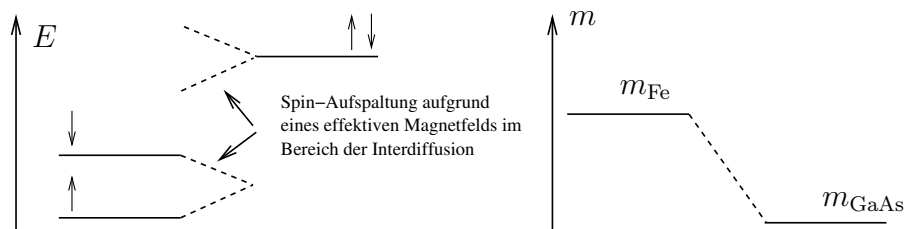
**Abb. 5.3:** TMR-Effekt im Kirczenow-Modell in Abhängigkeit von der Dicke der Tunnelbarriere. Die Ergebnisse für Interdiffusion an der Grenzfläche werden zusammen mit dem Ergebnis für eine geordnete Trennfläche dargestellt. Es wurde über jeweils 250 Unordnungs konfigurierungen gemittelt, die Breite des Systems betrug 149 Gitterpunkte.

Energie Terme mit der effektiven Masse der benachbarten Gitterplätze enthält. Im Kirczenow-Modell wird dagegen bei verschiedenartigen Nachbarn lediglich die Hopping-Energie durch das arithmetische Mittel der jeweiligen Hopping-Energien ersetzt. Es ist daher sinnvoll, eine Modifikation des Kirczenow-Modells zu entwickeln, die aus einer Kontinuumsbeschreibung hervorgeht.

## 5.2 TMR-Effekt in einem Modell mit Interpolation der effektiven Masse

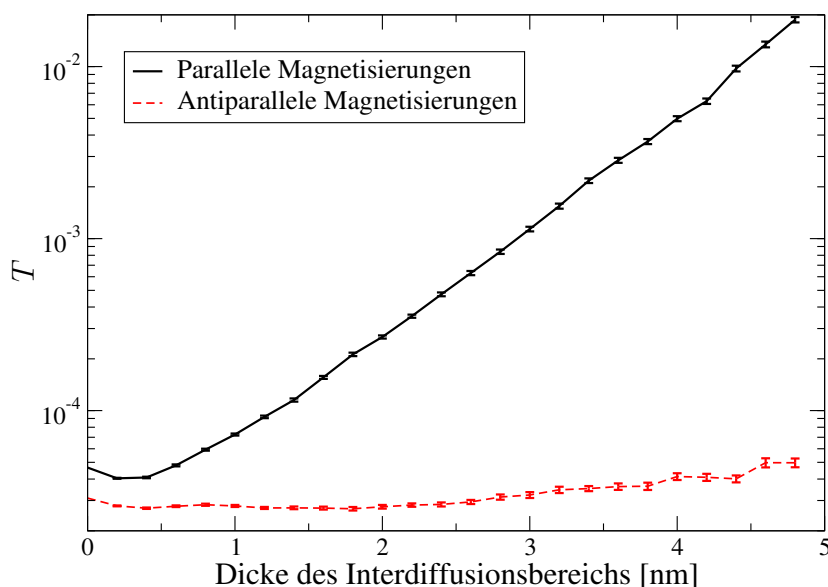
Zur Beschreibung des Bereichs mit Interdiffusion nehmen wir an, dass die effektive Masse in der durchmischten Region durch eine lineare Interpolation der effektiven Massen von Fe und GaAs gegeben ist (vgl. Abbildung 5.4). Dieses Konzept wurde erfolgreich in der Halbleiterphysik, beispielsweise für GaAs/AlGaAs-Quantentröge eingesetzt [79]. Die restlichen Annahmen des Kirczenow-Modells werden beibehalten: Die Abnahme der effektiven Magnetisierung über dem durchmischten Bereich und eine zufällige Verteilung der Halbleiter- und ferromagnetischen Plätze. Dabei wird für die einzelnen

Gitterplätze jeweils der entsprechende Bandursprung genommen. Im Fall gleicher effektiver Massen in Ferromagnet und Halbleiter stimmt diese Beschreibung mit dem Kirczenow-Modell überein.



**Abb. 5.4:** Modifikation des Kirczenow-Modells.

In der Simulation führen wir Interdiffusionsbereiche auf beiden Seiten der Tunnelbarriere so ein, dass die durchschnittliche Breite der Barriere nicht geändert wird, d. h. die Summe aus der Dicke eines durchmischten Bereichs und der ungestörten Tunnelbarriere wird konstant gehalten. Wählen wir die Dicke dieser Schichten gleich 0, so ergibt sich als Grenzfall das Bratkovsky-Modell und ein Vergleich mit unseren früheren Ergebnissen ist möglich.



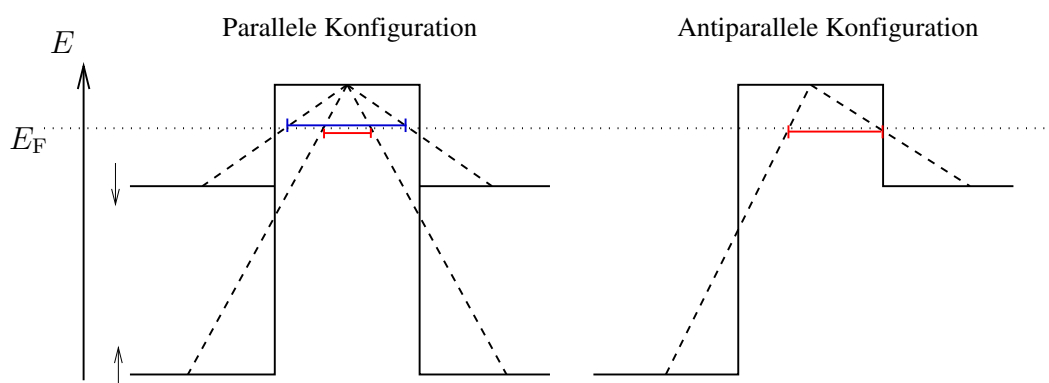
**Abb. 5.5:** Tunnelwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Dicke des Interdiffusionsbereichs. Dabei wurde die effektive Breite der Tunnelbarriere bei 5 nm konstant gehalten. Die Transmission wurde über 100 Unordnungs-konfigurationen gemittelt.

Eine Berechnung der Tunnelwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Dicke der Interdiffusionsregion liefert das in Abbildung 5.5 gezeigte Ergebnis. Die Transmission bei Antiparallelstellung bleibt bei wachsender Dicke des Interdiffusionsbereichs nahezu konstant, während der Tunnelstrom bei Parallelstellung der Magnetisierungen *exponentiell* anwächst. Damit steigt aber auch der TMR-Effekt exponentiell an. Wir finden also ganz im Gegensatz zu den im vorigen Abschnitt gewonnenen Ergebnissen, die eine drastische *Reduktion* des TMR-Verhältnisses bei zunehmender Durchmischung der Barrierengrenze vorhersagen, einen dramatischen *Anstieg* des TMR-Effekts bei wachsender Interdiffusion.

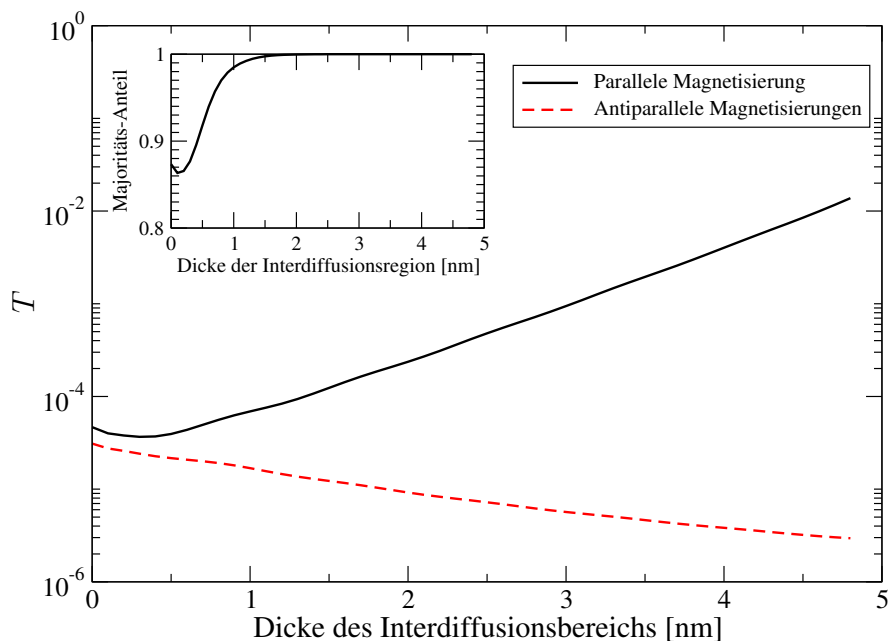
Um diesen gewaltigen Unterschied der Vorhersagen der beiden Modelle zu verstehen, muss berücksichtigt werden, dass Interdiffusion an der Grenzfläche die Barriere auf zwei verschiedene Arten beeinflusst. Diese beiden Effekte haben jeweils gegensätzliche Auswirkung auf das TMR-Verhältnis, wie im Folgenden gezeigt wird.

Zum einen wird durch die Durchmischung der Gitterplätze an der Grenzfläche *Unordnung* eingeführt. Wie wir in Kapitel 4 gezeigt haben, führt Unordnung an der Grenzfläche generell zu einer Reduzierung des TMR-Effekts.

Zum anderen wird aber auch die *Form* der Barriere verändert. Im Mittel bewirkt die Durchmischung ein Abschrägen der Barriere. Zwar bleibt die Barrierendicke im Mittel erhalten, für Elektronen mit einem kleinen transversalen Anteil  $k_{\parallel}$  des Wellenvektors — d. h. für nahezu senkrecht einfallende Elektronen — ergibt sich aber eine effektiv dünnere Tunnelbarriere. Damit wächst deren Transmission exponentiell an. Da sie aber aufgrund ihrer großen  $z$ -Komponente schon das größte Gewicht beim Tunnelprozess beitragen, erwarten wir einen exponentiellen Anstieg der gesamten Transmission. Wie in Abbildung 5.6 ersichtlich, ist dieser Effekt für die Majoritätselektronen bei Parallelstellung am größten, während er für die Minoritätselektronen bei Parallelstellung



**Abb. 5.6:** Die Tunnelbarriere wird durch die Interdiffusion an der Grenzfläche abgeschrägt.



**Abb. 5.7:** Transmission durch eine Barriere mit abgeschrägten Kanten. Im eingebetteten Graph ist der Anteil der Majoritätselektronen an der Transmission bei Parallelstellung der Magnetisierungen für zunehmendes Abschrägen der Barriere gezeigt.

und generell bei Antiparallelstellung der Magnetisierungen schwächer ausfällt.

