

Elektronentransport durch planare Tunnelkontakte: Eine *ab initio* Beschreibung

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

vorgelegt der

Naturwissenschaftlichen Fakultät II
der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg



von **Herrn Christian Heiliger**
geboren am 14.05.1980 in Halle

Gutachterin bzw. Gutachter:

1. Prof. Dr. Ingrid Mertig
2. Prof. Dr. Gerrit Bauer
3. Prof. Dr. Peter Dederichs

Halle, den 13.02.2007

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Theoretische Grundlagen	7
2.1	Elektronenstruktur	7
2.1.1	Dichtefunktionaltheorie	7
2.1.2	Spindichtefunktionaltheorie	10
2.1.3	Austausch-Korrelations-Potential	11
2.1.4	Methode der Greenschen Funktionen	12
2.1.4.1	Allgemeine Eigenschaften	12
2.1.4.2	Dyson- und Lippmann-Schwinger-Gleichung	14
2.1.5	KKR-Verfahren	16
2.1.5.1	Idealkristall	19
2.1.5.2	Zweidimensionale Geometrie	20
2.1.5.3	Abgeschirmte Strukturkonstanten	20
2.2	Theorie des Elektronentransports	22
2.2.1	Grenzfälle	22
2.2.2	Julliere-Modell	22
2.2.3	Landauer-Formalismus	26
2.2.4	Beschreibung des elektronischen Transports mit Greenschen Funktionen	30
2.2.5	Berechnung des Leitwerts im KKR-Verfahren	32
2.2.6	Spannungsabhängigkeit	34
3	Ergebnisse und Diskussion	36
3.1	Entstehung des TMR-Effekts in Fe/MgO/Fe	36
3.1.1	Atomare und elektronische Struktur von Fe/MgO/Fe	36
3.1.2	Komplexe Bandstruktur der Barriere	38
3.1.3	Zusammenhang zwischen $k_{ }$ -aufgelöster lokaler DOS und Transmissionswahrscheinlichkeit	40
3.2	Grenzflächenstruktur	43
3.2.1	Experimentelle Befunde	43
3.2.2	Untersuchte Grenzflächenstrukturen	44
3.2.3	Strom-Spannungs-Kennlinien	45
3.2.4	Diskussion der Signaturen von Stromdichte-Spannungs-Kennlinien	47
3.2.5	Vergleich mit experimentellen Resultaten	50
3.2.6	Vergleich zum Julliere-Modell	53
3.3	Barriere	55
3.3.1	Experimentelle Befunde	55

3.3.2	Untersuchte Strukturen	55
3.3.3	Strom-Spannungskennlinien	56
3.3.4	Dickenabhängigkeit bei verschwindender Spannung	57
3.3.5	Stromtragende Tunnelzustände	58
3.4	Struktur der Elektroden	64
3.4.1	Aufbau der Zuleitungen	64
3.4.2	Effektive Tunnelbarrieren	65
3.4.3	Leitwert in Abhängigkeit der Fe-Dicke	68
3.4.4	TMR-Verhältnis in Abhängigkeit der Fe-Dicke	71
4	Zusammenfassung	74
5	Anhang	76
5.1	Clustergröße des Referenzsystems	76
5.2	Größe des k-Netzes	79
5.3	Volumenintegration zur Berechnung des Leitwerts	81
	Literaturverzeichnis	82
	Eigene Veröffentlichungen	90
	Danksagung	91
	Eidesstattliche Erklärung	92

Kapitel 1

Einleitung

In der gegenwärtigen Elektronik, die auf Halbleitern und Metallen basiert, wird vor allem die Ladung des Elektrons verwendet, während sein Spinfreiheitsgrad weitestgehend ungenutzt bleibt. Jedoch wird auf dem aktuellen Gebiet der Spintronik der Spin als Informationsträger ausgenutzt [1]. Viele Anwendungen, wie zum Beispiel der Spintransistor [2], Sensoren für magnetische Felder, Speicherzellen und logische Bausteine [3] sind denkbar. Ein grundlegender Effekt, der schon in einigen Anwendungen zum Einsatz kommt, ist der Magnetowiderstandeffekt (MR). Gegenstand aktueller Forschung sind magnetische Schichtstrukturen, deren Magnetowiderstand durch die relative Orientierung der Magnetisierung benachbarter ferromagnetischer Lagen hervorgerufen wird. In Abbildung 1.1 a) sind zwei derartige Strukturen dargestellt. Die Entdeckung der Zwischenlagenaustauschkopplung in metallischen Vielfachschichten von Grünberg *et al.* [4] bildete die Grundlage für den von Baibich *et al.* [5] und Binasch *et al.* [6] entdeckten Supermagnetowiderstand (giant magneto resistance - GMR). Dabei besteht eine Vielfachschicht aus mindestens zwei ferromagnetischen Lagen, die durch eine nichtferromagnetische metallische Schicht getrennt sind. Der GMR-Effekt kann dabei sowohl bei Stromfluß senkrecht zu den Ebenen der Schichtstruktur (current perpendicular to plane - CPP), als auch in Richtung der Ebenen (current in-plane - CIP) beobachtet werden.

Wird die nichtmagnetische Lage durch einen Isolator ersetzt, wird ein Tunnelkontakt erhalten, der den Effekt des Tunnelmagnetowiderstands (tunneling magneto resistance - TMR) aufweisen kann. Dieser TMR-Effekt wurde bereits 1975 von Julliere [7] entdeckt, zunächst nicht weiter beachtet, erhielt aber einen Aufschwung 1995 durch Untersuchungen von Moodera *et al.* [8] und Miyazaki *et al.* [9]. In der vorliegenden Arbeit steht die Untersuchung dieses Effekts im Vordergrund. GMR und TMR haben beide gemeinsam, daß der Magnetowiderstand davon abhängt, ob die magnetischen Momente der Zuleitungen zueinander parallel (P) oder antiparallel (AP) orientiert sind. In Abbildung 1.1 b) ist die prinzipielle Abhängigkeit des Widerstands von einem extern angelegten Magnetfeld skizziert. Das Magnetfeld dient dazu, die magnetische Konfiguration zu ändern. Ein Maß für den Unterschied des Widerstands R beziehungsweise des Leitwerts g zwischen den beiden möglichen magnetischen Konfigurationen wird als Verhältnis in Prozent angegeben, wobei es verschiedene Definitionen gibt. Die in dieser Arbeit verwendeten sind das optimistische TMR -Verhältnis

$$TMR = \frac{g_P - g_{AP}}{\min(g_P, g_{AP})} = \frac{R_{AP} - R_P}{\min(R_P, R_{AP})}, \quad (1.1)$$

das in der Regel den experimentellen Daten zugrunde liegt und das normalisierte TMR -

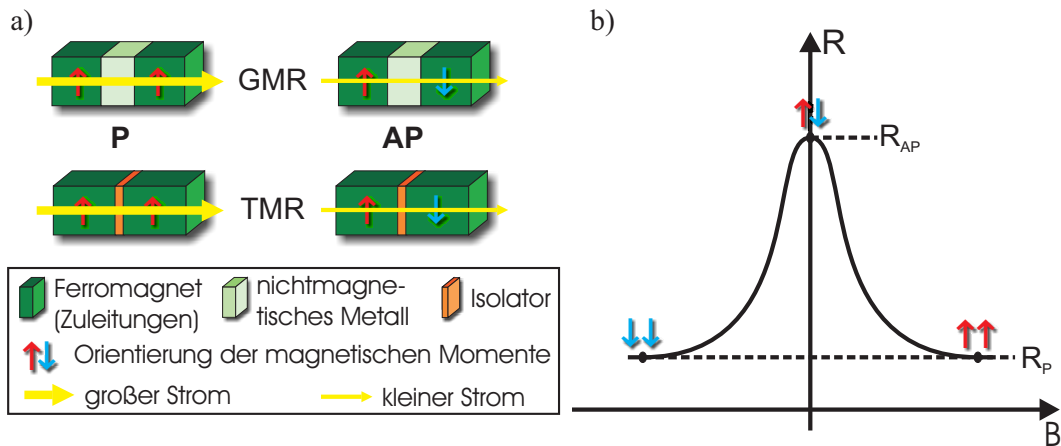


Abbildung 1.1: a) Magnetische Schichtstrukturen, die den Effekt des Magnetowiderstands (MR) aufweisen. b) Schematischer Verlauf des Widerstands R in Abhängigkeit eines äußeren Magnetfelds B.

Verhältnis

$$TMR = \frac{g_P - g_{AP}}{g_P + g_{AP}} = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P + R_{AP}}, \quad (1.2)$$

das zwischen -1 und 1 beschränkt ist. Äquivalente Definitionen lassen sich für das GMR-Verhältnis angeben.

Für die genannten magnetischen Schichtstrukturen gibt es im Moment zwei wichtige Anwendungsgebiete, auf denen in sehr breiter Front sowohl industriell als auch in der Grundlagenforschung gearbeitet wird. Seit 1998 werden nahezu alle Festplatten mit einem GMR-Element als Lesekopf produziert [10]. In neusten Entwicklungen finden auch TMR-Elemente vor allem in Festplatten mit einer sehr hohen Speicherdichte Verwendung [11]. Ohne den Einsatz von MR-Leseköpfen wäre die Kapazität moderner Festplatten nicht erreicht worden.

Das zweite Anwendungsgebiet sind magnetische Speicher (magnetic random access memory - MRAM). Dieses Gebiet ist noch nicht so stark entwickelt und ist Gegenstand intensiver Forschung. Beim MRAM handelt es sich um einen nichtflüchtigen Speicher, der verspricht, die konventionellen Arbeitsspeicher (SDRAM) bezüglich Leistung und Speicherdichte bei vergleichbaren Herstellungskosten zu übertreffen [12]. Damit ist abzusehen, daß MRAM den ebenfalls nichtflüchtigen FLASH Speicher aufgrund deutlich höherer Geschwindigkeiten und den SDRAM vor allem durch die deutlich geringere Leistungsaufnahme [12] ersetzen wird. Ein solcher MRAM ist in der Abbildung 1.2 als Matrixspeicher schematisch dargestellt. An jedem Kreuzungspunkt befindet sich ein mehrschichtiges MR-Element. Die Information wird durch die relative Orientierung der

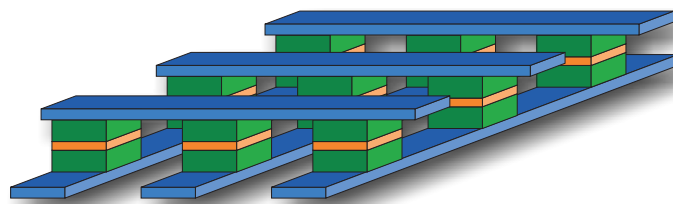


Abbildung 1.2: Skizze eines magnetischen Speichers (MRAM) mit Elementen an den Kreuzungspunkten, die einen MR-Effekt aufweisen.

Magnetisierung der ferromagnetischen Schichten zueinander innerhalb des Elementes gespeichert. Um eine sehr hohe Speicherdichte und ein schnelles Auslesen zu erreichen, sind Werte von über 100% für das MR-Verhältnis erforderlich [13]. Die Abbildung 1.3 zeigt die in den letzten Jahren erzielten GMR- und TMR-Verhältnisse im Vergleich. Daraus wird deutlich, daß gegenwärtig nur der TMR-Effekt diese Anforderung erfüllt.

Neben der hohen Speicherdichte ist auch ein effizientes und reproduzierbares Beschreiben der Speicherzellen notwendig. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten. Zum einen durch Stromimpulse durch die zwei gekreuzten Adressleitungen, deren Magnetfelder sich am Kreuzungspunkt überlagern und ein Schalten der freien magnetischen Lage verursachen. Die Magnetisierung der zweiten ferromagnetischen Schicht ist durch Kopplung an eine antiferromagnetische Lage gepinnt und kann durch die relativ geringen Magnetfelder nicht geschaltet werden. Die auf dem Markt verfügbaren MRAMs, die gegenwärtig im Vergleich zu SDRAM eine geringe Speicherdichte aufweisen, basieren auf dieser Art des Schreibens [13]. Bei der zweiten Möglichkeit des Schaltens erfolgt die Ummagnetisierung durch einen Stromimpuls, der durch das Speicherelement geleitet wird. Der Strom wird in der gepinnten ferromagnetischen Schicht polarisiert. Diese Polarisierung bleibt beim Tunneln durch die Barriere erhalten. In der freien ferromagnetischen Schicht beginnen die Elektronen eine Präzessionsbewegung um die Magnetisierungsachse des Ferromagneten. Rückkoppelnd führt diese Präzession zu einem Drehmoment das auf das magnetische Moment des Ferromagneten ausgeübt wird. Aufgrund dieses Drehmoments beginnt sich das Moment in der freien ferromagnetischen Schicht zu drehen. Ist der Stromimpuls hoch genug, ändert die Schicht ihre magnetische Orientierung. Der Vorteil dieser Art des Schreibens ist die kleiner werdende Leistungsaufnahme mit sinkender Speicherzellengröße, während bei der ersten Methode die Leistungsaufnahme steigt und somit die Speicherdichte beschränkt ist. Die zweite Methode wird strominduziertes Schalten (current induced switching - CIS) genannt und wird experimentell sowohl in GMR-Elementen [35–40] als auch in TMR-Elementen [41–44] untersucht. Die Aufklärung des mikroskopischen Mechanismus des CIS ist Gegenstand aktueller Forschung [45–48].