Um diese Ausführungen zu bestätigen, wiederholen wir die Berechnung der Transmission nun für den Fall einer abgeschrägten Barriere ohne Unordnung. Wie in Abbildung 5.7 zu sehen ist, finden wir tatsächlich einen exponentiellen Anstieg der Transmission im parallelen Fall. Mit zunehmendem Abschrägen der Barriere tragen dabei die Majoritätselektronen, wie erwartet, immer stärker zur gesamten Tunnelwahrscheinlichkeit bei. Dies ist im eingebetteten Graph in Abbildung 5.7 gezeigt. Für den Fall antiparalleler Magnetisierungen finden wir sogar eine Abnahme der Transmission.

Der TMR-Effekt ist also sehr empfindlich auf die Form der Tunnelbarriere. Dies wurde bereits in [78] beobachtet. Dort wurde gezeigt, dass der Tunnelmagnetowiderstand durch eine geeignete Änderung der Barrierenform verringert werden kann. Die Ergebnisse dieses Abschnitts zeigen, dass eine Formänderung auch zu einer drastischen Erhöhung des TMR-Verhältnisses führen kann.

Damit haben wir zwei Effekte identifiziert, die konkurrierenden Einfluss auf das TMR-Verhältnis haben: Zum einen Unordnung, die dazu tendiert, den TMR-Effekt zu verringern, zum anderen eine Formänderung der Barriere, die das TMR-Verhältnis ver-

größert.

Im Kirczenow-Modell beträgt der Unterschied der on-site Energien benachbarter Gitterplätze bis zu  $\sim 56$  (in dimensionslosen Einheiten), da der Ausdruck für die Energie den Term  $\frac{4}{m}$  enthält. Da die on-site Energie in der Interdiffusionsregion denselben Wert annimmt wie im homogen ausgedehnten Material, ergibt sich aufgrund der stark unterschiedlichen effektiven Massen von Fe und GaAs dieser große Unterschied. Dagegen ist der Unterschied benachbarter Gitterplätze im zweiten Modell maximal der Unterschied in den Bandursprüngen von Fe und GaAs, also 0.94 in dimensionslosen Einheiten, da für eine Gitterlage dieselbe interpolierte effektive Masse für Fe- und GaAs-Gitterplätze angenommen wurde. Damit ist die im Kirczenow-Modell vorhandene Unordnung viel stärker als im zweiten Modell. Daher dominiert der Effekt der Unordnung im Kirczenow-Modell und führt zu einer starken Reduktion des TMR-Verhältnisses. Dagegen wird der TMR-Effekt in der in diesem Abschnitt vorgestellten Beschreibung von der Formänderung der Barriere bestimmt und nimmt mit wachsender Interdiffusion zu.

In [34, 35] wurde in jeweils einer Gitterlage auf beiden Seiten der Barriere die Konzentration der Barrierengitterplätze erhöht. Dabei wird zunehmend Unordnung eingeführt, aber auch die effektive Barrierendicke erhöht und gleichzeitig ein Abschrägen der Barriere bewirkt. Itoh *et al.* finden dabei in ihren Tight-Binding-Rechnungen für kleine Fermi-Energien — d. h. nahe am Kontinuumslimites — eine Zunahme des TMR-Effekts bis zu einer Konzentration der Barrierenplätze von 50%, danach sinkt das TMR-Verhältnis wieder. Die Autoren machen den gestreuten Anteil der Transmission für den Anstieg verantwortlich. Da bei einer Konzentration von 50% aber auch das Abschrägen der Barriere am größten ist und für die betrachteten Barrierendicken 10% der gesamten Barriere ausmacht, ist auch eine Formänderung der Barriere als Grund für den beobachteten Anstieg des TMR-Effekts denkbar.

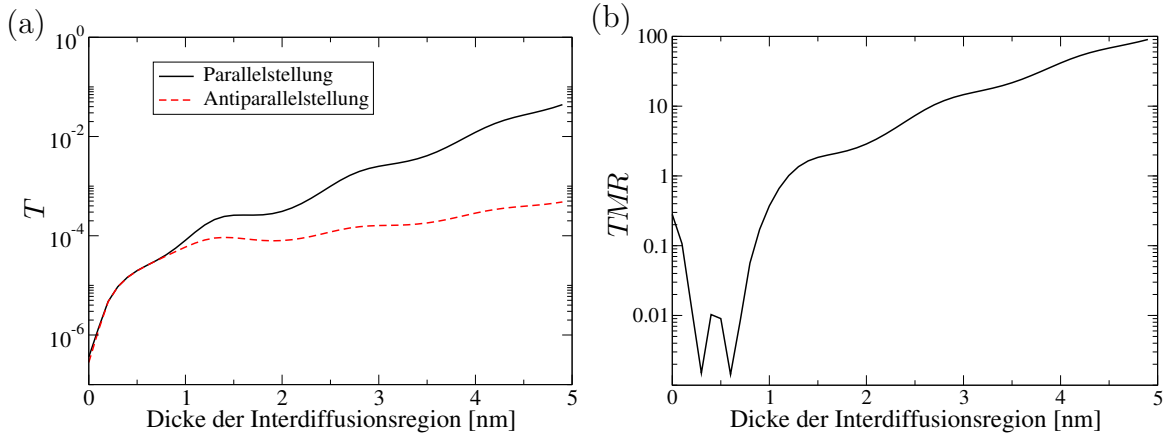
Der berechnete Wert des TMR-Verhältnisses ist also extrem modellabhängig. Bei der Modellierung des Tunnelements muss nicht nur Unordnung, sondern auch die effektive Form der Barriere als wichtiger Parameter berücksichtigt werden.

### 5.3 TMR-Effekt in der *virtual crystal approximation*

Zum Abschluss dieses Kapitels präsentieren wir noch ein drittes Modell zur Beschreibung des TMR-Effekts.

Das im vorherigen Abschnitt vorgestellte Modell beschreibt die Interdiffusion an der Grenzfläche mit Hilfe einer linearen Interpolation der effektiven Massen. Wie bereits erwähnt, wurde dieses Konzept beispielsweise auch zur Modellierung von AlAs/GaAs/-AlAs-Quantentrögen benutzt. Spätere Modelle verwendeten empirische Tight-Binding-

Modelle und die *virtual crystal approximation* (VCA) zur Beschreibung der Interdiffusion an den Grenzflächen des Quantentrogs [80, 81]. Die *virtual crystal approximation* ist eine *mean-field*-Beschreibung der Tight-Binding-Parameter in Abhängigkeit von der Konzentration  $x$  der unterschiedlichen Komponenten.



**Abb. 5.8:** (a) Transmission und (b) TMR-Verhältnis in der *virtual crystal approximation* in Abhängigkeit von der Dicke der Interdiffusionsregion.

Wir können die VCA auch formal auf unser Tight-Binding-Modell anwenden. Ist die Konzentration der Fe-Gitterplätze in einer Schicht  $i$   $x(i)$ , so sind die Tight-Binding-Parameter durch

$$\begin{aligned} \epsilon_{i,\sigma} &= x(i) \epsilon_{\text{fm},\sigma} + (1 - x(i)) \epsilon_{\text{hl}} \quad \text{und} \\ t_{ij} &= \frac{1}{2} (x(i) + x(j)) t_{\text{fm}} + \left( 1 - \frac{1}{2} (x(i) + x(j)) \right) t_{\text{hl}} \end{aligned}$$

gegeben. Dieses Modell ist also ähnlich zu dem aus dem vorherigen Abschnitt. Tatsächlich wird auch hier eine nahezu exponentielle Zunahme der Transmission im Fall paralleler Magnetisierungen der Zuleitungen und ein deutlich langsamerer Anstieg im antiparallelen Fall mit der Dicke der Interdiffusionsregion beobachtet (vgl. Abbildung 5.8 (a)). Allerdings finden wir auch einen Bereich, in dem der TMR-Effekt verschwindet, bevor die im vorigen Abschnitt beobachtete exponentielle Zunahme einsetzt.

Dies ist eine weitere Bestätigung der bereits zuvor getroffenen Aussage, das TMR-Verhältnis sei sehr modellabhängig.

## 5.4 Zusammenfassung

Wie die Ausführungen dieses Kapitels gezeigt haben, kann der TMR-Effekt sehr stark modellabhängig sein. Im Kirczenow-Modell wird eine drastische Reduktion des TMR-Effekts beobachtet, ein Modell mit einer linearen Interpolation der effektiven Masse in dem gemischten Bereich zeigt dagegen einen exponentiellen Anstieg des TMR-Verhältnisses. In einer *mean-field*-Beschreibung im Rahmen der VCA finden wir sowohl Reduktion als auch Erhöhung des Tunnelmagnetowiderstandseffekts.

Wir haben diese Unterschiede durch die verschiedenen Einflüsse von Unordnung und von Änderung der Form der Tunnelbarriere erklärt: Unordnung tendiert dazu, den TMR-Effekt abzuschwächen, ein Abschrägen der Barriere kann zu einem Anstieg des TMR-Verhältnisses führen. Eine naive Anwendung eines der Modelle kann also zu unzuverlässigen Schlussfolgerungen führen.

Die Beschreibung des Tunnelmagnetowiderstandseffekts im Rahmen eines Freien-Elektronengas-Modells oder eines Single-Band-Tight-Binding-Modells stößt hier an ihre Grenzen.



# Kapitel 6

## Zusammenfassung und Ausblick

Der Tunnelmagnetowiderstandseffekt besitzt technologisch vielversprechende Anwendungen und bietet auch auf theoretischer Seite interessante Herausforderungen. Während das Verhalten amorpher Barrieren oftmals zufrieden stellend mit dem einfachen Juillièrè-Modell [10] erklärt werden kann, wird gerade an einer epitaktisch gewachsenen GaAs-Barriere eine große Diskrepanz zwischen Experiment und Theorie gefunden. Sowohl einfache, auf einer Beschreibung mit einem freien Elektronengas basierende Modelle [29, 30] als auch Bandstrukturbetrachtungen [24] sagen für ein Fe/GaAs/Fe-Tunnelement ein TMR-Verhältnis voraus, das um eine Größenordnung höher als der experimentell beobachtete Wert von  $0.21 - 1.7\%$  ist [26, 27]. Experimentelle Ergebnisse legen dabei den Schluss nahe, dass Unordnung an den Grenzflächen der Barriere eine Reduktion des TMR-Effekts bewirkt.