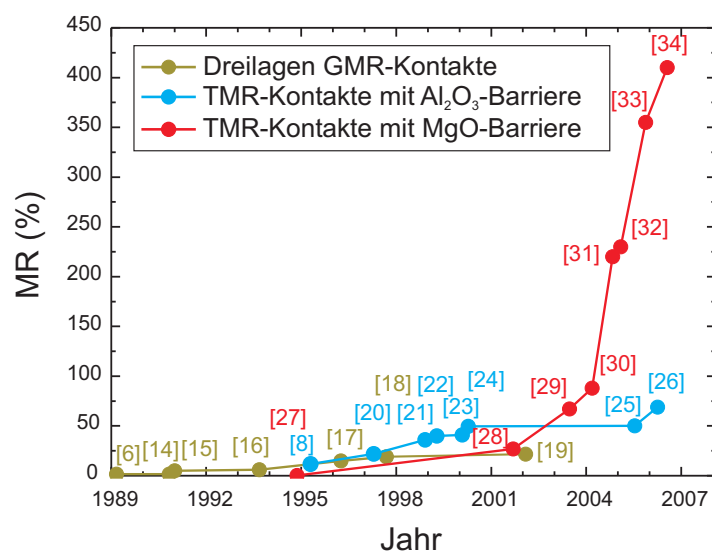


Abbildung 1.3: Maximal erreichte GMR- und TMR-Verhältnisse in den letzten Jahren in Dreilagenstruktur [6, 14–19], mit Al_2O_3 [8, 20–26] und mit MgO [27–34] Barriere.

In der vorliegenden Arbeit sollen die notwendigen Voraussetzungen für die Entstehung sehr hoher TMR-Verhältnisse und der Einfluß der Struktur eines Tunnelkontakts auf die elektronischen Transportgrößen mit Hilfe von *ab initio* Rechnungen untersucht werden. Wie aus Abbildung 1.3 ersichtlich wird, erreichen kristalline MgO-Tunnelbarrieren ein besonders hohes TMR-Verhältnis. Außerdem zeichnen sich Fe/MgO/Fe-Tunnelkontakte durch einen geringen Missfit der Gitterkonstanten zwischen Fe und MgO aus. Darüberhinaus liegen genaue experimentelle Strukturinformationen vor [49–51]. Dadurch sind die Fe/MgO/Fe-Tunnelkontakte für detaillierte theoretische Untersuchungen ideal geeignet. Das System Fe/MgO/Fe bildet die Grundlage für die in dieser Arbeit durchgeführten Analysen. Die für diese Rechnungen notwendigen mathematischen Formalismen werden im Abschnitt 2.1 für die selbstkonsistente Berechnung der Elektronenstruktur und im Abschnitt 2.2 für die Berechnung der elektronischen Transportgrößen vorgestellt. Aufgrund der kristallinen Struktur der Barriere und der Zuleitungen ist dazu eine kohärente Behandlung des elektronischen Transports erforderlich (siehe Abschnitte 2.2.3 und 2.2.4). Wie im Verlauf dieser Arbeit ersichtlich werden wird, liefern die Untersuchungen ein klares Bild von den mikroskopischen physikalischen Prozessen. Die Entstehung des TMR-Effekts in Fe/MgO/Fe-Tunnelkontakten wird im Abschnitt 3.1 diskutiert. Ein Tunnelkontakt läßt sich in drei Bereiche einteilen: Barriere, Zuleitung und Grenzfläche zwischen Zuleitung und Barriere. Die physikalische Bedeutung dieser Bereiche wird detailliert diskutiert. Der größte Einfluß rührt von der chemischen Ordnung der Grenzfläche her, in der sich eine FeO-Schicht ausbilden kann [49, 50]. Die Auswirkung einer solchen Schicht auf die Strom-Spannungskennlinien wird durch die Untersuchung von drei Strukturmodellen in Abschnitt 3.2 erörtert. Die Änderung von Charakteristika in diesen Kennlinien mit größer werdender Barrierendicke wird im Abschnitt 3.3 diskutiert. Zusätzlich werden in diesem Kapitel für eine breite Anzahl von Barrierendicken die Abhängigkeiten der elektronischen Transportgrößen im Grenzfall verschwindender Spannung (zero bias) berechnet. Eine genaue Analyse der zum Strom beitragenden Zustände vervollständigt das Bild für das Verständnis des elektronischen Transports durch sehr dicke Barrieren. Um die Untersuchungen des Tunnelkontakts zu komplettieren wird im Kapitel 3.4 die Struktur der Zuleitungen betrachtet. Dabei steht die Dicke der ferromagnetischen Elektrode im Vordergrund der Diskussion.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen zur Berechnung der elektronischen Transportgrößen vorgestellt.

Im ersten Schritt wird die selbstkonsistente Berechnung der Elektronenstruktur (Abschnitt 2.1) basierend auf der Dichtefunktionaltheorie (Abschnitte 2.1.1-2.1.3) vorgestellt. Dies geschieht mittels eines Korringa-Kohn-Rostoker Verfahrens (Abschnitt 2.1.5) unter Verwendung von Greenschen Funktionen (Abschnitt 2.1.4).

Anschließend wird die Berechnung der elektronischen Transportgrößen mithilfe der selbstkonsistenten Elektronenstruktur im Abschnitt 2.2 erläutert. Bevor das Verfahren zur Berechnung des Leitwerts mittels Greenscher Funktionen (Abschnitt 2.2.4) dargelegt wird, werden die möglichen Grenzfälle des Elektronentransports durch Tunnelkontakte, nämlich kohärent und diffus, diskutiert (Abschnitt 2.2.1). Für den Fall des diffusen Transports wird das Julliere-Modell (Abschnitt 2.2.2) genauer vorgestellt und eine Formel zum Vergleich mit der kohärenten Beschreibung hergeleitet. Der Zusammenhang zwischen dem Leitwert und der Transmission wird im Rahmen der Landauer-Theorie (Abschnitt 2.2.3) erläutert. Zum Abschluß wird das Verfahren zur Berechnung der Spannungsabhängigkeit der Transportgrößen (Abschnitt 2.2.6) erörtert.

2.1 Elektronenstruktur

2.1.1 Dichtefunktionaltheorie

Die Wellenfunktion $|\psi\rangle$ mit dem zugehörigen Eigenenergiewert E eines Festkörpers ist gegeben durch die Schrödinger-Gleichung

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle , \quad (2.1)$$

wobei der Hamiltonoperator H für einen Festkörper allgemein durch

$$H = T_e + T_k + V_{ee} + V_{ek} + V_{kk} \quad (2.2)$$

T_e ... kinetische Energie der Elektronen
 T_k ... kinetische Energie der Kerne
 V_{ee} ... Elektron-Elektron-Wechselwirkungspotential
 V_{ek} ... Elektron-Kern-Wechselwirkungspotential
 V_{kk} ... Kern-Kern-Wechselwirkungspotential

gegeben ist. Die Kopplung der Kerne mit den Elektronen kann innerhalb der adiabatischen Näherung (Born-Oppenheimer-Näherung) [52] vernachlässigt werden. Bei dieser Näherung wird davon ausgegangen, daß sich die Kerne aufgrund ihrer deutlich größeren Masse sehr viel langsamer bewegen als die Elektronen. Damit erfahren die Elektronen ein quasi-statisches Potential der Kerne. Somit kann die Schrödingergleichung in ein elektronisches Problem und in eine Beschreibung der Kerne separiert werden. Im weiteren Verlauf wird nur das elektronische Problem

$$H = T_e + V_{ek} + V_{ee} \quad (2.3)$$

behandelt. Für das Wechselwirkungspotential der Elektronen untereinander setzt man die Coloumbwechselwirkung ein

$$H = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{N_e} V(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=1, j \neq i}^{N_e} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (2.4)$$

wobei $V(\mathbf{r}_i)$ das Coloumbpotential der Kerne darstellt, das das i -te Elektron spürt. Ein Problem der Berechnung der Wellenfunktion liegt darin, daß die Terme in (2.4) von allen Elektronenpositionen abhängen. Da die Anzahl der Elektronen im Festkörper von der Größenordnung 10^{23} ist, ist eine direkte Lösung der Schrödingergleichung nicht möglich. Ein Ausweg ist die Abbildung auf ein effektives Einteilchen-Problem. Eine Möglichkeit dazu bietet die Dichtefunktionaltheorie (DFT). Diese Methode ist sehr weit verbreitet und stellt die Grundlage verschiedenster Bandstrukturverfahren dar. Die Grundidee der DFT geht auf Hohenberg und Kohn [53, 54] zurück. Dabei besagt das Hohenberg-Kohn-Theorem, daß die Grundzustandsenergie E_0 ein eindeutiges Funktional der Grundzustandsdichte $n_0(\mathbf{r})$ ist, und daß das externe Potential bis auf eine Konstante eindeutig durch die Grundzustandsteilchendichte gegeben ist:

$$E_0 = E(n_0(\mathbf{r})) \quad n(\mathbf{r}) = \langle \psi | \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) | \psi \rangle. \quad (2.5)$$

Das bedeutet insbesondere, daß man einer Teilchendichte eine Energie zuordnen kann, für die nach dem Ritzschen Variationsprinzip

$$E_0 = E(n_0(\mathbf{r})) \leq E(n(\mathbf{r})) \quad (2.6)$$

gilt. Die Energie nimmt ihr absolutes Minimum bei der Grundzustandsteilchendichte an. Damit muß die Variation der Energie über der Teilchendichte verschwinden:

$$\delta E(n(\mathbf{r})) = 0. \quad (2.7)$$

Das Problem ist die unbekannt funktionale Abhängigkeit der Energie von der Teilchendichte. Das Funktional der Energie kann nach (2.3) zerlegt werden:

$$E(n(\mathbf{r})) = T_e(n(\mathbf{r})) + V_{ek}(n(\mathbf{r})) + V_{ee}(n(\mathbf{r})). \quad (2.8)$$

Durch explizites Einsetzen der jeweiligen Operatoren erhält man:

$$\begin{aligned} T_e(n(\mathbf{r})) &= \langle \psi | \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} | \psi \rangle, \\ V_{ek}(n(\mathbf{r})) &= \langle \psi | \sum_{i=1}^{N_e} V(\mathbf{r}_i) | \psi \rangle = \int d^3r V(\mathbf{r})n(\mathbf{r}), \\ V_{ee}(n(\mathbf{r})) &= \langle \psi | \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=1, j \neq i}^{N_e} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Die funktionale Abhängigkeit von n ist nur für das Potential der Kerne gegeben. Für die anderen beiden Funktionale ist es notwendig, einen geeigneten Ansatz zu wählen. Einen bedeutenden Ansatz stellten Kohn und Sham [55] auf, indem für die Dichte als Ansatz wechselwirkungsfreie Elektronen mit den Einteilchenwellenfunktionen ψ_i

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.10)$$

verwendet wurden. Das Funktional der kinetischen Energie wird in einen Anteil, der wechselwirkungsfreien Elektronen und in einen unbekanntem Wechselwirkungsterm T_{xc} , der sowohl Austausch- (x-exchange) als auch Korrelationseffekte (c-correlation) beinhaltet, zerlegt

$$T_e(n(\mathbf{r})) = \sum_{i=1}^{N_e} \langle \psi_i | \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} | \psi_i \rangle + T_{xc}. \quad (2.11)$$

Für das Wechselwirkungspotential wird eine Zerlegung in die klassische elektrostatische Wechselwirkungsenergie und in einen unbekanntem Korrekturterm V_{xc} vorgenommen

$$V_{ee}(n(\mathbf{r})) = \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V_{xc}. \quad (2.12)$$

Durch Variation nach ψ_i unter der Nebenbedingung, daß die Einteilchenwellenfunktionen normiert sind

$$\int d^3r n(\mathbf{r}) - N_e = \sum_{i=1}^{N_e} \left[\int d^3r |\psi_i(\mathbf{r})|^2 - 1 \right] = 0, \quad (2.13)$$

erhält man die Kohn-Sham-Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r}) \right) \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (2.14)$$

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + \int d^3r' \frac{e^2 n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{xc}(n(\mathbf{r}))}{\delta n(\mathbf{r})}.$$

Dabei beinhaltet E_{xc} sowohl die Korrekturen der kinetischen Energie als auch die des Wechselwirkungspotentials. Wie leicht zu sehen ist, handelt es sich nun um eine effektive Einteilchen-Schrödingergleichung. Somit ist es gelungen, das komplizierte Vielteilchenproblem auf ein effektives Einteilchenproblem für den Grundzustand zurückzuführen. Die Kohn-Sham-Gleichung wird iterativ gelöst, wie in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt ist. Die Aufgabe der verschiedenen Bandstrukturverfahren besteht nun darin, die Ladungsdichte für ein vorgegebenes effektives Potential mit Hilfe der Kohn-Sham-Gleichung zu berechnen. Bevor das in dieser Arbeit verwendete KKR-Verfahren im Abschnitt 2.1.5 ausführlicher erläutert wird, wird zunächst die Kohn-Sham-Gleichung auf den spinpolarisierten Fall erweitert und das Austausch-Korrelationspotential detaillierter diskutiert.