In dieser Arbeit wurde daher der Einfluss von Unordnung auf den Tunnelmagnetowiderstandseffekt in einem Fe/GaAs/Fe-Tunnelement untersucht. Dazu wurde auf Basis des Bratkovsky-Modells [30] eine phänomenologische Beschreibung einer ungeordneten Barriere entwickelt und das TMR-Verhältnis numerisch berechnet. Dabei sind wir wie folgt vorgegangen:

In Kapitel 2 wurde ein allgemeiner Formalismus zu Berechnung des spinabhängigen Leitwerts eines Systems vorgestellt, das aus verschiedenen magnetischen und nicht-magnetischen Materialien besteht. Dabei benutzten wir eine Beschreibung mit einer ortsabhängigen effektiven Masse unter Verwendung des BenDaniel-Duke-Hamiltonians [51]. Magnetische Materialien wurden mit Hilfe des Stoner-Modells beschrieben [31]. Zur Beschreibung von Unordnung erweiterten wir das in [38] verwendete Störstellenmodell um Spin-Flip-Streuung. Mit diesem phänomenologischen Modell können beliebige experimentell bekannte mittlere freie Weglängen und Spin-Flip-Längen reproduziert werden.

Zur Berechnung des Leitwerts verwendeten wir den wohl bekannten Landauer-Formalismus [39, 40] und die Fisher-Lee-Relation [41], um die Transmissionsamplitude mit der Green'schen Funktion des Systems zu verknüpfen. Wir erweiterten den bereits in [38, 63] verwendeten numerischen Algorithmus, um ihn auf unser Modell anwenden zu können. Dazu wurde die kontinuierliche Schrödinger-Gleichung diskretisiert und eine Tight-Binding-Beschreibung des Systems eingeführt. Die Green'sche Funktion dieser Beschreibung konnte dann durch die Methode der rekursiven Green-Funktion numerisch bestimmt werden [42]. Schließlich zeigten wir, wie dieser Algorithmus effizient implementiert werden konnte und untermauerten seine Zuverlässigkeit durch Reproduktion bekannter Ergebnisse.

Dieser allgemeine Formalismus wurde im Lauf dieser Arbeit dann zur Berechnung von Tunnelwiderständen verwendet. Es sei aber betont, dass der vorgestellte Algorithmus nicht auf Tunnelphänomene beschränkt ist, sondern den Leitwert eines jeden Systems mit beliebiger Form des Potentials und der effektiven Masse und beliebigen äußeren Feldern berechnen kann.

Danach stellten wir einige Modelle zur Beschreibung einer idealen Tunnelbarriere vor. Zuerst wurde die Verwendung eines Stoner-Modells für Fe durch die Argumente von Stearns gerechtfertigt [9]. Nach einem kurzen Überblick über das Juillièrè-Modell [10] wurde das Slonczewski- bzw. Bratkovsky-Modell vorgestellt [29, 30], das später um Unordnung erweitert wurde. Dabei fanden wir, dass keines dieser Modelle das geringe TMR-Verhältnis des Experiments beschreiben kann. Schließlich zeigten wir, dass eine Erweiterung des Bratkovsky-Modells um ein Magnetfeld in der Barriere zumindest teilweise die experimentell beobachtete Magnetfeldabhängigkeit des Tunnelwiderstands bei hohen Feldern erklären kann. Die numerischen Ergebnisse liegen dabei näher an den experimentellen Werten als frühere Vorhersagen von Eaves [28].

Im vierten Kapitel untersuchten wir systematisch den Einfluss von Unordnung auf den TMR-Effekt. Dabei wurden zunächst lediglich in einem kleinen Bereich auf beiden Seiten der Tunnelbarriere Störstellen eingeführt. Wir fanden eine Zunahme der Transmission durch die Barriere mit wachsender Unordnung, die bei Antiparallelstellung stärker als bei Parallelstellung der Magnetisierungen ausfiel. Damit ergab sich auch eine Reduktion des TMR-Verhältnisses. Als Ursache dieses Effekts konnte die Aufhebung der  $k_{||}$ -Erhaltung identifiziert werden. Sowohl bei Spin erhaltender als auch Spin-Flip-Streuung fanden wir eine kosinusförmige Abhängigkeit des Leitwerts für eine Verdrehung der Magnetisierungen der Fe-Zuleitungen, wie sie auch im Experiment beobachtet wurde [75]. Überraschenderweise führten sowohl Spin erhaltende als auch bei Spin-Flip-Streuung zu einer beinahe identischen Reduktion des TMR-Effekts. Einfache Überlegungen legten nahe, dass Spin-Flip-Streuung zu einer effektiveren Reduktion des TMR-Effekts führen würde [10, 26]. Als mögliche Ursache dieses Ergebnisses wurde die geringe Tunnelwahrscheinlichkeit  $T \ll 1$  genannt. Wir konnten außerdem zeigen,

dass Störstellen umso effizienter eine Verkleinerung des TMR-Verhältnisses bewirken können, je näher sie sich an der Tunnelbarriere befinden.

Bei der Betrachtung des TMR-Effekts kleiner Nano-Tunnelemente wurde bei einigen Exemplaren eine Inversion des TMR-Verhältnisses gefunden. Dies wurde auch experimentell in [76] gefunden und dort mit Unordnung in der Barriere erklärt. Unsere Ergebnisse zeigen, dass auch Unordnung außerhalb der Tunnelbarriere zu ähnlichen Effekten führen kann.

Des Weiteren wurde der Einfluss von Unordnung in der Tunnelbarriere selbst untersucht. Dabei fanden wir in qualitativer Übereinstimmung mit [33] ebenfalls eine Reduktion des TMR-Effekts. Diese war wieder für Spin erhaltende und Spin-Flip-Streuung von ähnlicher Stärke. Wir konnten auch zeigen, dass an den Rändern der Barriere konzentrierte Störstellen zu einer effizienten Verringerung des TMR-Verhältnisses führen, vergleichbar mit einer gänzlich ungeordneten Barriere.

Schließlich führten wir Rechnungen an dreidimensionalen Systemen durch, die die zuvor an zweidimensionalen Systemen gewonnenen Ergebnisse qualitativ bestätigten. Die dabei verwendeten Gitter waren um einen Faktor 5 – 10 größer als bei bisher durchgeführten Tight-Binding-Rechnungen.

Wir haben also gezeigt, dass Unordnung an der Grenzfläche generell dazu tendiert, eine Reduktion des Tunnelmagnetowiderstandseffekts zu bewirken. Streuung an Störstellen wurde damit als wichtiger Mechanismus beim Tunnelvorgang identifiziert. Dies weist darauf hin, dass Modelle, die auf einem idealen System basieren, nicht in der Lage sein werden, die derzeit bekannten Experimente an Fe/GaAs/Fe-Tunnelementen zu beschreiben. Unsere Rechnungen legen eine signifikante Verringerung des TMR-Verhältnisses durch Störstellen nahe, wir fanden eine Reduktion um bis zu 80% im Vergleich zu einer idealen Barriere bei physikalisch plausiblen Unordnungsstärken.

In Kapitel 5 wurden einige Möglichkeiten zur Modellierung von Interdiffusion an den Grenzflächen betrachtet. Im Vergleich zum vorherigen Kapitel wurde dabei auch eine Änderung der Form der Tunnelbarriere durch Interdiffusion berücksichtigt. Dabei verglichen wir ein Single-Band-Tight-Binding-Modell (SBTB), das von Kirczenow vorgeschlagen wurde [32], eine Modifizierung dieses Modells, die auf einer linearen Interpolation der effektiven Massen in der Interdiffusionsregion beruht, und eine Beschreibung in der *virtual crystal approximation* [81]. Dabei fanden wir eine starke Modellabhängigkeit des berechneten TMR-Verhältnisses.

Dies konnte dadurch erklärt werden, indem zwei konkurrierende Einflüsse auf den Tunnelmagnetowiderstandseffekt identifiziert wurden: Unordnung, die eine Verringerung des TMR-Verhältnisses bewirkt, und eine Formänderung der Barriere, die zu einer drastischen Erhöhung des TMR-Effekts führen kann. Je nach Modell kann einer dieser Effekte überwiegen. Eine naive Anwendung eines der Modelle kann dann zu irreführenden Schlussfolgerungen führen. SBTB-Modelle und die Beschreibung im Rahmen eines freien Elektronengas-Modells stoßen hier an ihre Grenzen.

Wir haben damit Unordnung als einen wichtigen Faktor beim Tunnelprozess identifiziert. Ein erfolgreiches Modell zur Beschreibung des TMR-Effekts in diesen Systemen muss deshalb Streuprozesse berücksichtigen. Unordnung an den Grenzflächen der Barriere kann ein möglicher Grund für den geringen Wert des TMR-Verhältnisses sein, der im Experiment beobachtet wird.

Dennoch bleiben einige Fragen offen. Zum einen ist es nahezu unmöglich, die Stärke der Unordnung in der Simulation mit einer experimentellen Situation in Verbindung zu bringen. In unserem Störstellenmodell ist lediglich die mittlere freie Weglänge, die sich in einer ausgedehnten Region mit Störstellenstreuung ergeben würde, ein Maß für die Stärke der Unordnung, die wir nur in einem kleinen Bereich an der Barrieregrenze einführen. Damit ist zwar eine Abschätzung, aber kein direkter Vergleich möglich. Es sei dabei nochmals betont, dass das eingeführte Tight-Binding-Gitter aus der Diskretisierung der Schrödingergleichung stammt und einzelne Gitterpunkte *nicht* mit atomaren Gitterplätzen verwechselt werden dürfen. Daher war es uns auch nicht möglich, eine Abschätzung für die Stärke der Störstellen in der Tunnelbarriere selbst zu geben, da eine Bestimmung der mittleren freien Weglänge in dieser Situation keinen Sinn macht. Zum anderen lagen die von uns berechneten TMR-Verhältnisse immer noch bei ca. 8 – 10%, also etwas größer als im Experiment beobachtet. Eine Erweiterung unseres Modells, das auf einer Beschreibung durch ein freies Elektronengas mit einer ortsabhängigen effektiven Masse basiert, erscheint also wünschenswert.

Wie im fünften Kapitel gezeigt, kann die Verwendung von einfachen Modellen wie SBTB-Modellen oder unsere Beschreibung mit einem parabelförmigen Band zu irreführenden Schlussfolgerungen führen. Eine naheliegende Erweiterung ist somit die Verwendung eines empirischen Tight-Binding-Modells mit mehreren Orbitalen pro Gitterplatz zur Beschreibung der Bandstruktur der Materialien, anstatt eines Modells mit nur einem Band. Auf diese Weise können Bandstruktureffekte berücksichtigt werden, ohne auf *ab-initio*-Rechnungen zurückgreifen zu müssen. Derartige Modelle wurden bereits in [82, 83] verwendet, allerdings an idealen, epitaktischen Systemen. Es wird allerdings für eine erfolgreiche Beschreibung des TMR-Effekts essentiell sein, auch ungeordnete Systeme zu betrachten. Wie Sanvito für den GMR-Effekt in Ferromagnet/Metall-Schichtsystemen gezeigt hat (z. B. [84]), sollte dies in einem empirischen Tight-Binding-Modell in vertretbarer Rechenzeit möglich sein. Tatsächlich kann die in dieser Arbeit verwendete Methode der rekursiven Green-Funktion auch für Modelle mit mehreren Orbitalen pro Gitterplatz verwendet werden, es ändert sich lediglich die Struktur der dabei auftretenden Matrizen.

Eine weitere mögliche Erweiterung dieser Arbeit liegt jenseits des TMR-Effekts in der Beschreibung von Spininjektion bei kohärentem Transport. Da unser Formalismus nicht auf Tunnelphänomene beschränkt ist, können beispielsweise auch Systeme mit dotierten Halbleitern und Schottky-Barrieren an der Grenze zwischen Ferromagnet

und Halbleiter untersucht werden. Damit ist eine in sich geschlossene Beschreibung der Spininjektion durch eine Tunnelbarriere in einen Halbleiter, von der man sich eine Erhöhung der Injektionseffizienz verspricht [21], möglich. Es gab bereits Untersuchungen von quantenmechanischen Effekten beim spinabhängigen Transport in Geometrien, ähnlich dem Spin-Feldeffekt-Transistor nach Datta und Das [85–87]. Keine dieser Arbeiten berücksichtigte jedoch Unordnung, die in realen Systemen immer vorhanden sein wird. Eine Erweiterung unseres Formalismus auf solche Systeme ist unproblematisch (vgl. Abschnitt 4.3).

Allerdings stellt sich die Frage, ob die Benutzung eines einfachen Stoner-Modells zur Beschreibung eines Ferromagneten im Fall von diffusivem Transport noch gerechtfertigt ist. Die Argumente von Stearns galten nur für Tunnelphänomene [9]. Zwar wird in der Literatur [85–87] stets das Stoner-Modell verwendet, es ist jedoch nicht auszuschließen, dass im Ferromagneten auch andere Bänder als die  $s$ -artigen erheblich zum Transport beitragen<sup>1</sup>. Daher könnte es sinnvoller sein, auch diese Phänomene im Rahmen eines empirischen Tight-Binding-Modells zu beschreiben. Für erste, qualitative Aussagen könnte unser Modell jedoch genügen.

Wir hatten gefunden, dass in unserer Beschreibung Spin-Flip-Streuung zu einer ähnlichen Reduktion des TMR-Effekts führt wie vergleichbar starke Spin erhaltende Streuung. Dabei sei erinnert, dass in dem in dieser Arbeit verwendeten Modell ein Spin-Flip immer auch von einer starken Impulsstreuung begleitet wird. Dies ist eine gute Beschreibung für die Streuung an magnetischen Störstellen, Magnonenstreuung wird dagegen weniger gut erfasst. Es ist daher nicht auszuschließen, dass Streuung an Magnonen zu einer effizienteren Verringerung des TMR-Verhältnisses führen könnte, als in dieser Arbeit gefunden.

Außerdem zeigt es sich, dass der im Experiment gefundene exponentielle Abfall des TMR-Effekts mit der angelegten Spannung [23] nicht in einem einfachen Modell, wie es von uns verwendet wurde, erklärt werden kann [88]. Das Fehlen von inelastischen Prozessen in einem Modell, das für kleine Spannungen ausgelegt wurde, lässt dies auch nicht erwarten. Es erscheint daher wünschenswert, eine Nichtgleichgewichts-Beschreibung des TMR-Effekts zu entwickeln, in der Streuung an Magnonen und andere inelastische Effekte berücksichtigt werden. Das Bratkovsky-Modell könnte wiederum Ausgangspunkt einer derartigen Beschreibung sein.

Es bieten sich also vielfältige Möglichkeiten, eine weitergehende Beschreibung des TMR-Effekts in Fe/GaAs/Fe-Tunnelsystemen zu entwickeln. Dieses scheinbar einfache System enthält noch viel bisher nicht verstandene Physik.

---

<sup>1</sup>Ein Hinweis darauf liefert die Beobachtung, dass die Polarisation der *Elektronendichten*  $n_{\uparrow,\downarrow}$  in einem Stonermodell viel höher ist, als die Polarisation der spinabhängigen Leitfähigkeiten  $\sigma_{\uparrow,\downarrow} = \frac{n_{\uparrow,\downarrow} e^2 \tau}{m^*}$  im Experiment.



# Anhang A

## Das Störstellenmodell

Das Störstellenpotential in  $d$  Dimensionen

$$U_{\text{St}}(\vec{x}) = U_{\text{elast}}(\vec{x}) + U_{\text{sf}}(\vec{x})$$

besteht aus einem Anteil  $U_{\text{elast}}(\vec{x})$  ohne und aus einem Anteil  $U_{\text{sf}}(\vec{x})$  mit Spin-Flips. Dabei ist

$$U_{\text{elast}} = \sum_{i=1}^N \bar{U}_i \delta(\vec{x} - \vec{R}_i),$$
$$U_{\text{sf}}(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N \bar{\varepsilon}_i \vec{m}_i \cdot \vec{\sigma} \delta(\vec{x} - \vec{R}_i), \quad \vec{m}_i = \vec{m}(\theta_i, \phi_i) = \begin{pmatrix} \sin \theta_i \cos \phi_i \\ \sin \theta_i \sin \phi_i \\ \cos \theta_i \end{pmatrix}$$

mit  $\bar{U}_i = U_i \epsilon^d$ ,  $\bar{\varepsilon}_i = \varepsilon_i \epsilon^d$ , wobei  $\epsilon$  die „effektive Breite“ der Störstellen ist. Die Parameter des Potentials werden zufällig gemäß den Wahrscheinlichkeitsverteilungen

$$P_{\text{elast}}(\vec{R}_1, U_1, \dots, \vec{R}_N, U_N) = \prod_{i=1}^N P_R(\vec{R}_i) P_U(U_i) \text{ und}$$

$$P_{\text{sf}}(\vec{R}_1, \varepsilon_1, \theta_1, \phi_1, \dots, \vec{R}_N, \varepsilon_N, \theta_N, \phi_N) = \prod_{i=1}^N P_R(\vec{R}_i) P_\varepsilon(\varepsilon_i) P_{\vec{m}}(\theta_i, \phi_i)$$

gewählt. Dabei ist

$$P_R(\vec{R}_i) = \frac{1}{V(d)},$$
$$P_U(U_i) = \begin{cases} \frac{1}{2U_0} & \text{für } -U_0 \leq U_i \leq U_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases},$$

$$P_\varepsilon(\varepsilon_i) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon_0} & \text{für } -\varepsilon_0 \leq \varepsilon_i \leq \varepsilon_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{und}$$

$$P_{\vec{m}}(\theta_i, \phi_i) = \frac{\sin \theta_i}{4\pi}.$$

Im Folgenden berechnen wir die statistischen Eigenschaften dieses Modells und leiten Ausdrücke für die Streuraten ab.

## A.1 Statistische Eigenschaften des Störstellenmodells

In [38] wurde bereits gezeigt, dass

$$\langle U_{\text{elast}}(\vec{x}) \rangle = 0 \quad \text{und} \quad (\text{A.1})$$

$$\langle U_{\text{elast}}(\vec{x}) U_{\text{elast}}(\vec{x}') \rangle = \frac{N}{V(d)} \frac{\bar{U}_0^2}{3} \delta(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (\text{A.2})$$

Für  $U_{\text{sf}}(\vec{x})$  ergibt sich offenbar<sup>1</sup>:

$$\langle \langle s | U_{\text{sf}}(\vec{x}) | s' \rangle \rangle_{\text{St}} = 0 \quad (\text{A.3})$$

und

$$\begin{aligned} \langle \langle s | U_{\text{sf}}(\vec{x}) | s' \rangle \langle s' | U_{\text{sf}}(\vec{x}') | s \rangle \rangle_{\text{St}} &= \left\langle \sum_{i,j} \bar{\varepsilon}_i \bar{\varepsilon}_j \langle s | \vec{m}(\theta_i, \phi_i) \cdot \vec{\sigma} | s' \rangle \langle s' | \vec{m}(\theta_j, \phi_j) \cdot \vec{\sigma} | s \rangle \right\rangle_{\text{St}} \\ &= \int d\varepsilon_1 d\theta_1 d\phi_1 d^d R_1 \dots \int d\varepsilon_N d\theta_N d\phi_N d^d R_N P_\varepsilon(\varepsilon_1) P_{\vec{m}}(\theta_1, \phi_1) P_R(\vec{R}_1) \dots \\ &\quad P_\varepsilon(\varepsilon_N) P_{\vec{m}}(\theta_N, \phi_N) P_R(\vec{R}_N) \sum_{i,j} \bar{\varepsilon}_i \bar{\varepsilon}_j \langle s | \vec{m}(\theta_i, \phi_i) \cdot \vec{\sigma} | s' \rangle \langle s' | \vec{m}(\theta_j, \phi_j) \cdot \vec{\sigma} | s \rangle \\ &\quad \delta(\vec{x} - \vec{R}_i) \delta(\vec{x}' - \vec{R}_j) = \\ &= N \int d\varepsilon_1 d\theta_1 d\phi_1 d^d R_1 \dots \int d\varepsilon_N d\theta_N d\phi_N d^d R_N P_\varepsilon(\varepsilon_1) P_{\vec{m}}(\theta_1, \phi_1) P_R(\vec{R}_1) \dots \\ &\quad P_\varepsilon(\varepsilon_N) P_{\vec{m}}(\theta_N, \phi_N) P_R(\vec{R}_N) \sum_j \bar{\varepsilon}_1 \bar{\varepsilon}_j \langle s | \vec{m}(\theta_1, \phi_1) \cdot \vec{\sigma} | s' \rangle \langle s' | \vec{m}(\theta_j, \phi_j) \cdot \vec{\sigma} | s \rangle \\ &\quad \delta(\vec{x} - \vec{R}_i) \delta(\vec{x}' - \vec{R}_j) = \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Dabei soll wieder für  $s$  die Konvention  $\uparrow \equiv +1$  und  $\downarrow \equiv -1$  gelten

$$\begin{aligned}
&= N \int d\varepsilon_1 d\theta_1 d\phi_1 d^d R_1 \frac{1}{V^{(d)}} \frac{1}{2\varepsilon_0} \frac{\sin(\theta_1)}{4\pi} \bar{\varepsilon}_1^2 |\langle s | \vec{m}(\theta_1, \phi_1) \cdot \vec{\sigma} | s' \rangle|^2 \delta(\vec{x} - \vec{R}_1) \delta(\vec{x}' - \vec{R}_1) + \\
&\quad N \sum_{j \neq 1} \int \underbrace{d\varepsilon_1 \frac{\bar{\varepsilon}_1}{2\varepsilon_0} \bar{\varepsilon}_j}_{=0} \cdots = \\
&= \frac{N}{V^{(d)}} \frac{\bar{\varepsilon}_0^2}{3} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \frac{1}{4\pi} \int d\theta_1 d\phi_1 |\langle s | \vec{m}(\theta_1, \phi_1) \cdot \vec{\sigma} | s' \rangle|^2 \sin(\theta).
\end{aligned}$$