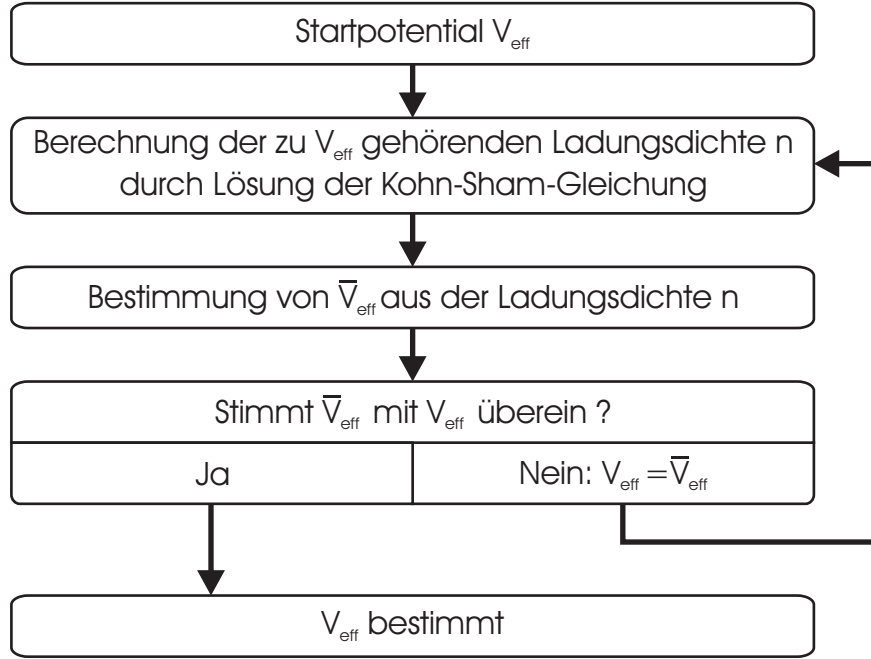


Abbildung 2.1: Schematischer Verlauf der Iteration innerhalb eines Verfahrens zur selbstkonsistenten Lösung der Kohn-Sham-Gleichung

2.1.2 Spindichtefunktionaltheorie

Die im vorangegangenen Abschnitt vorgestellte Dichtefunktionaltheorie kann auf den spinpolarisierten Fall zur Beschreibung ferromagnetischer Materialien erweitert werden. Da die Spinartung des Energiespektrums für ferromagnetische Systeme aufgehoben ist, werden bei der kollinearen Behandlung die spinabhängigen Ladungsdichten für die Majoritätselektronen $n^\uparrow(\mathbf{r})$ und für die Minoritätselektronen $n^\downarrow(\mathbf{r})$ eingeführt, wobei für die Gesamtladungsdichte

$$n(\mathbf{r}) = n^\uparrow(\mathbf{r}) + n^\downarrow(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

und für die Magnetisierungsdichte

$$m(\mathbf{r}) = n^\uparrow(\mathbf{r}) - n^\downarrow(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

gilt. Damit wird das Hohenberg-Kohn-Theorem (2.6) zum Spindichtefunktionaltheorem [56]

$$E_0 = E(n_0^\uparrow(\mathbf{r}), n_0^\downarrow(\mathbf{r})) \leq E(n^\uparrow(\mathbf{r}), n^\downarrow(\mathbf{r})) \quad (2.17)$$

Durch Variation nach der spinabhängigen Einteilchenwellenfunktion ψ_i^σ mit dem Spinindex $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$ unter der Nebenbedingung, daß diese Wellenfunktionen normiert sind, erhält man in Analogie zum spinentarteten Fall die spinabhängigen Kohn-Sham-Gleichungen

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff}^\sigma(\mathbf{r}) \right) \psi_i^\sigma(\mathbf{r}) = \epsilon_i^\sigma \psi_i^\sigma(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

mit dem spinabhängigen effektiven Potential

$$V_{eff}^\sigma(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + \int d^3r' \frac{e^2 n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{xc}(n^\uparrow(\mathbf{r}), n^\downarrow(\mathbf{r}))}{\delta n^\sigma(\mathbf{r})} \quad (2.19)$$

Neben dieser soeben beschriebenen kollinearen Behandlung des Magnetismus ist die Behandlung nicht-kollinear magnetischer Konfigurationen möglich [57,58]. Dabei besitzt jedes betrachtete magnetische Moment eine eigene Magnetisierungsachse im Gegensatz zur kollinearen Konfiguration, bei der es nur eine globale Magnetisierungsachse gibt. In dieser Arbeit werden nur Systeme mit kollinear magnetischer Ordnung betrachtet.

2.1.3 Austausch-Korrelations-Potential

Im Prinzip sind die Kohn-Sham-Gleichungen innerhalb der adiabatischen Näherung und der kollinearen Behandlung des Spins exakt. Das Problem stellt die Austausch-Korrelations-Energie E_{xc} dar, die unbekannt ist und für die Näherungen eingeführt werden müssen. Eine weit verbreitete Näherung ist die Lokale-Dichte-Näherung (local density approximation - LDA) beziehungsweise in ihrer Erweiterung auf den spinpolarisierten Fall die Lokale-Spin-Dichte-Näherung (LSDA). Dabei verwendet man einen Ansatz, bei dem die Austausch-Korrelations-Energie E_{xc} nur von der Dichte am gleichen Ort abhängt. Einen Ansatz findet man über das homogene Elektronengas [59]:

$$E_{xc}(n(\mathbf{r})) = -\frac{3e^2}{4\pi}(3\pi^2)^{\frac{1}{3}} \int d^3r (n(\mathbf{r}))^{\frac{4}{3}}. \quad (2.20)$$

Je nachdem welches Verfahren verwendet wird, werden auch verbesserte Ansätze innerhalb der LDA für E_{xc} benutzt [56,60–63], die zum größten Teil empirisch gefunden wurden. In dieser Arbeit wird für E_{xc} für den spinpolarisierten Fall die Näherung von Vosko, Wilk und Nussair [62], die auf Monte-Carlo Simulationen von Ceperley und Alder [64] basiert, verwendet. Diese geht im nicht spinpolarisierten Fall in das Funktional von Hedin und Lundqvist [60] über.

Neben diesen verschiedenen Ansätzen innerhalb der LDA gibt es Erweiterungen die über die LDA hinausgehen. Diese Erweiterungen sind notwendig, da die LDA nur für ausgewählte Systeme gute Ergebnisse erzielt wie zum Beispiel für Metalle und einige wenige Oxide. Für Eisen, welches in dieser Arbeit betrachtet wird, liefert die LDA die falsche Kristallstruktur für den Grundzustand, fcc anstatt experimentell bekannt bcc. Eine Erweiterung der LDA, die den richtigen Grundzustand für Eisen liefert, ist die generalisierte Gradienten Näherung (generalized gradient approximation - GGA) die neben der lokalen Dichte noch die lokale Ableitung berücksichtigt [65,66]. Da jedoch die Elektronenstruktur von Eisen in der bcc Struktur in LDA und GGA praktisch identisch ist, reicht eine Beschreibung von Eisen innerhalb der LDA, wie in dieser Arbeit geschehen, aus.

Komplizierter verhält es sich bei der Betrachtung von Übergangsmetalloxiden. In der LDA wird die Bandlücke oft falsch oder gar nicht wiedergegeben aufgrund der starken Lokalisierung einiger d-Zustände in den Übergangsmetallen. Eine einfache Möglichkeit stellt die Verwendung von LDA+U [67] dar, wobei diese Methode allerdings nicht mehr parameterfrei ist, sondern den Parameter U enthält. Dieser Parameter wird im allgemeinen so gewählt, daß die experimentell bestimmte Breite der Bandlücke korrekt wiedergegeben wird. Eine parameterfreie Methode zur Beschreibung von Übergangsmetalloxiden stellt die Korrektur der Selbstwechselwirkungsenergie (self interaction correction - SIC) dar [68], bei der ausgewählte Orbitale lokalisiert werden. Die Auswahl der zu lokalisierenden Orbitale erfolgt durch Energieminimierung. Weitere Methoden zur Berücksichtigung von Korrelationseffekten wie DMFT (dynamical mean field theo-

ry) [69], GW und TDDFT (time dependent DFT) [70] sollen nur zur Vervollständigung angegeben werden.

Bei den in dieser Arbeit verwendeten Oxiden MgO und FeO wurde nur die LDA verwendet. Die Gültigkeit der Ergebnisse beziehungsweise der Unterschied zu den anderen angeführten Methoden wird im Kapitel 3 diskutiert.

2.1.4 Methode der Greenschen Funktionen

Die Aufgabe besteht nun darin, die Elektronendichte durch Lösung der Kohn-Sham-Gleichung zu einem gegebenen effektiven Potential zu ermitteln. Eine günstige Methode zur Bestimmung der Elektronendichte mittels Lösung einer Differentialgleichung stellt die Methode der Greenschen Funktionen dar. Bevor die Berechnung der Elektronendichte eines Festkörpers mit dem KKR-Verfahren, das auf Greensche Funktionen zurück greift, im nächsten Abschnitt erläutert wird, sollen in diesem Abschnitt grundlegende Eigenschaften einer Greenschen Funktion dargelegt werden.

2.1.4.1 Allgemeine Eigenschaften

Zunächst soll eine Schrödingergleichung der Form

$$\hat{H}_0|\psi_0^\alpha\rangle = E_0^\alpha|\psi_0^\alpha\rangle \quad (2.21)$$

betrachtet werden, wobei \hat{H}_0 der Hamiltonoperator und E_0^α die zugehörigen reellen Energieeigenwerte sind. Die Eigenfunktionen bilden eine orthogonale

$$\langle\psi_0^\alpha|\psi_0^{\alpha'}\rangle = \delta^{\alpha,\alpha'} \quad (2.22)$$

und vollständige

$$\sum_{\alpha} |\psi_0^\alpha\rangle\langle\psi_0^\alpha| = \hat{I} \quad (2.23)$$

Basis. Addiert man auf beiden Seiten von (2.21) $E|\psi_0^\alpha\rangle$, wobei es sich bei E um einen kontinuierlichen Parameter handeln soll, erhält man

$$\left(E - \hat{H}_0\right)|\psi_0^\alpha\rangle = (E - E_0^\alpha)|\psi_0^\alpha\rangle. \quad (2.24)$$

Die rechte Seite der Gleichung kann als Inhomogenität aufgefaßt werden. Die Bestimmungsgleichung für die zugehörige Greensche Funktion

$$\left(E - \hat{H}_0\right)\hat{G}_0 = \hat{I} \quad (2.25)$$

kann dann durch formale algebraische Umstellung gelöst werden

$$\hat{G}_0 = \frac{\hat{I}}{E - \hat{H}_0}. \quad (2.26)$$

Dabei soll der Index 0 an der Greenschen Funktion symbolisieren, daß es sich um die Greensche Funktion handelt, die dem Hamiltonoperator \hat{H}_0 zugeordnet ist. Dabei ist streng mathematisch gesehen \hat{G}_0 nicht die Greensche Funktion zum Operator \hat{H}_0 , sondern die Greensche Funktion zum Operator $E - \hat{H}_0$ und hängt deswegen auch von dem

Parameter E , der die Dimension einer Energie hat, ab. Eine andere Herleitung dieser Gleichung ist durch die Betrachtung der zeitabhängigen Schrödingergleichung möglich. Dabei wird die zeitabhängige Greensche Funktion bestimmt. Die Zeitabhängigkeit wird mittels Fouriertransformation auf die Energieabhängigkeit übertragen. Dadurch entsteht der hier willkürlich eingeführte Parameter E direkt aus der Fouriertransformation [71]. Durch Multiplikation des Einheitsoperators (2.23) mit der Greenschen Funktion (2.26), erhält man unter Benutzung der Eigenwerte des Hamiltonoperators die Spektraldarstellung der Greenschen Funktion

$$\widehat{G}_0(E) = \widehat{G}_0(E) \sum_{\alpha} |\psi_0^{\alpha}\rangle\langle\psi_0^{\alpha}| = \sum_{\alpha} \frac{|\psi_0^{\alpha}\rangle\langle\psi_0^{\alpha}|}{E - E_0^{\alpha}}. \quad (2.27)$$

Durch diese Darstellung wird deutlich, daß die Greensche Funktion auf der reellen Energieachse Singularitäten besitzt und zwar dann, wenn die Energie mit einem Energieeigenwert von \widehat{H}_0 übereinstimmt. Um dieses Problem zu umgehen, ist es sinnvoll, die Greensche Funktion durch Einführung einer komplexen Energie $z = E \pm i\eta$ mit $\eta > 0$ in die komplexe Energieebene analytisch fortzusetzen. Die Greensche Funktion auf der reellen Achse läßt sich dann aus dem Grenzwert

$$\widehat{G}_0^{\pm}(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \widehat{G}_0(E \pm i\eta) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{\alpha} \frac{|\psi_0^{\alpha}\rangle\langle\psi_0^{\alpha}|}{E \pm i\eta - E_0^{\alpha}} \quad (2.28)$$

bilden, wobei die Greensche Funktion davon abhängt, ob man sich der reellen Achse mit positivem Imaginärteil ($=$ retardiert) oder mit negativem Imaginärteil ($=$ avanciert) nähert. Die Verwendung der Dirac-Identität in (2.28)

$$\widehat{G}_0^{\pm}(E) = \sum_{\alpha} \left[\text{PV} \left(\frac{1}{E - E_0^{\alpha}} \right) \mp i\pi\delta(E - E_0^{\alpha}) \right] |\psi_0^{\alpha}\rangle\langle\psi_0^{\alpha}| \quad (2.29)$$

führt zu einem Zusammenhang des Imaginärteils der Greenschen Funktion mit dem Dichteoperator

$$\widehat{n}(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \widehat{G}_0^+(E) \right\} = \sum_{\alpha} \delta(E - E_0^{\alpha}) |\psi_0^{\alpha}\rangle\langle\psi_0^{\alpha}|. \quad (2.30)$$

Die lokale Zustandsdichte erhält man durch Projektion in den Ortsraum

$$n(\mathbf{r}, E) = \langle \mathbf{r} | \widehat{n}(E) | \mathbf{r} \rangle = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}, E) \right\} = \sum_{\alpha} \delta(E - E_0^{\alpha}) |\psi_0^{\alpha}(\mathbf{r})|^2, \quad (2.31)$$

wobei nur die Diagonalelemente der Greenschen Funktion zu den Argumenten \mathbf{r} auftreten. Die Zustandsdichte ist durch Integration über den Ortsraum berechenbar

$$n(E) = \int d\mathbf{r} n(\mathbf{r}, E) = -\frac{1}{\pi} \int d\mathbf{r} \text{Im} \left\{ G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}, E) \right\}. \quad (2.32)$$

Die Elektronendichte, die für den iterativen Prozess der selbstkonsistenten Lösung der Kohn-Sham-Gleichung benötigt wird (siehe Abbildung 2.1), kann durch die Integration über die Energie von $-\infty$ bis zur Fermienergie E_F

$$n(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{E_F} dE n(\mathbf{r}, E) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} dE \text{Im} \left\{ G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}, E) \right\} \quad (2.33)$$

gewonnen werden, wobei die Fermienergie E_F über die Gesamtladung

$$N = \int_{-\infty}^{E_F} dE n(E) \quad (2.34)$$

definiert ist.

2.1.4.2 Dyson- und Lippmann-Schwinger-Gleichung

Nachdem gezeigt wurde, wie man aus der Greenschen Funktion die Elektronendichte erhält und somit innerhalb des selbstkonsistenten Zyklusses ein neues effektives Potential erzeugt, ist noch nicht geklärt, wie man die Greensche Funktion zu einem vorgegeben effektiven Potential erhalten kann. Betrachtet man einen Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V \quad (2.35)$$

mit der Eigenwertgleichung

$$\hat{H}|\psi^\alpha\rangle = E^\alpha|\psi^\alpha\rangle \quad , \quad (2.36)$$

so läßt sich analog zu (2.24) ein Parameter E

$$\left(E - \hat{H}\right)|\psi^\alpha\rangle = \left(E - \hat{H}_0 - V\right)|\psi^\alpha\rangle = (E - E^\alpha)|\psi^\alpha\rangle \quad (2.37)$$

eingeführen und damit eine zugehörige Greensche Funktion $\hat{G}^\pm(E)$ definieren. Unter Verwendung der Greenschen Funktion zu \hat{H}_0

$$\hat{G}_0^\pm = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\hat{I}}{E \pm i\eta - \hat{H}_0} \quad (2.38)$$

und unter Verwendung von (2.35) kann in analoger Weise für \hat{H} eine Greensche Funktion

$$\hat{G}^\pm = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\hat{I}}{E \pm i\eta - \hat{H}} \Rightarrow \left(\hat{G}^\pm\right)^{-1} = \left(\hat{G}_0^\pm\right)^{-1} - V \quad (2.39)$$

eingeführt werden. Dieser Zusammenhang der Inversen der Greenschen Funktion kann verwendet werden, um für die Greensche Funktion eine implizite Darstellung zu finden, die nur von den beiden Greenschen Funktionen und der Potentialdifferenz zwischen \hat{H}_0 und \hat{H} abhängt

$$\begin{aligned} \hat{G}^\pm &= \hat{G}_0^\pm \left(\hat{G}_0^\pm\right)^{-1} \hat{G}^\pm = \hat{G}_0^\pm \left[\left(\hat{G}_0^\pm\right)^{-1} - V + V\right] \hat{G}^\pm \\ &= \hat{G}_0^\pm \left[\left(\hat{G}^\pm\right)^{-1} + V\right] \hat{G}^\pm = \hat{G}_0^\pm + \hat{G}_0^\pm V \hat{G}^\pm . \end{aligned} \quad (2.40)$$

Diese Gleichung wird Dyson-Gleichung genannt. Es kann auch eine analoge Gleichung über

$$\hat{G}^\pm = \hat{G}^\pm \left[\left(\hat{G}_0^\pm\right)^{-1} - V + V\right] \hat{G}_0^\pm = \hat{G}_0^\pm + \hat{G}^\pm V \hat{G}_0^\pm \quad (2.41)$$

aufgestellt werden. Eine formale algebraische Umstellung liefert

$$\hat{G}^\pm = \hat{G}_0^\pm \left(\hat{1} - V \hat{G}_0^\pm\right)^{-1} . \quad (2.42)$$

Damit kann die Greensche Funktion $\widehat{G}^\pm(E)$ im Prinzip aus der Greenschen Funktion $\widehat{G}_0^\pm(E)$ berechnet werden. Da zum Beispiel die Greensche Funktion freier Elektronen analytisch bekannt ist, hat man eine praktische Möglichkeit aus dieser die Greensche Funktion eines Systems mit einem anderen Potential zu bestimmen.

Neben dieser Beziehung für die Greenschen Funktionen gibt es auch einen wichtigen impliziten Zusammenhang zwischen den Wellenfunktionen $|\psi\rangle$ und $|\psi_0\rangle$ zur gleichen Energie E . Dabei geht man von den Lösungen der Schrödingergleichungen

$$\widehat{H}_0|\psi_0\rangle = E|\psi_0\rangle \text{ und } \widehat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (2.43)$$

zur gleichen Energie E aus. Verwendet man den Ansatz

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + |\delta\psi\rangle \quad (2.44)$$

und setzt diesen in (2.43) ein

$$\begin{aligned} \widehat{H}|\psi\rangle &= (\widehat{H}_0 + V)(|\psi_0\rangle + |\delta\psi\rangle) = E|\psi_0\rangle + E|\delta\psi\rangle = E|\psi\rangle \\ E|\psi_0\rangle + \widehat{H}_0|\delta\psi\rangle + V|\psi\rangle &= E|\psi_0\rangle + E|\delta\psi\rangle \\ V|\psi\rangle &= (E - \widehat{H}_0)|\delta\psi\rangle \\ \widehat{G}_0 V|\psi\rangle &= |\delta\psi\rangle, \end{aligned} \quad (2.45)$$

erhält man durch Einsetzen der letzten Beziehung in (2.44) einen Ausdruck für die Wellenfunktion

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \widehat{G}_0 V|\psi\rangle. \quad (2.46)$$

Eine andere Herleitung dieser Gleichung basiert auf zeitabhängiger Störungsrechnung und wurde von Lippmann und Schwinger [72] durchgeführt. Aus diesem Grund wird die Beziehung (2.46) als Lippmann-Schwinger-Gleichung bezeichnet. Eine weitere wichtige Größe stellt der Transferoperator \widehat{t} dar, der über

$$\widehat{t}|\psi_0\rangle = V|\psi\rangle \quad (2.47)$$

definiert ist und zwischen den Systemen \widehat{H} und \widehat{H}_0 vermittelt. Aus der formalen Lösung von (2.46)

$$|\psi\rangle = (1 - \widehat{G}_0 V)^{-1} |\psi_0\rangle \quad (2.48)$$

ergibt sich für den Transferoperator

$$\widehat{t} = V (1 - \widehat{G}_0 V)^{-1} \quad (2.49)$$

als Verbindung zur Greenschen Funktion und der Potentialdifferenz.

Bis jetzt wurden nur allgemeine Eigenschaften der Methode der Greenschen Funktion dargelegt. Im nächsten Abschnitt sollen diese verwendet werden, um die Greensche Funktion eines Festkörpers zu berechnen. Dazu werden insbesondere die Gleichungen (2.40), (2.46) und (2.47) benötigt.

2.1.5 KKR-Verfahren

Mit Hilfe der im vorherigen Abschnitt beschriebenen Methode der Greenschen Funktion soll die Schrödinger-Gleichung eines Festkörpers gelöst werden. Dieses im folgenden näher erläuterte Verfahren geht auf Kohn, Korringa und Rostoker (KKR) [73, 74] zurück. Analog zu (2.25) lautet die Bestimmungsgleichung für die Greensche Funktion eines Festkörpers zur Lösung der Kohn-Sham-Gleichung (2.14) im Ortsraum

$$[E + \nabla^2 - V(\mathbf{r})] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad , \quad (2.50)$$

wobei $V(\mathbf{r})$ das effektive Kristallpotential des gesamten Festkörpers darstellt, das in Gleichung (2.14) als $V_{eff}(\mathbf{r})$ bezeichnet wurde. Um eine effiziente numerische Lösung für dieses System zu erhalten, ist es notwendig, Näherungen für das Kristallpotential zu verwenden. Da die einzelnen isolierten Atome, aus denen der Festkörper besteht, ein kugelsymmetrisches Potential besitzen, ist die Näherung naheliegend, das Kristallpotential in kugelsymmetrische Potentiale zu zerlegen, die um die jeweiligen Atome zentriert sind. Da die so entstehende Potentiallandschaft in zwei Dimensionen an ein Backblech für Muffins erinnert, wird diese Näherung als muffin-tin-Näherung bezeichnet. In der Abbildung 2.2 a) ist schematisch ein solches muffin-tin (MT) Potential dargestellt. Die Radien der jeweiligen Potentialkugeln dürfen sich nicht überschneiden.

Wenn man die Greensche Funktion innerhalb aller dieser Kugeln integriert, um nach (2.33) die Ladungsdichte zu erhalten, ergibt sich das Problem, daß die MT-Kugeln nicht das gesamte Volumen des Festkörpers abdecken und daß man über den Zwischenraum (interstitial region) zwischen den Kugeln integrieren müßte, wodurch Vorteile der kugelsymmetrischen Beschreibung verloren gingen. Aus diesem Grund werden die Radien der Potentialkugeln in der Atomkugelnäherung (Atomic Sphere Approximation - ASA) so groß gewählt, daß das Volumen der Kugeln gleich dem Volumen des Festkörpers ist, wie in Abbildung 2.2 b) skizziert ist.

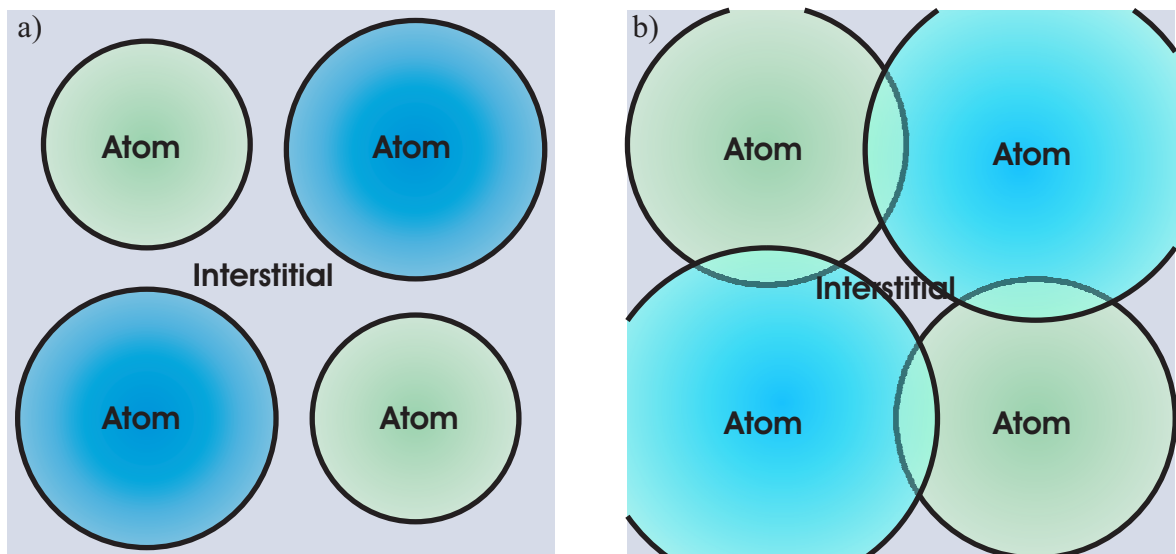


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Atompotentiale in a) muffin-tin (MT) und b) Atomkugelnäherung (Atomic Sphere Approximation - ASA).