Dabei findet man unabhängig von der Wahl der Quantisierungsrichtung des Spins:

$$\frac{1}{4\pi} \int d\theta_1 d\phi_1 |\langle s | \vec{m}(\theta_1, \phi_1) \cdot \vec{\sigma} | s \rangle|^2 = \frac{1}{3} \quad \text{und}$$

$$\frac{1}{4\pi} \int d\theta_1 d\phi_1 |\langle s | \vec{m}(\theta_1, \phi_1) \cdot \vec{\sigma} | -s \rangle|^2 = \frac{2}{3}.$$

Da  $U_{\text{elast}}$  und  $U_{\text{sf}}$  unabhängige Zufallsgrößen sind, ergibt sich für das vollständige Störstellenpotential

$$\langle \langle s | U_{\text{St}}(\vec{x}) | s' \rangle \rangle_{\text{St}} = 0, \quad (\text{A.4})$$

$$\langle \langle s | U_{\text{St}}(\vec{x}) | s \rangle \langle s | U_{\text{St}}(\vec{x}') | s \rangle \rangle_{\text{St}} = \frac{N}{V^{(d)}} \frac{\bar{U}_0^2 + \frac{1}{3} \bar{\varepsilon}_0^2}{3} \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad \text{und} \quad (\text{A.5})$$

$$\langle \langle s | U_{\text{St}}(\vec{x}) | -s \rangle \langle -s | U_{\text{St}}(\vec{x}') | s \rangle \rangle_{\text{St}} = \frac{N}{V^{(d)}} \frac{2}{3} \frac{\bar{\varepsilon}_0^2}{3} \delta(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (\text{A.6})$$

## A.2 Streuraten

Zur Berechnung der Streuraten betrachten wir ein Stoner-Modell mit effektiver Masse  $m^*$  und Austauschspaltung  $\Delta$  in  $d$  räumlichen Dimensionen. Der Majoritätsspin ist  $\uparrow$ , die Minoritätsladungsträger haben Spin  $\downarrow$ . Damit ist die Energie für ein Elektron mit Spin  $s$  und Wellenvektor  $\vec{k}$  durch  $E_s(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_0 - s \frac{\Delta}{2}$  gegeben. Mit Fermis goldener Regel [44] und Mittelung über die Freiheitsgrade des Störstellenpotentials können dann die Streuraten bestimmt werden.

Damit ist die Streuraten für Spin erhaltende Streuung wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tau_{\vec{k}, s \rightarrow s}} &= \left\langle \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{k}'} \left| \langle \vec{k}, s | U_{\text{St}} | \vec{k}', s \rangle \right|^2 \delta(E_s(k) - E_s(k')) \right\rangle_{\text{St}} \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V^{(d)}}{(2\pi)^d} \int d^d k' \left\langle \langle \vec{k}, s | U_{\text{St}} | \vec{k}', s \rangle \langle \vec{k}', s | U_{\text{St}} | \vec{k}, s \rangle \right\rangle_{\text{St}} \delta(E_s(k) - E_s(k'))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V^{(d)}}{(2\pi)^d} \int d^d k' \int d^d x \int d^d x' \delta(E_s(k) - E_s(k')) \\
&\quad \left\langle \frac{1}{\sqrt{V^{(d)}}} e^{i\vec{k}\vec{x}} \langle s | U_{\text{St}}(\vec{x}) | s \rangle \frac{1}{\sqrt{V^{(d)}}} e^{-i\vec{k}'\vec{x}} \frac{1}{\sqrt{V^{(d)}}} e^{i\vec{k}'\vec{x}'} \langle s | U_{\text{St}}(\vec{x}') | s \rangle \frac{1}{\sqrt{V^{(d)}}} e^{-i\vec{k}\vec{x}'} \right\rangle_{\text{St}} \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^d V^{(d)}} \int d^d k' \delta(E_s(k) - E_s(k')) \int d^d x \int d^d x' \\
&\quad e^{i(\vec{k}\vec{x} - \vec{k}'\vec{x} - \vec{k}\vec{x}' + \vec{k}'\vec{x}')} \underbrace{\langle \langle s | U_{\text{St}}(\vec{x}) | s \rangle \langle s | U_{\text{St}}(\vec{x}') | s \rangle \rangle_{\text{St}}}_{\frac{N}{V^{(d)}} \frac{\bar{U}_0^2 + \frac{1}{3}\bar{\epsilon}_0^2}{3} \delta(\vec{x} - \vec{x}')} \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^d V^{(d)}} \frac{N}{V^{(d)}} \frac{\bar{U}_0^2 + \frac{1}{3}\bar{\epsilon}_0^2}{3} \underbrace{\int d^d x \int d^d k' \delta(E_s(k) - E_s(k'))}_{V^{(d)}}
\end{aligned}$$

Dabei ist  $\frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k' \delta(E_s(k) - E_s(k')) = D_s^{(d)}(E_s(k) - E_s(k'))$ .  $D_s^{(d)}$  ist die  $d$ -dimensionale Zustandsdichte für *eine* Spinrichtung und gegeben durch

$$D_s^{(d)}(E) = \begin{cases} \frac{\sqrt{m^*}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{E}} & \text{in 1D,} \\ \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} & \text{in 2D und} \\ \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} & \text{in 3D.} \end{cases}$$

Die Streurrate für Spin erhaltende Streuung ist also<sup>2</sup>

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}, s \rightarrow s}} = \begin{cases} \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar^2} \frac{N}{V^{(1)}} \frac{\bar{U}_0^2 + \frac{1}{3}\bar{\epsilon}_0^2}{3} \frac{1}{\sqrt{E_s(k) - E_0 + s\frac{\Delta}{2}}} & \text{in 1D,} \\ \frac{m^*}{\hbar^3} \frac{N}{V^{(2)}} \frac{\bar{U}_0^2 + \frac{1}{3}\bar{\epsilon}_0^2}{3} & \text{in 2D und} \\ \frac{(2m^*)^{\frac{3}{2}}}{2\pi\hbar^4} \frac{N}{V^{(3)}} \frac{\bar{U}_0^2 + \frac{1}{3}\bar{\epsilon}_0^2}{3} \sqrt{E_s(k) - E_0 + s\frac{\Delta}{2}} & \text{in 3D.} \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Eine analoge Rechnung ergibt für die Spin-Flip-Streurate

$$\frac{1}{\tau_{\vec{k}, s \rightarrow -s}} = \begin{cases} \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar^2} \frac{N}{V^{(1)}} \frac{2}{3} \frac{\bar{\epsilon}_0^2}{3} \frac{1}{\sqrt{E_s(k) - E_0 - s\frac{\Delta}{2}}} & \text{in 1D,} \\ \frac{m^*}{\hbar^3} \frac{N}{V^{(2)}} \frac{2}{3} \frac{\bar{\epsilon}_0^2}{3} & \text{in 2D und} \\ \frac{(2m^*)^{\frac{3}{2}}}{2\pi\hbar^4} \frac{N}{V^{(3)}} \frac{2}{3} \frac{\bar{\epsilon}_0^2}{3} \sqrt{E_s(k) - E_0 - s\frac{\Delta}{2}} & \text{in 3D.} \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

<sup>2</sup>Der von uns berechnete Ausdruck für die Streurrate ohne Spin-Flip in zwei Dimensionen unterscheidet sich von dem in [38] angegebenen Ausdruck (2.33) um einen Faktor 2. Dort wurde die Zustandsdichte für *beide* Spinrichtungen verwendet. In [38] wurde deshalb in der Tight-Binding-Näherung eine „effektive Breite“ der Störstellen  $\epsilon \approx 0.846 a$  eingeführt. Da dieser Term im Ausdruck der Streurrate in der Form  $(\epsilon/a)^4 \approx 0.5$  auftritt, fällt der überflüssige Faktor 2 in den späteren Rechnungen von [38] weg. In unserem Fall ist in der Tight-Binding-Näherung einfach  $\epsilon = a$ .

# Anhang B

## Tight-Binding-Näherung des Hamiltonoperators

### B.1 Diskretisierung des Hamiltonoperators

Der Hamiltonoperator

$$H = \frac{1}{2}(-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A}(\vec{x}))\frac{1}{m(\vec{x})}(-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A}(\vec{x})) + \frac{g}{2}\mu_B\vec{B}(\vec{x}) \cdot \vec{\sigma} + \vec{M} \cdot \vec{\sigma} \frac{\Delta}{2} + U_{\text{ext}}(\vec{x}) + U_{\text{St}}(\vec{x}) \quad (\text{B.1})$$

soll in diskretisierter Form geschrieben werden.

Dazu wird  $H\psi(\vec{x})$  betrachtet. Wir führen ein einfach kubisches Gitter mit Gitterkonstante  $a$  ein und wollen  $H\psi(\vec{x})$  durch die Werte an den diskreten Raumpunkten  $\vec{x}_i$  approximieren. Die lokalen Terme im Hamiltonoperator stellen dabei kein Problem dar, lediglich der kinetische Anteil in (B.1) muss näher betrachtet werden. Er lautet

$$\begin{aligned} H_{\text{kin}} &= \frac{1}{2}(-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A}(\vec{x}))\frac{1}{m^*(\vec{x})}(-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A}(\vec{x})) \\ &= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2}\vec{\nabla}\frac{1}{m(\vec{x})}\vec{\nabla}\psi(\vec{x})}_{(1)} \underbrace{-i\hbar e\vec{A}(\vec{x})\frac{1}{m(\vec{x})}\vec{\nabla}\psi(\vec{x}) - \frac{i\hbar e}{2}\psi(\vec{x})\vec{\nabla}\left(\vec{A}(\vec{x})\frac{1}{m(\vec{x})}\right)}_{(2)} \\ &\quad + \underbrace{e^2\vec{A}(\vec{x})^2\frac{1}{2m(\vec{x})}\psi(\vec{x})}_{(3)}. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Wir vernachlässigen den Term (3) ( $\sim e^2\vec{A}^2$ ), da er klein gegenüber den übrigen Termen ist.

Unter Verwendung der symmetrischen Naherungsformel fur die Ableitung

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \frac{f(x+a) - f(x-a)}{2a} + \mathcal{O}(a^2) \quad (\text{B.3})$$

bzw.

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} = \frac{f(x+\frac{a}{2}) - f(x-\frac{a}{2})}{a} + \mathcal{O}(a^2) \quad (\text{B.4})$$

und der aus

$$f(x+a) = f(x) + \frac{\partial f}{\partial x} a + \mathcal{O}(a^2)$$

und

$$f(x-a) = f(x) - \frac{\partial f}{\partial x} a + \mathcal{O}(a^2)$$

folgenden Naherungsformel

$$f(x) = \frac{1}{2} (f(x+a) + f(x-a)) + \mathcal{O}(a^2) \quad (\text{B.5})$$

konnen wir nun die Terme (1) und (2) diskretisieren. Die Rechnung ist fur alle drei Koordinatenachsen gleich. Wir beschranken uns daher auf die  $x$ -Achse und unterdrucken in unserer Notation  $y$  und  $z$ .