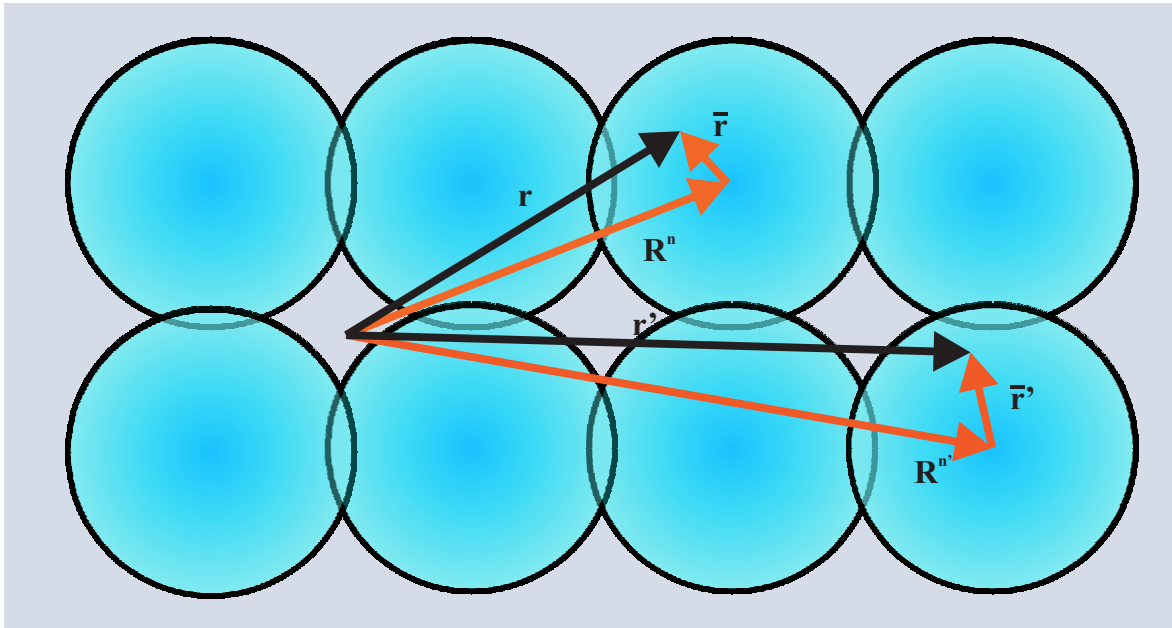


Abbildung 2.3: Globale Koordinaten (schwarz) und zellzentrierte Koordinaten (rot).

Damit wird bei der Integration über die ASA-Kugeln das Volumen des gesamten Festkörpers berücksichtigt, wobei aber gleichzeitig der Fehler begangen wird, die Bereiche, in denen sich die ASA-Kugeln überlappen, doppelt zu zählen, beziehungsweise den doppelten Beitrag als Beitrag des Zwischenraums zu interpretieren. Der große Vorteil der ASA-Näherung liegt aber darin, daß man die Kugelsymmetrie der einzelnen Potentiale voll ausnutzen kann und den Zwischenraum nicht berücksichtigen muß. Allerdings muß man darauf achten, daß die Überlappung der Kugeln nicht zu groß wird, wobei die Einführung von sogenannten leeren Kugeln (empty spheres) Abhilfe schafft.

Das Potential des Festkörpers läßt sich in zellzentrierten Koordinaten \mathbf{R}^n (siehe Abbildung 2.3) wie folgt schreiben

$$V(\mathbf{r}) = \sum_n V^n(|\mathbf{r} - \mathbf{R}^n|) , \quad (2.51)$$

wobei für die einzelnen kugelsymmetrischen Potentiale der ASA-Näherung

$$V^n(|\mathbf{r} - \mathbf{R}^n|) = \begin{cases} V_{atom}^n(|\mathbf{r} - \mathbf{R}^n|) & |\mathbf{r} - \mathbf{R}^n| < R_{ASA}^n \\ 0 & |\mathbf{r} - \mathbf{R}^n| > R_{ASA}^n \end{cases} \quad (2.52)$$

gilt. Setzt man dieses Potential in (2.50) ein und führt eine Koordinatentransformation auf die zellzentrierten Koordinaten (siehe Abbildung 2.3) aus

$$\bar{\mathbf{r}} \rightarrow \mathbf{r} \longrightarrow \mathbf{R}^n + \mathbf{r} \quad (2.53)$$

$$\bar{\mathbf{r}}' \rightarrow \mathbf{r}' \longrightarrow \mathbf{R}^{n'} + \mathbf{r}' , \quad (2.54)$$

erhält man die Bestimmungsgleichung für die Greensche Funktion im ASA-Bild

$$[E + \nabla^2 - V^n(r)] G(\mathbf{R}^n + \mathbf{r}, \mathbf{R}^{n'} + \mathbf{r}', E) = \delta_{n,n'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (2.55)$$

Diese Gleichung ist die inhomogene Differentialgleichung zur Bestimmung der Greenschen Funktion. Die Inhomogenität tritt nur für den Fall $n = n'$ auf. In diesem Fall handelt es sich um die Bestimmungsgleichung für die Greensche Funktion $g_S^n(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$ des isolierten Einzelstreuers, das heißt einer isolierten ASA-Kugel eingebettet in den leeren Raum. Somit handelt es sich um den Einzelstreubeitrag (single scattering) und gleichzeitig um eine spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung (2.55). Die homogene Lösung zu (2.55) muß die Schrödingergleichung in den einzelnen ASA-Kugeln erfüllen, womit sich eine Entwicklung nach Lösungen

$$\phi_L^n(\mathbf{r}, E) = \phi_L^n(r, E)Y_L(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.56)$$

innerhalb der kugelsymmetrischen ASA-Potentiale anbietet. Dabei sind $\phi_L^n(r, E)$ die Lösung der radialen Schrödingergleichung in der Kugel n , $L = (l, m)$ ein Kombinationsindex für die Bahndrehimpulsquantenzahl l und die Magnetquantenzahl m und $\hat{\mathbf{r}}$ bezeichnet den Einheitsvektor in Richtung des Ortsvektors. Die Greensche Funktion des Festkörpers kann aus der homogenen und inhomogenen Lösung zusammen gesetzt werden

$$\begin{aligned} G(\mathbf{R}^n + \mathbf{r}, \mathbf{R}^{n'} + \mathbf{r}', E) &= G^{nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) \\ &= \delta_{nn'}g_S^n(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) + \sum_{LL'} \phi_L^n(\mathbf{r}, E)g_{LL'}^{nn'}(E)\phi_{L'}^{n'}(\mathbf{r}', E), \end{aligned} \quad (2.57)$$

dabei beschreibt der zweite Teil der Gleichung die Vielfachstreubeiträge. Die Entwicklungskoeffizienten $g_{LL'}^{nn'}(E)$ sind die sogenannten Strukturkonstanten und werden auch als strukturelle Greensche Funktion bezeichnet. Die Aufgabe besteht nun darin, die Greensche Funktion des Einzelstreuers und die Strukturkonstanten zu bestimmen. Wie im Abschnitt über die Methode der Greenschen Funktionen beschrieben, startet man dabei von einem bekannten System mit bekannter Greenscher Funktion \tilde{G} und löst dann eine Dysongleichung

$$G = \tilde{G} + \tilde{G}\Delta VG \quad , \quad (2.58)$$

wobei ΔV das Potential ist, um das sich die beiden Systeme unterscheiden. Setzt man den Ansatz (2.57) für G und \tilde{G} ein, erhält man eine Dysongleichung für die Greensche Funktion der Einzelstreuer

$$g_S^n = \tilde{g}_S^n + \tilde{g}_S^n \Delta V^n g_S^n \quad (2.59)$$

und eine Gleichung für die Strukturkonstanten, die die Struktur einer Dysongleichung besitzt

$$g_{LL'}^{nn'}(E) = \tilde{g}_{LL'}^{nn'}(E) + \sum_{n''L''} \tilde{g}_{LL''}^{nn''}(E)\Delta t_{L''}^{n''}g_{L''L'}^{n''n'}(E) \quad , \quad (2.60)$$

wobei Δt_L^n den Übergang von \tilde{G} zu G beschreibt. Für eine ausführliche Diskussion des Einzelstreuers sei auf die Literatur [75–77] verwiesen.

Diese Gleichung für die Strukturkonstanten läßt sich abhängig von der Geometrie im Ortsraum lösen, um dann die komplette Greensche Funktion nach (2.57) zu konstruieren. In den folgenden Abschnitten sollen verschiedene für diese Arbeit wichtige Geometrien besprochen werden.

2.1.5.1 Idealkristall

Um einen Idealkristall zu berechnen, ist es sinnvoll die Translationsinvarianz des Gitters zu verwenden. Dabei gehen die zellzentrierten Koordinaten in Gittervektoren R^n und Basisvektoren R^μ über, wobei letztere die Vektoren sind, die von dem Gittervektor R^n aus zu den Zentren der atomaren Potentiale der Basisatome μ zeigen. Damit erhalten die Greensche Funktion (2.57) und auch die Strukturkonstanten (2.60) zwei zusätzliche Indizes μ und μ' , die über die Basis einer Elementarzelle laufen, während n und n' nur noch über die Elementarzellen laufen.

Aufgrund der Translationsinvarianz hängen die Strukturkonstanten bezüglich der Gittervektoren nur noch von den Differenzvektoren $\mathbf{R}^{nn'} = \mathbf{R}^{n'} - \mathbf{R}^n$ ab. Damit ist es sinnvoll, die Strukturkonstanten mittels einer Fouriertransformation darzustellen

$$g_{LL'}^{\mu\mu'}(E) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\Omega_{BZ}} d^3k e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}^{nn'}} g_{LL'}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}, E), \quad (2.61)$$

wobei die Strukturkonstanten im reziproken Raum von \mathbf{k} und von den Indizes für die Basisatome abhängen. Ω ist das Volumen der Elementarzelle und $\Omega_{BZ} = (2\pi)^3/\Omega$ das Volumen der Brillouinzone. Durch Einsetzen von (2.61) in (2.60) und unter Verwendung der Beziehung [78]

$$\sum_n e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}^n} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \sum_n \delta(\mathbf{k} - \mathbf{K}^n) \quad (2.62)$$

zwischen der Summe der Gittervektoren und den reziproken Gittervektoren \mathbf{K}^n , erhält man für die fouriertransformierten Strukturkonstanten eine algebraische Gleichung der Form

$$g_{LL'}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}, E) = \tilde{g}_{LL'}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}, E) + \sum_{\mu''L''} \tilde{g}_{LL''}^{\mu\mu''}(\mathbf{k}, E) \Delta t_{L''}^{\mu''} g_{L''L'}^{\mu''\mu'}(\mathbf{k}, E) \quad (2.63)$$

Die Gleichung kann formal mittels Matrixinversion

$$g_{LL'}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}, E) = \sum_{\mu''L''} [(1 - \tilde{g}(\mathbf{k}, E)\Delta t)^{-1}]_{LL''}^{\mu\mu''} \tilde{g}_{L''L'}^{\mu''\mu'}(\mathbf{k}, E) \quad (2.64)$$

gelöst werden. Allerdings ist es aus numerischer Sicht günstiger [76, 79], die so genannte KKR-Matrix M

$$M_{LL''}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}, E) = \tilde{g}_{LL''}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}, E) - \delta_{\mu\mu'} \delta_{LL'} [\Delta t^{-1}(E)]_L^\mu \quad (2.65)$$

zu invertieren. Durch Inversion dieser Matrix können dann mit

$$g_{LL'}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}, E) = -\delta_{\mu\mu'} \delta_{LL'} [\Delta t^{-1}(E)]_L^\mu - [\Delta t^{-1}(E)]_L^\mu [M^{-1}(\mathbf{k}, E)]_{LL'}^{\mu\mu'} [\Delta t^{-1}(E)]_L^{\mu'} \quad (2.66)$$

die Strukturkonstanten berechnet werden. Mit Hilfe der Gleichung (2.61) werden die Strukturkonstanten mittels einer Brillouinonenintegration wieder in den Ortsraum überführt. Nun läßt sich nach (2.33) mit der Darstellung der Greenschen Funktion (2.57) die Ladungsdichte $n(\mathbf{r})$ berechnen. Diese Behandlung des translationsinvarianten Kristalls wurde verwendet, um die selbstkonsistenten Potentiale für die Tunnelkontakte zu bestimmen.

2.1.5.2 Zweidimensionale Geometrie

Die in dieser Arbeit dargestellten Rechnungen zu den Transporteigenschaften wurden in zweidimensionaler beziehungsweise planarer Geometrie mit halbunendlichen Zuleitungen durchgeführt. Das bedeutet, daß in der Richtung z des elektrischen Stroms keine Translationinvarianz vorliegt, sondern nur senkrecht dazu beziehungsweise parallel zu den Grenzflächen. Damit handelt es sich bei \mathbf{k} nicht mehr um eine gute Quantenzahl. Allerdings kann die Translationsinvarianz senkrecht zur Stromrichtung verwendet werden. Somit kann die Dysongleichung teilweise unter Einführung der Quantenzahl \mathbf{k}_{\parallel} fouriertransformiert werden

$$g_{LL'}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}_{\parallel}, E) = \tilde{g}_{LL'}^{\mu\mu'}(\mathbf{k}_{\parallel}, E) + \sum_{n''\mu''L''} \tilde{g}_{LL''}^{\mu\mu''}(\mathbf{k}_{\parallel}, E) \Delta t_{L''}^{\mu''} g_{L''L'}^{\mu''\mu'}(\mathbf{k}_{\parallel}, E), \quad (2.67)$$

während die strukturelle Greensche Funktion in Stromrichtung weiterhin im Ortsraum durch die Einführung eines Lagenindex n beschrieben wird. Analog zum Idealkristall läßt sich die Greensche Funktion im Ortsraum und im Speziellen die Dichte über eine Brillouinonenintegration erhalten. Allerdings handelt es sich jetzt nur um eine zweidimensionale beziehungsweise Oberflächen-Brillouinzone.