Der Term (1) ergibt dann unter Verwendung von (B.3)

$$\begin{aligned} (1) &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) \\ &\approx -\frac{\hbar^2}{2a} \left[ \left( \frac{1}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) \Big|_{x+\frac{a}{2}} - \left( \frac{1}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) \Big|_{x-\frac{a}{2}} \right] \\ &\approx -\frac{\hbar^2}{2a} \left[ \frac{1}{m(x+\frac{a}{2})} \frac{\psi(x+\frac{a}{2}+\frac{a}{2}) - \psi(x+\frac{a}{2}-\frac{a}{2})}{a} \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{m(x-\frac{a}{2})} \frac{\psi(x-\frac{a}{2}+\frac{a}{2}) - \psi(x-\frac{a}{2}-\frac{a}{2})}{a} \right] \\ &\approx +\frac{\hbar^2}{2a^2} \left[ \left( \frac{1}{m(x+\frac{a}{2})} + \frac{1}{m(x-\frac{a}{2})} \right) \psi(x) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{m(x+\frac{a}{2})} \psi(x+a) - \frac{1}{m(x-\frac{a}{2})} \psi(x-a) \right]. \end{aligned}$$

Ebenso erhält man unter Verwendung von (B.3) und (B.4) für den Ausdruck (2)

$$\begin{aligned}
(2) &= -i\hbar e \left( A_x(x) \frac{1}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) + \frac{1}{2} \psi(x) \frac{\partial}{\partial x} \left( A_x(x) \frac{1}{m(x)} \right) \right) \\
&\approx -i\hbar e \left( A_x(x) \frac{1}{m(x)} \frac{\psi(x+a) - \psi(x-a)}{2a} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \psi(x) \frac{A_x(x+\frac{a}{2}) \frac{1}{m(x+\frac{a}{2})} - A_x(x-\frac{a}{2}) \frac{1}{m(x-\frac{a}{2})}}{a} \right) \\
&\approx -i \frac{\hbar e}{2a} \left( A_x(x) \frac{1}{m(x)} \psi(x+a) - A_x(x) \frac{1}{m(x)} \psi(x-a) \right. \\
&\quad \left. + A_x(x+\frac{a}{2}) \frac{1}{m(x+\frac{a}{2})} \psi(x) - A_x(x-\frac{a}{2}) \frac{1}{m(x-\frac{a}{2})} \psi(x) \right).
\end{aligned}$$

Unter Verwendung von (B.5) setzen wir

$$\psi(x) \approx \frac{1}{2} (\psi(x+a) + \psi(x-a))$$

und

$$A_x(x) \frac{1}{m(x)} \approx \frac{1}{2} \left( A_x(x+\frac{a}{2}) \frac{1}{m(x+\frac{a}{2})} + A_x(x-\frac{a}{2}) \frac{1}{m(x-\frac{a}{2})} \right)$$

in den obigen Ausdruck ein und erhalten schließlich

$$(2) \approx -i \frac{\hbar e}{2a} \left( A_x(x+\frac{a}{2}) \frac{1}{m(x+\frac{a}{2})} \psi(x+a) - A_x(x-\frac{a}{2}) \frac{1}{m(x-\frac{a}{2})} \psi(x-a) \right).$$

Wir fassen nun (1) und (2) zusammen und erhalten

$$\begin{aligned}
(1)+(2) &\approx \frac{\hbar^2}{2a^2} \left[ \left( \frac{1}{m(x+\frac{a}{2})} + \frac{1}{m(x-\frac{a}{2})} \right) \psi(x) \right. \\
&\quad - \frac{1}{m(x+\frac{a}{2})} \left( 1 + i 2\pi \frac{a A_x(x+\frac{a}{2})}{\phi_0} \right) \psi(x+a) \\
&\quad \left. - \frac{1}{m(x-\frac{a}{2})} \left( 1 - i 2\pi \frac{a A_x(x-\frac{a}{2})}{\phi_0} \right) \psi(x-a) \right].
\end{aligned}$$

Dabei ist  $\phi_0 = h/e$  das Flussquantum. Für  $2\pi \frac{a A_x(x \pm \frac{a}{2})}{\phi_0} \ll 1$  kann die Ersetzung

$$1 \pm i 2\pi \frac{a A_x(x \pm \frac{a}{2})}{\phi_0} \approx e^{\pm i 2\pi \frac{a A_x(x \pm \frac{a}{2})}{\phi_0}}$$

<sup>1</sup>Dies ist gleichbedeutend damit, die Gitterkonstante  $a$  so klein zu wählen, dass der magnetische Fluss  $\phi$  durch eine Fläche  $a^2$  viel kleiner als das Flussquantum ist:  $\phi \ll \phi_0$ . Es ist nämlich  $\phi = a^2 B = \oint \vec{A} \cdot d\vec{s} \approx a A$  [63].

durchgefuhrt werden. Fuhrt man die in Abschnitt 2.4.1 definierten dimensionslosen Groen  $\tilde{H} = \frac{2m_e a^2}{\hbar^2} H$  und  $\tilde{m}(x) = m(x)/m_e$  ein, so erhalt man damit fur den kinetischen Anteil des Hamiltonoperators in  $x$ -Richtung

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{kin}}^x \psi(x) &= \left( \frac{1}{\tilde{m}(x + \frac{a}{2})} + \frac{1}{\tilde{m}(x - \frac{a}{2})} \right) \psi(x) \\ &\quad - \frac{1}{\tilde{m}(x + \frac{a}{2})} e^{+i2\pi \frac{aA_x(x + \frac{a}{2})}{\phi_0}} \psi(x + a) \\ &\quad - \frac{1}{\tilde{m}(x - \frac{a}{2})} e^{-i2\pi \frac{aA_x(x - \frac{a}{2})}{\phi_0}} \psi(x - a). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Unter Verwendung von  $\tilde{H}_{\text{kin}}^x \psi(x) = \langle x | \tilde{H}_{\text{kin}}^x | \psi \rangle$  kann die Tight-Binding-Form von (B.6) ablesen

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{\text{kin}}^x &= \sum_x \left[ \left( \frac{1}{\tilde{m}(x + \frac{a}{2})} + \frac{1}{\tilde{m}(x - \frac{a}{2})} \right) |x\rangle \langle x| \right. \\ &\quad - \frac{1}{\tilde{m}(x + \frac{a}{2})} e^{+i2\pi \frac{aA_x(x + \frac{a}{2})}{\phi_0}} |x\rangle \langle x + a| \\ &\quad \left. - \frac{1}{\tilde{m}(x - \frac{a}{2})} e^{-i2\pi \frac{aA_x(x - \frac{a}{2})}{\phi_0}} |x\rangle \langle x - a| \right] \\ &= \sum_x \left[ \left( \frac{1}{\tilde{m}(x + \frac{a}{2})} + \frac{1}{\tilde{m}(x - \frac{a}{2})} \right) |x\rangle \langle x| \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\tilde{m}(x + \frac{a}{2})} e^{+i2\pi \frac{aA_x(x + \frac{a}{2})}{\phi_0}} |x\rangle \langle x + a| - h.c. \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

$|x\rangle$  ist der Ortseigenzustand der  $x$ -Koordinate eines Gitterpunkts. Der im Lauf der Diskretisierung entstehende Tight-Binding-Hamiltonoperator ist automatisch hermitesch<sup>2</sup>

Den gesamten kinetischen Anteil des Hamiltonian erhalt man nun einfach durch Summation der Beitrage in die entsprechenden Koordinatenrichtungen. Damit ist also

$$\tilde{H}_{\text{kin}}^{1\text{D}} = \tilde{H}_{\text{kin}}^x,$$

$$\tilde{H}_{\text{kin}}^{2\text{D}} = \tilde{H}_{\text{kin}}^x + \tilde{H}_{\text{kin}}^y \quad \text{und}$$

$$\tilde{H}_{\text{kin}}^{3\text{D}} = \tilde{H}_{\text{kin}}^x + \tilde{H}_{\text{kin}}^y + \tilde{H}_{\text{kin}}^z.$$

<sup>2</sup>Der in [63] abgeleitete Tight-Binding-Hamiltonian war dies nicht. Dort musste ein langsam variierendes  $\vec{A}$ -Feld angenommen werden, so das  $A_x(x+a) \approx A_x(x)$ , um einen hermiteschen Operator zu erhalten.

## B.2 Das Störstellenmodell in Tight-Binding-Näherung

Im Abschnitt 2.2 wurde ein Störstellenmodell vorgestellt, bei dem an zufällig ausgewählten Punkten  $\vec{R}_i$  deltaförmige Störstellen gesetzt wurden.

Ersetzt man den kontinuierlichen Raum durch ein diskretes Gitter, so sind die Orte der Störstellen nicht mehr zufällig. Wir zeigen aber anhand des Beispiels von  $U_{\text{elast}}$ , dass sich auch in diesem Fall im Kontinuumsmlimes die statistischen Eigenschaften (2.6) und (2.7) ergeben. Analog lässt sich dies auch für  $U_{\text{sf}}$  zeigen.

In der Tight-Binding-Näherung wählen wir an jedem Gitterpunkt unabhängig das Störstellenpotential aus  $[-U_0/2, +U_0/2]$  mit einer uniformen Wahrscheinlichkeitsverteilung. Da ein symmetrischer Wertebereich verwendet wird, ist (2.6) damit automatisch erfüllt. Die Korrelationsfunktion  $\langle U_{\text{elast}}(\vec{x}_i) U_{\text{elast}}(\vec{x}_j) \rangle_{\text{St}}$  des Störstellenpotentials ist dann 0 für  $\vec{x}_i \neq \vec{x}_j$ , da das Potential an jedem Gitterpunkt unabhängig von den anderen Gitterpunkten gewählt wird. Bei  $\vec{x}_i = \vec{x}_j$  findet man für die Korrelationsfunktion  $\frac{U_0^2}{3}$ . Damit ist

$$\langle U_{\text{elast}}(\vec{x}_i) U_{\text{elast}}(\vec{x}_j) \rangle_{\text{St}} = \frac{U_0^2}{3} \delta_{\vec{x}_i, \vec{x}_j} .$$

Besetzt man nicht jeden Gitterpunkt  $\vec{x}_i$  mit einer Störstelle, sondern wählt die Gitterpunkte mit einer Wahrscheinlichkeit  $p = N_{\text{St}}/N_{\text{Gitter}}$ , wobei  $N_{\text{St}}$  die Zahl der Störstellen und  $N_{\text{Gitter}}$  die Zahl der Gitterpunkte ist, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle U_{\text{elast}}(\vec{x}_i) U_{\text{elast}}(\vec{x}_j) \rangle_{\text{St}} &= p \frac{U_0^2}{3} \delta_{\vec{x}_i, \vec{x}_j} \\ &= \frac{N_{\text{St}}}{N_{\text{Gitter}}} \frac{(U_0 a^d)^2}{3} \frac{1}{a^d} \delta_{\vec{x}_i, \vec{x}_j} \\ &\stackrel{a \rightarrow 0}{=} \frac{N_{\text{St}}}{V(d)} \frac{\bar{U}_0^2}{3} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_j) , \end{aligned}$$

wenn die effektive Breite der Störstellen  $\epsilon$  mit  $a$  identifiziert wird.