Das Problem dieser Geometrie besteht darin, daß die zu invertierende Matrix unendlich groß ist, resultierend aus der notwendigen Behandlung der Stromrichtung im Ortsraum. Da es sich allerdings um halbunendliche Zuleitungen handelt und damit die Elemente in der Matrix weit entfernt vom Streuer identisch sind, kann diese unendliche Matrix mit Hilfe der Dezimations-Technik [80] invertiert werden, wenn diese die Form einer Tridiagonal- beziehungsweise Bandmatrix hat [79]. Mit welchem Ansatz dieser Sachverhalt gewährleistet werden kann, wird im nächsten Abschnitt beschrieben.

2.1.5.3 Abgeschirmte Strukturkonstanten

Bis jetzt wurden noch keine Aussagen über das sogenannte Referenzsystem, die Strukturkonstanten \tilde{g} , getroffen. Der einfachste Weg wäre die Verwendung des freien Raumes als Referenzsystem. Das Problem für diese Strukturkonstanten besteht in der ungenügenden Konvergenz der Fouriertransformation [79]. Trotzdem werden in den Programmen für die traditionelle KKR diese freien Strukturkonstanten verwendet. Die Schwierigkeiten resultieren aus der großen Reichweite der Strukturkonstanten der freien Greenschen Funktion $g_{0,LL'}^{nn'}$ im Ortsraum. Dieses Verhalten führt dann auch dazu, daß die nach Gleichung (2.65) zu invertierende Matrix dicht besetzt ist und nicht die Form einer Bandmatrix aufweist. Deshalb kann die 2D-Geometrie mit halbunendlichen Zuleitungen nicht mit dem freien Raum als Referenzsystem behandelt werden.

Eine Möglichkeit diesen Mangel der freien Strukturkonstanten zu umgehen, ist die Verwendung eines Referenzsystems \tilde{G} mit einem repulsiven Potential \tilde{V} [79, 81]. Die zugehörigen Strukturkonstanten der Greenschen Funktion fallen im Ortsraum exponentiell ab. Dadurch beschränkt sich die Wechselwirkung einer Zelle nur auf die Nachbarschaft, deren Umfang durch eine Clustergröße im Ortsraum festgelegt wird. Die Lösung der Dysongleichung erfolgt in zwei Stufen. Zunächst werden die Strukturkonstanten \tilde{g} des repulsiven Referenzsystems aus den freien Strukturkonstanten g_0 durch die Lösung der algebraischen Dysongleichung

$$\tilde{g} = g_0 + g_0 \tilde{t} \tilde{g} \quad \text{mit} \quad \tilde{t} |\psi_0\rangle = \tilde{V} |\tilde{\psi}\rangle \quad (2.68)$$

auf den erforderlichen Clustern im Ortsraum bestimmt. Dann werden diese sogenannten abgeschirmten Strukturkonstanten fouriertransformiert, um über eine algebraische Dysongleichung die gesuchten Strukturkonstanten g nach (2.63) beziehungsweise (2.67) zu berechnen. Durch die begrenzte Wechselwirkung der Zellen im Referenzsystem ist die zu invertierende KKR-Matrix dünn besetzt und nimmt für lang gestreckte Superszellen wie die hier behandelten Tunnelkontakte die Form einer Bandmatrix an. Durch Einführung sogenannter principal layers, die mehrere atomare Lagen umfassen, kann diese Matrix auf eine Tridiagonal-Matrix abgebildet werden [79].

2.2 Theorie des Elektronentransports

2.2.1 Grenzfälle

Der Ladungstransport durch eine Tunnelbarriere kann entweder im Grenzfall des kohärenten oder in dem des diffusen Transports beschrieben werden. Die Streuung der Ladungsträger an einem Streuzentrum kann kohärent oder inkohärent, elastisch oder inelastisch erfolgen. Handelt es sich bei allen Streuprozessen um kohärente und elastische Prozesse, so befindet man sich im kohärenten Grenzfall des Transports. Das bedeutet, daß die Phasenrelationen bekannt sind und sich konstruktive und destruktive Interferenzen für die Wellenfunktion ausbilden können. Aus diesem Grund ist zur Beschreibung des kohärenten Tunnelns eine Einbeziehung der vollständigen Wellenfunktion inklusive Phase notwendig (Kapitel 2.2.4). Sind die Streuprozesse hingegen inkohärent, so spricht man im allgemeinen von einem diffusen Transport. Dabei ist die Phase nach einem Streuprozess zufällig und im zeitlichen Mittel entstehen keine Interferenzen. Dadurch ist es nicht notwendig, die komplette Wellenfunktion in die Theorie einzubeziehen, wie es am Beispiel des Julliere-Modells in Kapitel 2.2.2 dargestellt wird. Im Grenzfall des diffusen Transports kann genau diese Situation auch eintreten, wenn viele kohärente Streuer mit unterschiedlichen Phasenbeziehungen im System enthalten sind und im räumlichen Mittel keine Interferenzen entstehen. Eine amorphe Struktur ist ein Beispiel für einen solchen Prozess, bei dem viele ungeordnete atomare Streuer vorliegen, der gesamte Elektronentransport dadurch diffus erscheint.

Auf dieser Grundlage können die TMR-Elemente aus Abbildung 1.3 mit amorphen Aluminiumoxidbarrieren im diffusen Grenzfall und die Elemente mit kristalliner Magnesiumoxidbarriere im kohärenten Grenzfall betrachtet werden. Die Beschreibung eines Tunnelkontakts mit Realstruktur wird sich zwischen diesen Grenzfällen bewegen. Aus Abbildung 1.3 ist jedoch zu entnehmen, daß man sich mit Verbesserung der Probenqualität dem kohärenten Grenzfall weiter annähert.

2.2.2 Julliere-Modell

Ein einfaches Modell zur Abschätzung des TMR-Verhältnisses geht auf Julliere [7] zurück. Dabei wird der Strom pro Spinkanal proportional zu den zur Verfügung stehenden Zuständen gesetzt. Für den zunächst behandelten Fall sehr kleiner Spannungen werden nur die Zustände bei der Fermienergie E_F betrachtet. Die entstehenden Ströme sind in der Abbildung 2.4 sowohl für die parallele (P) als auch die antiparallele (AP) Orientierung der magnetischen Momente in den Zuleitungen durch die jeweiligen Zustandsdichten für den Majoritäts- (\uparrow) und Minoritätsspin (\downarrow) illustriert. Die zugehörigen Ströme können durch

$$\begin{aligned}\hat{I}_P &= \hat{I}^{\uparrow\uparrow} + \hat{I}^{\downarrow\downarrow} \propto n_R^{\uparrow}n_L^{\uparrow} + n_R^{\downarrow}n_L^{\downarrow} \text{ und} \\ \hat{I}_{AP} &= \hat{I}^{\uparrow\downarrow} + \hat{I}^{\downarrow\uparrow} \propto n_R^{\uparrow}n_L^{\downarrow} + n_R^{\downarrow}n_L^{\uparrow}\end{aligned}\quad (2.69)$$

abgeschätzt werden, wobei das Dach über dem I den Strom im Julliere-Modell kennzeichnen soll. $n_{L(R)}^{\uparrow(\downarrow)}$ beschreibt eine effektive Zustandsdichte, bei der nur die Zustände gezählt werden, die auch zum Transport beitragen. Dies ist ein Schwachpunkt des Modells, da nicht klar ist, wie diese effektive Zustandsdichte gewählt werden soll. Aus diesem Grund wird oft einfach die Zustandsdichte des Zuleitungsmaterials als Volu-

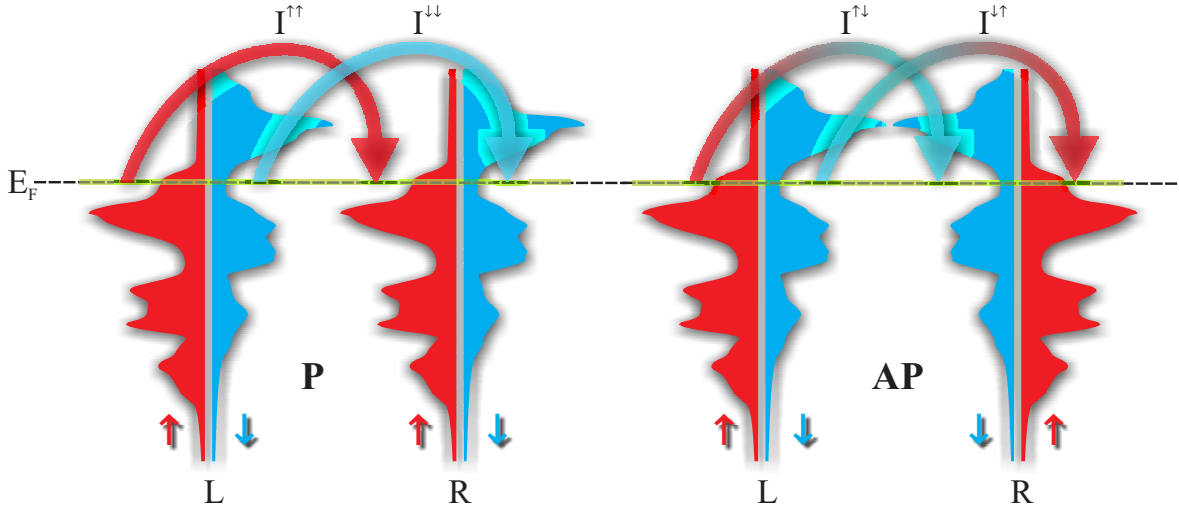


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung der Zustandsdichten in den Zuleitungen links (L) und rechts (R) für die parallele (P) und antiparallele (AP) Orientierung der Magnetisierung der Zuleitungen zueinander. Die zugehörigen Ströme im Julliere-Modell [7] sind durch die Pfeile gekennzeichnet.

mensystem verwendet. Weit häufiger werden die Polarisationen

$$\begin{aligned}
 P_R &= \frac{n_R^\uparrow - n_R^\downarrow}{n_R^\uparrow + n_R^\downarrow} \quad \text{und} \\
 P_L &= \frac{n_L^\uparrow - n_L^\downarrow}{n_L^\uparrow + n_L^\downarrow}
 \end{aligned} \tag{2.70}$$

gemessen [82] und damit das TMR-Verhältnis abgeschätzt oder es wird das TMR-Verhältnis gemessen und in eine Polarisation umgerechnet. In der optimistischen Definition des TMR-Verhältnisses nach Gleichung (1.1) lautet es im Julliere-Modell

$$TMR_{jul} = \frac{2P_R P_L}{1 - P_R P_L} . \tag{2.71}$$

Falls es sich um identische Zuleitungen und damit um die gleiche Polarisation links und rechts $P = P_L = P_R$ handelt, vereinfacht sich das TMR-Verhältnis zu

$$TMR_{jul} = \frac{2P^2}{1 - P^2} , \tag{2.72}$$

welches dann nur positive Werte annehmen kann. In der Tabelle 2.1 sind für verschiedene Zuleitungsmaterialien die gemessenen Polarisierungen und die nach Gleichung (2.72) zugehörigen TMR-Verhältnisse aufgelistet. Diese Verhältnisse sind in relativ guter Übereinstimmung mit Experimenten, die eine amorphe Aluminiumoxidbarriere verwenden [22,24], widersprechen aber den hohen gemessenen Werten mit kristallinen Magnesiumoxidbarrieren [31,83,84] (siehe auch Abbildung 1.3). Der Grund hierfür liegt in der Vernachlässigung der Phaseninformation der am Transport beteiligten Wellenfunktionen. Es wird angenommen, daß alle Zustände die gleiche Transmissionswahrscheinlichkeit haben. Durch diese Vernachlässigung der Phase wird mit dem Julliere-Modell der diffuse Transport beschrieben, der bei der Verwendung von amorphen Barrieren, also

	Fe	Co	Ni
P	44%	34%	11%
TMR	48%	26%	2%

Tabelle 2.1: Gemessene Polarisationen P [82] und zugehörige nach Gleichung (2.72) abgeschätzte TMR-Verhältnisse

einer Vielzahl von ungeordneten Streuern, vorliegt. Im Gegensatz dazu ist die Beachtung der Phaseninformation bei der Verwendung von kristallinen Barrieren notwendig und es können TMR-Verhältnisse erhalten werden, die weit über die Vorhersagen des Julliere-Modells hinausgehen. Um diese experimentellen Befunde verstehen zu können, ist eine Einbeziehung der Phase, das heißt die Verwendung der vollständigen Wellenfunktion, unumgänglich. Eine dieser Methoden, die in dieser Arbeit zur Berechnung der Transportgrößen genutzt wird, wird in den nächsten Abschnitten erläutert. Um jedoch die Bedeutung der Phaseninformation noch stärker herauszuarbeiten und dem Argument entgegen zu treten, daß die Polarisierung der Tunnelströme bei kohärentem Tunneln andere sind als die in Referenz [82] gemessenen, soll im folgenden ein qualitativer Vergleich der Grenzfälle diskutiert werden. Eine wichtige Eigenschaft im Julliere-Modell ist die Identität

$$\hat{I}^{\uparrow\uparrow}\hat{I}^{\downarrow\downarrow} = \hat{I}^{\uparrow\downarrow}\hat{I}^{\downarrow\uparrow} \quad , \quad (2.73)$$

die sich aus Gleichung (2.69) ergibt. Diese Beziehung gilt auch im Fall einer extern angelegten Spannung, da die Spannungsabhängigkeit des Stroms im Julliere-Modell einfach durch effektive Polarisierungen $P_L(V)$ und $P_R(V)$ zur Spannung V berücksichtigt wird [85]. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 2.5 dargestellt, bei dem die Abbildung 2.4 auf den Fall einer angelegten Spannung, durch relatives Verschieben der Zustandsdichten gegeneinander, erweitert ist. Die zugehörigen Ströme lauten dann

$$\begin{aligned} \hat{I}_P(V) &= \hat{I}^{\uparrow\uparrow}(V) + \hat{I}^{\downarrow\downarrow}(V) \propto \tilde{n}_R^{\uparrow}(V)\tilde{n}_L^{\uparrow}(V) + \tilde{n}_R^{\downarrow}(V)\tilde{n}_L^{\downarrow}(V) \quad \text{und} \\ \hat{I}_{AP}(V) &= \hat{I}^{\uparrow\downarrow}(V) + \hat{I}^{\downarrow\uparrow}(V) \propto \tilde{n}_R^{\uparrow}(V)\tilde{n}_L^{\downarrow}(V) + \tilde{n}_R^{\downarrow}(V)\tilde{n}_L^{\uparrow}(V) \quad , \end{aligned} \quad (2.74)$$

mit der effektiven Zustandsdichte

$$\tilde{n}_{L(R)}^{\uparrow(\downarrow)} = \int_{\mu_R(V)}^{\mu_L(V)} n_{L(R)}^{\uparrow(\downarrow)}(E)dE \quad , \quad (2.75)$$

bei der über alle Zustände, die zwischen den elektrochemischen Potentialen rechts (μ_R) und links (μ_L) zum Strom beitragen, integriert wird. Deswegen gilt (2.73) auch bei angelegter Spannung. Die Abweichung von dieser Identität ist ein Maß für den Fehler, der im Julliere-Modell durch die Vernachlässigung der unterschiedlichen Transmissionswahrscheinlichkeiten auftritt. Je größer die Abweichung der spinabhängigen Ströme von der Identität (2.73) ist, desto wichtiger ist der Einfluß der Phaseninformationen der Wellenfunktionen und deren explizite Berücksichtigung wird notwendig. Aber selbst wenn (2.73) erfüllt ist, gibt es immer noch das Problem, daß unklar ist, welche Zustände die effektiven Polarisierungen $P_L(V)$ und $P_R(V)$ bestimmen.

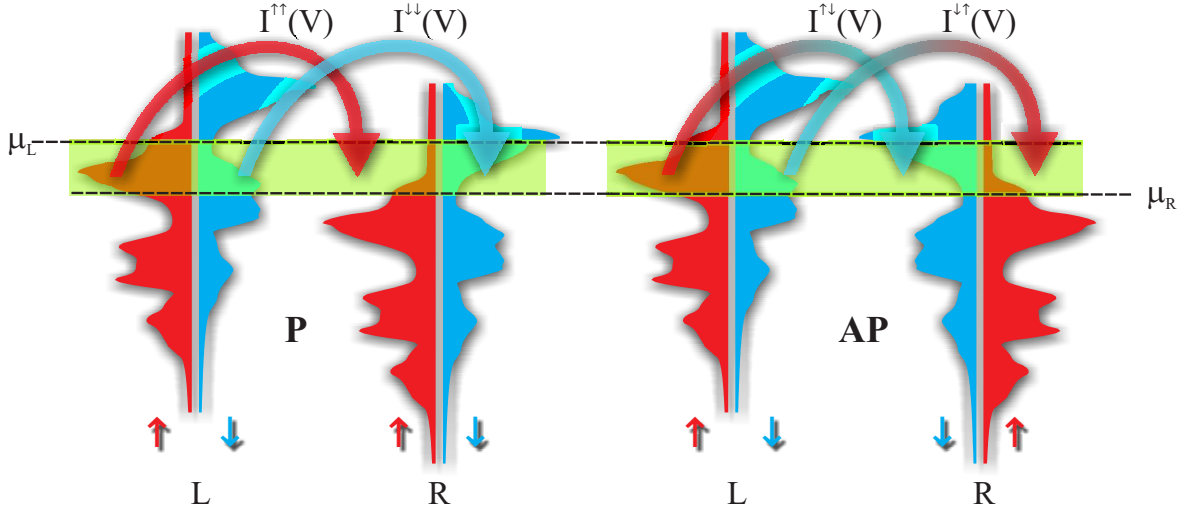


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung der Zustandsdichten in den Zuleitungen links (L) und rechts (R) für die parallele (P) und antiparallele (AP) Orientierung der Magnetisierung der Zuleitungen zueinander bei der angelegten Spannung V und den zugehörigen elektrochemischen Potentialen μ_L und μ_R . Die zugehörigen Ströme im Julliere-Modell [7] sind durch die Pfeile gekennzeichnet.

Um die Größe des Fehlers abzuschätzen, der bei der Verwendung des Julliere-Modells auftritt, wenn die Identität (2.73) verletzt ist, wird ein Proportionalitätsfaktor $f(V)$ definiert

$$I_P(V) = I^{\uparrow\uparrow}(V) + I^{\downarrow\downarrow}(V) \propto f(V) \left[\tilde{n}_R^\uparrow(V) \tilde{n}_L^\uparrow(V) + \tilde{n}_R^\downarrow(V) \tilde{n}_L^\downarrow(V) \right] \quad \text{und}$$

$$I_{AP}(V) = I^{\downarrow\uparrow}(V) + I^{\uparrow\downarrow}(V) \propto \tilde{n}_R^\uparrow(V) \tilde{n}_L^\downarrow(V) + \tilde{n}_R^\downarrow(V) \tilde{n}_L^\uparrow(V) \quad , \quad (2.76)$$

wobei diese Ströme im kohärenten Grenzfall berechnet und nicht mehr im Julliere-Modell abgeschätzt werden. Aus diesem Grund tragen diese Größen kein Dach mehr, um sie von den Strömen aus (2.69) zu unterscheiden. Die Identität (2.73) transformiert sich dann zu

$$I^{\uparrow\uparrow}(V) I^{\downarrow\downarrow}(V) = f^2(V) I^{\downarrow\uparrow}(V) I^{\uparrow\downarrow}(V) \quad . \quad (2.77)$$

Die Größe $f(V)$ kann mittels Gleichung (2.77) aus den in dieser Arbeit im kohärenten Grenzfall des Transportes berechneten Stromspannungskennlinien bestimmt werden. Die Abweichung von $f(V)$ von 1 deutet darauf hin, daß die mittlere Transmissionswahrscheinlichkeit für die P und AP magnetischen Konfiguration unterschiedlich ist. Im Gegensatz dazu haben im Julliere-Modell alle beitragenden Zustände die gleiche Transmissionswahrscheinlichkeit unabhängig von der magnetischen Orientierung.

Zu den Strömen aus Gleichungen (2.69) und (2.76) können die zugehörigen TMR-Verhältnisse in optimistischer Definition abgeleitet werden

$$TMR_{jul} = \frac{\hat{I}_P(V) - \hat{I}_{AP}(V)}{\hat{I}_{AP}(V)} \quad \text{und}$$

$$TMR = \frac{I_P(V) - I_{AP}(V)}{I_{AP}(V)} \quad . \quad (2.78)$$

Die wichtigen Größen, die in dieser Arbeit berechnet werden, sind die Stromdichten $I_P(V)$ und $I_{AP}(V)$. Diese Ströme können über die Gleichungen (2.69) und (2.76) auf

effektive Ströme im Julliere-Modell

$$\hat{I}_P(V) = \frac{1}{f(V)} I_P(V) \text{ und } \hat{I}_{AP} = I_{AP} \quad (2.79)$$

abgebildet werden. Durch Einsetzen dieser Beziehungen in Gleichung (2.78) wird ein Zusammenhang zwischen den beiden TMR-Verhältnissen erhalten

$$TMR_{jul} = \frac{1}{f(V)} (TMR - f(V) + 1) \quad . \quad (2.80)$$

Mit dieser Gleichung liegt eine Möglichkeit vor, den Fehler abzuschätzen, der durch Vernachlässigung der unterschiedlichen Transmissionswahrscheinlichkeiten in der P- und AP-Konfiguration entsteht.

2.2.3 Landauer-Formalismus

Der Zusammenhang zwischen dem Leitwert und der Transmissionswahrscheinlichkeit stellt einen wichtigen Punkt in der Interpretation von gewonnenen Ergebnissen dar. Die Beschreibung dieses Zusammenhangs geht dabei auf eine phänomenologische Herleitung von Landauer [86, 87] zurück. Diese wurde in der Arbeit von Büttiker [88] verallgemeinert. Andere Methoden wie die von Fischer und Lee [89] und von Baranger und Stone [90] beschreiben die Berechnung der Transportgrößen ausgehend von der Lösung der zugehörigen Schrödingergleichung. Letztere Arbeit verwendet die exakten Eigenlösungen des Streuproblems, während Fischer und Lee ebene Wellen verwenden. In beiden Arbeiten kann unter gewissen Annahmen und den zugehörigen Vereinfachungen die Äquivalenz zur Landauer-Formel gezeigt werden. Der Ansatz von Baranger und Stone [90], in dem eine Beschreibung des Leitwerts mithilfe von Greenschen Funktionen vorgenommen wurde, wird im nächsten Abschnitt beschrieben. Die Anwendung dieses Formalismus im KKR-Verfahren, skizziert im Abschnitt 2.2.5, ist die Basis für die Berechnung der Transportgrößen in der vorliegenden Arbeit. Obwohl die Gleichung von Baranger und Stone nur unter bestimmten Voraussetzungen mit der Landauer-Formel übereinstimmt, wird diese oft verwendet, um die erhaltenen Transportgrößen mit der Transmissionswahrscheinlichkeit in Verbindung zu bringen. Deshalb wird immer vom Landauer-Formalismus gesprochen, sobald die Transmissionswahrscheinlichkeit in die Interpretation einbezogen wird, obwohl die eigentlichen Transportgrößen nicht direkt aus der Transmissionswahrscheinlichkeit gewonnen werden. Da auch in der vorliegenden Arbeit von dieser Interpretation Gebrauch gemacht wird, werden in diesem Abschnitt die Grundzüge des Landauer-Formalismus dargelegt.

Es wird von zwei Reservoirs ausgegangen, die durch einen Leiter verbunden sind, wie in Abbildung 2.6 skizziert. Das linke Reservoir hat das elektrochemische Potential μ_L und das rechte Reservoir μ_R . Der Leiter wird als ballistisch angenommen, daß heißt, es findet keinerlei Streuung im Leiter statt, womit die Transmissionswahrscheinlichkeit durch den Leiter gleich 1 ist. Im Gegensatz dazu kann ein Elektron beim Übergang vom Reservoir zum Leiter eine von 1 verschiedene Transmissionswahrscheinlichkeit aufweisen. Der Übergang der Elektronen aus dem Leiter in das zugehörige andere Reservoir wird als reflexionsfrei angenommen, wie in Abbildung 2.6 angedeutet. Somit können die k^+ -Zustände im Leiter nur von Elektronen aus dem linken Reservoir besetzt werden, während die k^- -Zustände nur durch Elektronen aus dem rechten Reservoir besetzt

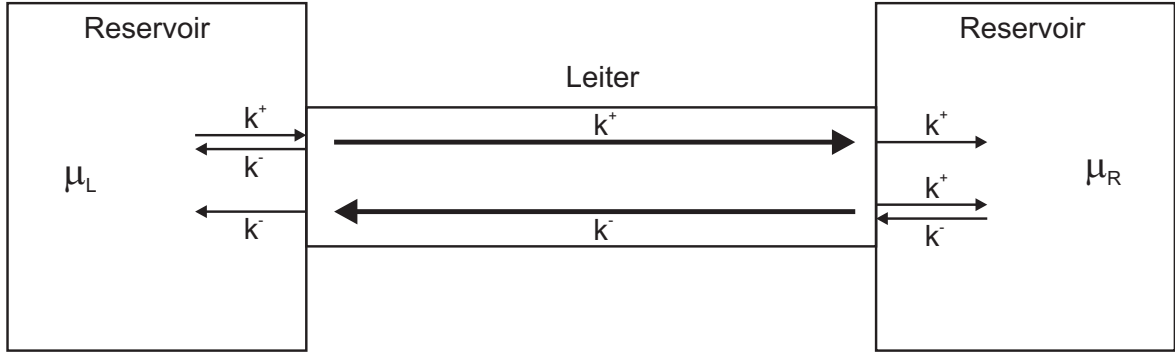


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung der Zustände in einem ballistischen Leiter, der reflexionsfrei an zwei Reservoirs gekoppelt ist.