# Anhang C

## Green-Funktion der Zuleitungen

### C.1 Tight-Binding-Wellenfunktionen

Wir betrachten ein eindimensionales System mit konstanter Masse  $m^*$ . In Tight-Binding-Näherung ist dann

$$\tilde{H} = \sum_x \frac{2}{\tilde{m}} |x\rangle\langle x| - \frac{1}{\tilde{m}} |x\rangle\langle x+a| - \frac{1}{\tilde{m}} |x+a\rangle\langle x| .$$

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung  $(E - H)\psi = 0$  ist dann gegeben durch (siehe auch [62]):

$$\psi(x) \propto e^{ikx} ,$$

mit der Energiedispersion

$$\tilde{E}(k) = \frac{2}{\tilde{m}} - \frac{2}{\tilde{m}} \cos(ka) . \quad (\text{C.1})$$

Der Wellenvektor  $k$  ist auf den Bereich  $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$  eingeschränkt.

Im Folgenden sollen einige spezielle Randbedingungen betrachtet werden:

**Teilchen in Box (*harte Wände*)** Wir wählen die Randbedingungen

$$\psi(0) = 0 \quad \text{und} \quad \psi((M+1)a) = 0 . \quad (\text{C.2})$$

Damit finden wir

$$k = \frac{p\pi}{(M+1)a} \quad \text{mit} \quad p = 1, \dots, M . \quad (\text{C.3})$$

Die Wellenfunktion des Teilchens ist somit

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{M+1}} \sin\left(\frac{p\pi}{(M+1)a}x\right), \quad (\text{C.4})$$

und aus Gleichung (C.1) folgt für die Energieeigenwerte

$$\tilde{E}_p = \frac{2}{\tilde{m}} - \frac{2}{\tilde{m}} \cos\left(\frac{p\pi}{(M+1)}\right). \quad (\text{C.5})$$

Die Tight-Binding-Wellenfunktion ist dabei so normiert, dass  $\sum_x |\psi(x)|^2 = 1$ <sup>1</sup>.  $|\psi(x)|^2$  gibt also die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen auf dem Gitterplatz  $x$  zu finden.

Es sei darauf hingewiesen, dass mit den Randbedingungen (C.2) die Wellenfunktion  $\psi$  nur auf  $M$  Gitterpunkten von 0 verschieden ist, die Breite des Systems jedoch  $(M+1)a$  beträgt.

**Periodische Randbedingungen** Wir betrachten nun die periodische Randbedingung

$$\psi(x + Ma) = \psi(x). \quad (\text{C.6})$$

Dann ist

$$k = \frac{p2\pi}{Ma} \quad \text{mit} \quad p = \text{Int}\left[-\frac{M}{2} + 1\right], \dots, \text{Int}\left[\frac{M}{2}\right]. \quad (\text{C.7})$$

Die Wellenfunktion ist

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{M}} e^{ikx} \quad (\text{C.8})$$

mit den Energieeigenwerten

$$\tilde{E}_p = \frac{2}{\tilde{m}} - \frac{2}{\tilde{m}} \cos\left(\frac{p2\pi}{M}\right) \quad (\text{C.9})$$

**Halboffene Box** Zuletzt wählen wir die Randbedingung

$$\psi(x_0) = 0 \quad (\text{C.10})$$

Damit erhält man die Wellenfunktion

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(k(x - x_0)) \quad (\text{C.11})$$

---

<sup>1</sup>Damit ist auch die Wahrscheinlichkeitsdichte der kontinuierlichen Wellenfunktion  $|\psi^{\text{kont}}|^2$  richtig normiert:  $\sum_x |\psi(x)|^2 = \sum_x a \frac{1}{a} |\psi(x)|^2 = \int dx |\psi^{\text{kont}}(x)|^2$ , mit  $\psi^{\text{kont}}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\psi(x)$ .

und die Energiedispersion

$$\tilde{E}(k) = \frac{2}{\tilde{m}} - \frac{2}{\tilde{m}} \cos(ka) , \quad (\text{C.12})$$

wobei nun  $k \in [0, \frac{\pi}{a})$ .

Die Wellenfunktion ist so normiert, dass die Vollständigkeitsrelation  $\int dk \psi_k(x) \psi_k(x') = \delta_{x,x'}$  erfüllt ist.

## C.2 Oberflächen-Green-Funktion

In diesem Abschnitt soll die Green'sche Funktion einer homogenen Zuleitung berechnet werden. Wir folgen dabei [89].

Wir betrachten ein Tight-Binding-System mit einer konstanten effektiven Masse  $\tilde{m}$ . Es enthalte in transversaler ( $y, z$ -)Richtung endlich viele Gitterpunkte und in longitudinaler ( $x$ -)Richtung alle Abschnitte  $-\infty < x < x_0$  (*linke* Zuleitung) bzw.  $x_0 < x < \infty$  (*rechte* Zuleitung). Da die Rechnungen für die linke und rechte Zuleitung analog verlaufen, beschränken wir uns hier auf die Berechnung der Green'schen Funktion der linken Zuleitung. Das Ergebnis für die Oberflächen-Green-Funktion gilt dann auch für die rechte Zuleitung.

Die Schrödingergleichung kann in einem homogenen System durch Separation gelöst werden:

$$\psi(x, j) = \psi^{\text{long}}(x) \psi^{\text{trans}}(j) |s\rangle ,$$

wobei  $\psi^{\text{long}}(x)$  der longitudinale und  $\psi^{\text{trans}}(j)$  der transversale Anteil der Wellenfunktion ist.  $j$  bezeichnet hier alle Koordinaten in transversaler Richtung — d. h.  $j = y$  in zwei Dimensionen und  $j = (y, z)$  in drei Dimensionen.  $|s\rangle$  ist ein Spineigenzustand.  $\psi^{\text{long}}(x)$  ist dann durch die Wellenfunktion einer halboffenen Box gegeben,  $\psi^{\text{trans}}(j)$  durch die Randbedingungen in transversaler Richtung. Die gesamte Wellenfunktion lautet damit:

$$\psi_{k,p,s}(x, j) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(k(x - x_0)) \cdot \psi_p(j) |s\rangle . \quad (\text{C.13})$$

Dabei bezeichnet  $p$  die Quantenzahlen und  $\psi_p(j)$  die Wellenfunktion der transversalen Moden. Der Eigenwert der Energie ist dann

$$\tilde{E}_{p,s}(k) = \frac{2}{\tilde{m}} - \frac{2}{\tilde{m}} \cos(ka) + \tilde{E}_{p,s} . \quad (\text{C.14})$$

$\tilde{E}_{p,s}$  ist der Energieanteil der transversalen Moden und kann auch einen spinabhängigen Term, z. B. eine Austauschspaltung  $\tilde{\Delta}$  enthalten. Die Green'sche Funktion der

Zuleitung kann damit durch

$$G(x, j; x', j'; \tilde{E}) = \sum_{k,p,s} \frac{\psi_{k,p,s}(x, j) \psi_{k,p,s}^\dagger(x', j')}{\tilde{E} - \tilde{E}_{p,s}(k) + i\eta} \quad (\text{C.15})$$

berechnet werden. Die Green-Funktion ist dabei eine  $2 \times 2$ -Matrix.

Für den numerischen Algorithmus aus Abschnitt 2.4 benötigen wir nur die *Oberflächen-Green-Funktion*  $G(x_0 - a, j; x_0 - a, j'; \tilde{E})$ . Diese kann nun berechnet werden:

$$\begin{aligned} G(x_0 - a, j; x_0 - a, j'; \tilde{E}) &= \sum_{k,p,s} \frac{\psi_{k,p,s}(x_0 - a, j) \psi_{k,p,s}^\dagger(x_0 - a, j')}{\tilde{E} - \tilde{E}_{p,s}(k) + i\eta} \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{k,p,s} \frac{\sin(ka) \psi_p(j) |s\rangle \sin(ka) \psi_p^*(j') \langle s|}{\tilde{E} - \frac{2}{\tilde{m}} + \frac{2}{\tilde{m}} \cos(ka) - \tilde{E}_{p,s} + i\eta} \\ &= \frac{2\tilde{m}}{\pi} \sum_{p,s} \psi_p(j) \psi_p^*(j') |s\rangle \langle s| \int_0^\pi d(ka) \frac{\sin^2(ka)}{\tilde{m}\tilde{E} - 2 + 2\cos(ka) - \tilde{m}\tilde{E}_{p,s} + i\eta} \\ &= \frac{2\tilde{m}}{\pi} \sum_{p,s} \psi_p(j) \psi_p^*(j') |s\rangle \langle s| \int_0^\pi \frac{\sin^2(ka)}{Q_s + 2\cos(ka) + i\eta} , \end{aligned}$$

mit  $Q_s = \tilde{m}\tilde{E} - 2 - \tilde{m}\tilde{E}_{p,s}$ . Dabei ist stets der Grenzfall  $\eta \rightarrow 0$  zu nehmen. Das Integral

$$F(Q) = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \frac{\sin^2(ka)}{Q + 2\cos(ka) + i\eta}$$

kann durch komplexe Integration gelöst werden und man erhält

$$F(Q) = \begin{cases} Q/2 - i\sqrt{1 - (Q/2)^2} & \text{für } |Q| \leq 0 , \\ Q/2 - \sqrt{(Q/2)^2 - 1} & \text{für } Q > 2 , \\ Q/2 + \sqrt{(Q/2)^2 - 1} & \text{für } Q < -2 . \end{cases} \quad (\text{C.16})$$

Das Ergebnis für die Oberflächen-Green-Funktion ist damit

$$G(j, j'; E) = \tilde{m} \sum_p \psi_p(j) \psi_p^*(j') \sum_s F(Q_s) |s\rangle \langle s| . \quad (\text{C.17})$$

# Literaturverzeichnis

- [1] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert., F. N. van Dau und F. Petroff. Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).
- [2] C. Tsang, R. E. Fontana, T. Lin, D. E. Heim *et al.*. IEEE Trans. Mag. **30**, 3801 (1994).
- [3] M. Schulz. Nature **399**, 729 (1999).
- [4] P. S. Peercy. Nature **406**, 1023 (2000).
- [5] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrmann, J. M. Daughton *et al.*. Science **294**, 1488 (2001).
- [6] L. M. K. Vandersypen, R. Hanson, L. H. W. van Beveren, J. M. Elzerman *et al.*. Quantum computing with electron spins in quantum dots. Quant-ph/0207059.
- [7] P. M. Tedrow und R. Meservey. Phys. Rev. Lett. **26**, 192 (1971).
- [8] P. Tedrow und R. Meservey. Phys. Rev. B **7**, 318 (1973).
- [9] M. B. Stearns. J. Mag. Mag. Mat. **5**, 167 (1977).
- [10] M. Julliere. Physics Letters **54A**, 225 (1975).
- [11] J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong und R. Meservey. Phys. Rev. Lett. **74**, 3273 (1994).
- [12] E. Y. Tsymbal, O. N. Mryasov und P. R. LeClair. J. Phys: Condens. Matter **15**, R109 (2003).
- [13] S. S. P. Parkin, K. P. Roche, M. G. Samant, P. M. Rice *et al.*. J. Appl. Phys. **85**, 5828 (1999).
- [14] P. Grünberg. Physics Today **54**, 31 (2001).

- 
- [15] J. Dreßen und A. Hoffknecht. Physik Journal **3**, 39 (2004).
- [16] A. Ney, C. Pampuch, R. Koch und K. H. Ploog. Nature **425**, 485 (2003).
- [17] S. Datta und B. Das. Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [18] J. M. Kikkawa und D. D. Awschalom. Nature **397**, 139 (1999).
- [19] G. Schmidt, D. Ferrand, L. W. Molenkamp, A. T. Filip und B. van Wees. Phys. Rev. B **62**, R4790 (2000).
- [20] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. O. und A. Endo, S. Katsumo und Y. Iye. Appl. Phys. Lett. **69**, 363 (1996).
- [21] A. Fert und H. Jaffrès. Phys. Rev. B **64**, 184420 (2001).
- [22] A. Hanbicki, B. T. Jonker, G. Itskos, G. Kioseoglou und A. Petrou. Appl. Phys. Lett. **80**, 1240 (2002).
- [23] S. Kreuzer. *Spinpolarisiertes Tunneln durch einkristalline Halbleiterbarrieren*. Dissertation, Universität Regensburg (2001).
- [24] P. Mavropoulos, N. Papanikolaou und P. H. Dederichs. Phys. Rev. Lett. **85**, 1088 (2000).
- [25] P. Mavropoulos, O. Wunnicke und P. H. Dederichs. Phys. Rev. B **66**, 024416 (2002).
- [26] S. Kreuzer, J. Moser, W. Wegscheider und D. Weiss. Appl. Phys. Lett. **80**, 4582 (2002).
- [27] M. Zenger, J. Moser, W. Wegscheider, D. Weiss und T. Dietl. High-field magnetoresistance of Fe/GaAs/Fe tunnel junctions. Soll in Appl. Phys. Lett. veröffentlicht werden.
- [28] L. Eaves, K. W. H. Stevens und F. W. Sheard. In *The physics and fabrication of microstructures and microdevices*, herausgegeben von M. Kelly und C. Weisbuch (Springer-Verlag, Berlin, 1986).
- [29] J. C. Slonczewski. Phys. Rev. B **39**, 6995 (1989).
- [30] A. M. Bratkovsky. Phys. Rev. B **56**, 2344 (1997).
- [31] E. C. Stoner. Phil. Mag. **15**, 1018 (1933).
- [32] G. Kirczenow. Phys. Rev. B **63**, 054422 (2001).

- 
- [33] E. Y. Tsymbal und D. G. Pettifor. Phys. Rev. B **58**, 432 (1998).
- [34] H. Itoh, A. Shibata, T. Kumazaki, J. ichiro Inoue und S. Maekawa. J. Phy. Soc. Jpn. **68**, 1632 (1999).
- [35] H. Itoh, T. Kumazaki, J. ichiro Inoue und S. Maekawa. Jpn. J. Appl. Phys. **37**, 5554 (1998).
- [36] Y. Li und C.-R. Chang. Phys. Lett. A **287**, 415 (2001).
- [37] Y. Li, C.-R. Chang und Y. D. Yao. J. Appl. Phys. **91**, 8807 (2002).
- [38] M. Popp. *Spinabhängiger Quantentransport in ungeordneten mesoskopischen Systemen*. Diplomarbeit, Universität Regensburg (2002).
- [39] R. Landauer. IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957).
- [40] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer und S. Pinhas. Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).
- [41] D. S. Fisher und P. A. Lee. Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [42] A. MacKinnon. Z. Phys. B **59**, 385 (1985).
- [43] O. Madelung. *Festkörpertheorie I* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1972).
- [44] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu und F. Laloe. *Quantenmechanik* (Walter de Gruyter, Berlin, New York, 1999).
- [45] O. von Roos. Phys. Rev. B **27**, 7547 (1983).
- [46] F. Cavalcante, R. C. Filho, J. R. Filho, C. de Almeida und V. Freire. Phys. Rev. B **55**, 1326 (1997).
- [47] G. H. Wannier. Phys. Rev. **52**, 191 (1937).
- [48] J. C. Slater. Phys. Rev. **76**, 1592 (1949).
- [49] R. Morrow und K. Brownstein. Phys. Rev. B **30**, 678 (1984).
- [50] I. Galbraith und G. Duggan. Phys. Rev. B **38**, 10057 (1988).
- [51] D. BenDaniel und C. Duke. Phys. Rev. **152**, 683 (1966).
- [52] H. Dobler. Persönliche Mitteilung.
- [53] N. W. Ashcroft und N. D. Mermin. *Solid State Physics* (Saunders, New York, 1976).

- [54] H. Ibach und H. Lüth. *Festkörperphysik* (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2002).
- [55] A. D. Stone. In *Mesoscopic Quantum Physics*, herausgegeben von E. Akkermans, G. Montambaux und J.-L. P. J. Zinn-Justin (Elsevier, Amsterdam, 1995).
- [56] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
- [57] P. W. Anderson. Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [58] S. Dubois, L. Piraux, J. M. George, K. Ounadjela, J. L. Duvail und A. Fert. Phys. Rev. B **60**, 477 (1999).
- [59] T. Dietl. Persönliche Mitteilung.
- [60] T. Valet und A. Fert. Phys. Rev. B **48**, 7099 (1993).
- [61] R. Landauer. Phil. Mag. **21**, 863 (1970).
- [62] D. K. Ferry und S. M. Goodnick. *Transport in Nanostructures* (Cambridge University Press, 2001).
- [63] D. Frustaglia. *Spin-Dependent Transport in Mesoscopic Quantum Systems*. Dissertation, Technische Universität Dresden (2001).
- [64] R. Peierls. Z. Phys. **80**, 763 (1933).
- [65] R. P. Feynman, R. B. Leighton und M. Sands. *Feynman Vorlesungen über Physik, Band III: Quantenmechanik* (Oldenbourg Verlag, München, Wien, 1999).
- [66] *Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS)*: <http://www.netlib.org/blas/>.
- [67] *Automatically Tuned Linear Algebra Software (ATLAS)* : <http://math-atlas.sourceforge.net/>.
- [68] T. L. Li und K. J. Kuhn. J. Comp. Phys. **110**, 292 (1994).
- [69] C. W. J. Beenaker und H. van Houten. In *Solid State Physics* **44**, herausgegeben von H. Ehrenreich und D. Turnbull.
- [70] F. J. Himpsel, K. N. Altmann, G. J. Mankey, J. E. Ortega und D. Y. Petrovykh. J. Mag. Mag. Mat. **200**, 456 (1999).
- [71] F. J. Himpsel, J. E. Ortega, G. J. Mankey und R. F. Willis. Adv. Phys. **47**, 511 (1998).

- 
- [72] J. M. McLaren, W. H. Butler und X.-G. Zhang. *J. Appl. Phys.* **83**, 6521 (1998).
- [73] J. M. McLaren, X.-G. Zhang und W. H. Butler. *Phys. Rev. B* **56**, 11827 (1997).
- [74] M. E. J. Newman und G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, Oxford, New York, 1999).
- [75] M. Zenger.
- [76] E. Y. Tsymbal, A. Sokolov, I. F. Sabirianov und B. Doudin. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 186602 (2003).
- [77] A. Vedyayev, N. Ryzhanova, R. Vlutters und B. Dieny. *Europhys. Lett.* **46**, 808 (1999).
- [78] S. Zhang und P. M. Levy. *Eur. Phys. J. B* **10**, 599 (1990).
- [79] F. Stern und S. D. Sarma. *Phys. Rev. B* **30**, 840 (1984).
- [80] J. N. Schulman. *J. Vac. Sci. Technol. B* **1**, 644 (1983).
- [81] S. Vlaev, V. R. Velasco und F. García-Moliner. *Phys. Rev. B* **49**, 11222 (1994).
- [82] J. Mathon. *Phys. Rev. B* **56**, 11810 (1997).
- [83] J. Mathon und A. Umerski. *Phys. Rev. B* **63** (2001).
- [84] S. Sanvito, C. J. Lambert und J. H. Jefferson. *Phys. Rev. B* **60**, 7385 (1999).
- [85] T. Schäpers, J. Nitta, H. B. Heersche und H. Takayanagi. *Phys. Rev. B* **64**, 125314 (2001).
- [86] T. Matsuyama, C.-M. Hu, D. Grundler, G. Meier und U. Merkt. *Phys. Rev. B* **65**, 155322 (2002).
- [87] F. Mireles und G. Kirczenow. *Phys. Rev. B* **66**, 214415 (66).
- [88] X. Zhang, B.-Z. Li, G. Sun und F.-C. Pu. *Phys. Rev. B* **56**, 5484 (1997).
- [89] A. Szafer. Unveröffentlicht (1987).



# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich die Gelegenheit nutzen, allen Leuten zu danken, die zur Fertigstellung dieser Diplomarbeit beigetragen haben.

Zu allererst gilt mein Dank Prof. Dr. Richter, der mir die Bearbeitung dieses interessanten Themas in seiner Arbeitsgruppe ermöglicht hat. Seine wertvollen Hinweise und Ratschläge trugen maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit bei.

Markus Popp und Giorgos Fagas halfen mir gerade zu Beginn meiner Arbeit, die Numerik zu verstehen. Dafür sei ihnen herzlichst gedankt.

Zu tiefstem Dank verpflichtet bin ich Harald Dobler, der die Entwürfe meiner Diplomarbeit äußerst gewissenhaft Korrektur gelesen und mich in die tieferen Geheimnisse von `xmgrace` und `LATEX` eingeweiht hat.

Meiner Freundin Marlies Rübisch danke ich für ihre wertvollen Hinweise zur neuen Rechtschreibung.

Schließlich möchte ich auch meinen Eltern danken, die mich in der ganzen Zeit meines Studiums in jeglicher Hinsicht unterstützt haben.



# Erklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich die Diplomarbeit selbständig angefertigt und keine Hilfsmittel außer den in der Arbeit angegebenen benutzt habe.

Regensburg, den 30. Januar 2004