sind. Aufgrund der endlichen Ausdehnung des Leiters senkrecht zur Stromrichtung entstehen in dieser Richtung gebundene Zustände. Jeder dieser Eigenwerte ist Aufpunkt einer Dispersionsrelation $\epsilon_i(k)$ in Stromrichtung, wobei i der Kanalindex ist und von 1 bis N geht. N ist die maximale Anzahl an Kanälen. Zu einer bestimmten Energie E tragen alle die Kanäle zum Strom bei, die bei dieser Energie besetzt sind. Diese Anzahl an beitragenden Kanälen wird auch als Anzahl der Moden $M(E)$ bezeichnet. Der Strom eines einzelnen k^+ -Zustands ist durch

$$I = n e v \quad (2.81)$$

gegeben, mit der Elektronendichte n , der Elementarladung e und der zugehörigen Geschwindigkeit v . Um den Gesamtstrom zu erhalten, muß über alle beitragenden Zustände summiert werden. Für den einfachen Fall mit nur einem Kanal, wird der Strom von links nach rechts I^+ (positive z -Richtung) durch Summation aller k^+ -Zustände berechnet

$$I^+ = \frac{e}{L} \sum_{k^+} \underbrace{v_z(E)}_{=\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z}} f^+(\epsilon(+k)) . \quad (2.82)$$

f^+ ist die Wahrscheinlichkeit mit der der Zustand k^+ besetzt ist. Die Elektronendichte in Stromrichtung ist $n = \frac{1}{L}$ mit L als Länge des Leiters. Die Überführung der Summe über k in ein Integral mit Spinfaktor 2

$$\sum_k \longrightarrow 2 \frac{L}{2\pi} \int dk \quad (2.83)$$

liefert für den Strom

$$\begin{aligned} I^+ &= \frac{e}{\pi} \int \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} f^+(E) dk \\ &= \frac{e}{\pi \hbar} \int f^+(E) dE . \end{aligned} \quad (2.84)$$

Eine einfache Verallgemeinerung stellt die Einbeziehung der verfügbaren Moden $M(E)$

$$I^+ = \frac{2e}{h} \int M(E) f^+(E) dE \quad (2.85)$$

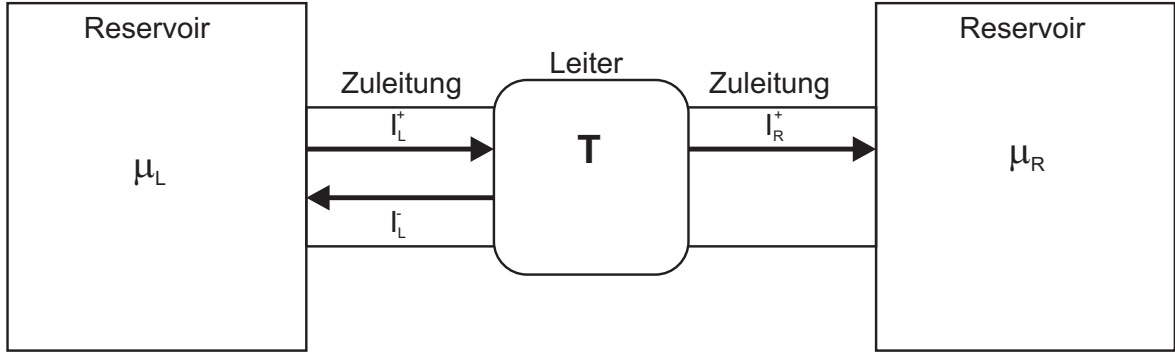


Abbildung 2.7: Schematische Darstellung der Ströme zwischen zwei Reservoirs mit ballistischen Zuleitungen und einem Leiter mit der Transmissionswahrscheinlichkeit T .

dar. Analog kann der Strom in negativer Transportrichtung I^- formuliert werden. Unter der Annahme, daß die Modenanzahl im Energiebereich $\mu_R < E < \mu_L$ konstant ist, kann der Gesamtstrom bei $0K$ als

$$I = I^+ - I^- = \frac{2e}{h} M (\mu_L - \mu_R) \quad (2.86)$$

geschrieben werden. Dabei wurde ausgenutzt, daß die Besetzungsfunktionen f^+ und f^- Fermi-Verteilungen bei $T = 0K$ sind. Der Sprung erfolgt bei dem jeweiligen elektrochemischen Potential μ_L beziehungsweise μ_R . Der zugehörige Leitwert g_K ist gegeben durch

$$\begin{aligned} g_K = \frac{I}{V} &= \frac{I}{(\mu_L - \mu_R)/e} = \frac{2e^2}{h} M \\ &= g_0 M \quad \text{mit } g_0 \approx \frac{1}{12,9k\Omega}. \end{aligned} \quad (2.87)$$

g_0 ist das Leitwertquantum und der Leitwert ist bezüglich g_0 quantisiert. Obwohl ein widerstandsloser Leiter angenommen wurde, tritt ein endlicher Leitwert auf. Die Ursache hierfür ist die Streuung der Elektronen an der Kontaktfläche vom Reservoir zum Leiter. Deswegen wird der auftretende Widerstand als Kontaktwiderstand $R_K = g_K^{-1}$ bezeichnet. Je größer die Querschnittsfläche des Leiters, um so mehr Moden treten bei der Energie E auf und um so kleiner ist der Kontaktwiderstand.

Im nächsten Schritt wird ein Leiter angenommen, der die Transmissionswahrscheinlichkeit T aufweist. Wie in Abbildung 2.7 skizziert, ist dieser Leiter über Zuleitungen an die Reservoirs gekoppelt. Die Zuleitungen sollen die gleiche Modenanzahl M wie der Leiter aufweisen, sind aber ballistisch und analog zu Abbildung 2.6 reflektionsfrei mit den Reservoirs verbunden. Der Strom I_L^+ , der von dem linken Reservoir in die linke Zuleitung fließt, ist dann mit Hilfe von (2.86) durch

$$I_L^+ = \frac{2e}{h} M (\mu_L - \mu_R) \quad (2.88)$$

gegeben. Der Streuer sorgt dafür, daß dieser Strom nur mit dem Anteil T in die rechte Zuleitung fließt und damit auch in das rechte Reservoir abgegeben wird

$$I_R^+ = T I_L^+ = \frac{2e}{h} M T (\mu_L - \mu_R). \quad (2.89)$$

Der reflektierte Anteil des Stroms I_L^- wird wieder an das linke Reservoir abgegeben

$$I_L^- = \frac{2e}{h} M (1 - T) (\mu_L - \mu_R) . \quad (2.90)$$

Für den Gesamtstrom I folgt somit

$$I = I_L^+ - I_L^- = I_R^+ = \frac{2e}{h} M T (\mu_L - \mu_R) \quad (2.91)$$

und für den zugehörigen Leitwert

$$g = \frac{2e^2}{h} M T = g_0 M T . \quad (2.92)$$

Dabei wird vorausgesetzt, daß alle Kanäle die gleiche Transmissionswahrscheinlichkeit aufweisen. Ist dies nicht der Fall, so kann (2.92) zu

$$g = g_0 \sum_m^M T_m \quad (2.93)$$

verallgemeinert werden, wobei m über alle Kanäle läuft. Diese Gleichung (2.93) ist die Grundaussage des Landauer-Formalismus und stellt die Verbindung zwischen der Transmissionswahrscheinlichkeit und dem Leitwert her. Diese Beziehung gilt streng nur im Grenzfall verschwindender Spannung, da alle Größen, im speziellen die Transmissionswahrscheinlichkeit, als energieunabhängig betrachtet werden. Daraus ergibt sich, daß im allgemeinen die Transmissionswahrscheinlichkeit bei der Fermienergie berechnet wird. Dieser Wert wäre dann unabhängig von der Spannung, wodurch der Strom immer linear von der Spannung abhängt. Eine einfache Möglichkeit, um bei der Spannungsabhängigkeit über diese strenge lineare Antwort hinauszugehen, ist im Abschnitt 2.2.6 dargestellt.

Die Gleichung (2.93) kann bezüglich ihrer Bestandteile weiter analysiert werden. Für $T = 1$ wird der Kontaktwiderstand (2.87) erhalten, der auch für $T < 1$ enthalten sein muß. Damit kann der Widerstand in zwei Anteile zerlegt werden

$$R = g^{-1} = g_K^{-1} + g_S^{-1} = \frac{h}{2e^2 M} + \frac{h}{2e^2 M} \frac{1 - T}{T} \quad (2.94)$$

mit $R_K = g_K^{-1}$ als Kontaktwiderstand und $R_S = g_S^{-1}$ als Widerstand hervorgerufen durch den Streuer.

Zusammenfassend liefert der empirische Zugang von Landauer eine Verbindung zwischen dem Leitwert und der Transmissionswahrscheinlichkeit. Alle Transporttheorien die in ihrer Diskussion die Transmissionswahrscheinlichkeit verwenden, werden aus diesem Grund dem Landauer-Formalismus zugeschrieben, auch wenn andere Ansätze keine empirische Herleitung verwenden und im allgemeinen auch nicht die Gleichung (2.93) exakt wiedergeben können.

2.2.4 Beschreibung des elektronischen Transports mit Greenschen Funktionen

Einen anderen Zugang zur Berechnung der Transportgrößen stellt die Betrachtung einer Störung in Form eines äußeren elektrischen Feldes $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ dar. Die Antwort des Systems auf diese Störung und der damit verbundene Stromfluß soll in diesem Abschnitt skizziert werden. Dabei wird nur die lineare Antwort berücksichtigt, daß heißt, ausgehend von einer Störungsreihe wird nur der lineare Term in $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ verwendet. Da die Antwort auf das äußere elektrische Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ die Stromdichte \mathbf{j} ist, kann diese mit Hilfe eines Proportionalitätsfaktors als

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \underline{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') \quad (2.95)$$

geschrieben werden. Dabei ist $\underline{\sigma}$ die nicht-lokale Antwortfunktion. Der erste Schritt ist, diese Antwortfunktion quantenmechanisch mit Hilfe des Stromdichteoperators zu beschreiben. Der nachfolgend kurz dargestellte Weg folgt dabei der Arbeit von Baranger und Stone [90]. In den Grundzügen ist die Herleitung äquivalent zu der Herleitung der Kubo-Formel [91, 92]. Die Vereinfachung der Kubo-Formel zur Kubo-Greenwood-Formel [92] stimmt von der Struktur her mit der von Baranger und Stone hergeleiteten Formel bei räumlicher Mittelung überein. Die Erweiterung der Arbeit von Baranger und Stone [90] ist die direkte Berechnung des Leitwerts ohne explizit die nicht-lokale Antwortfunktion und damit verbunden den Leitfähigkeitstensor zu berechnen. Die zusätzlichen Erweiterungen beruhen auf der Einbeziehung eines Magnetfelds und der Verwendung von mehreren Zuleitungen. Die beiden letzt genannten Punkte sind im folgenden skizzierten Weg zur besseren Darstellung nicht mit einbezogen. Insbesondere gibt es für den in der vorliegenden Arbeit betrachteten Fall der Tunnelkontakte nur zwei Zuleitungen.

Ausgangspunkt ist ein System wechselwirkungsfreier Elektronen in einem statischen Potential, beschrieben durch den Hamiltonoperator H_0 . Der im Abschnitt 2.1.1 vorgestellte Hamiltonoperator in der Kohn-Sham-Gleichung (2.14) erfüllt diese Bedingung. Die zugehörigen Eigenfunktionen ψ_α und Eigenwerte ϵ_α

$$H_0 \psi_\alpha(\mathbf{r}) = \epsilon_\alpha \psi_\alpha(\mathbf{r}) \quad (2.96)$$

seien eine orthonormierte Basis. An dieses System wird eine Wechselspannung

$$V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r}) \cos(\omega t) e^{-\delta|t|} \quad (2.97)$$

mit resultierendem elektrischen Feld

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cos(\omega t) e^{-\delta|t|} \quad (2.98)$$

mit $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r})$ angelegt. Die Kreisfrequenz der Wechselspannung ist ω und $1/\delta$ ist eine charakteristische Zeit für das Ein- und Ausschalten der Störung. Der zugehörige Hamiltonoperator

$$H(t) = H_0 + H_1(t) = H_0 + eV(\mathbf{r}, t) \quad (2.99)$$

und die Dichtematrix

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho_1(t) \quad (2.100)$$

sind jetzt zeitabhängig. Die Zeitentwicklung der Dichtematrix ist durch die Liouville-Gleichung

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\rho}{dt} = i\hbar \frac{d\rho_1}{dt} &= [H, \rho]_- \\ &= [H_0, \rho_1(t)]_- + [H_1(t), \rho_0]_- + [H_1(t), \rho_1(t)]_- \end{aligned} \quad (2.101)$$

gegeben. Der letzte Summand beschreibt alle höheren Ordnungen im elektrischen Feld, da sowohl H_1 explizit als auch ρ_1 implizit vom elektrischen Feld abhängen. Die lineare Antwort, die in diesem Fall nur betrachtet werden soll, liefern die ersten beiden Summanden auf der rechten Seite. Die Lösung dieser Differentialgleichung ergibt $\rho_1(t)$. Diese Dichtematrix kann verwendet werden, um die Stromdichte

$$\mathbf{j}_1(\mathbf{r}, t) = \text{Tr} \left[\rho_1(t) \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) \right] \quad (2.102)$$

durch Spurbildung (Tr) des Produktes aus Dichtematrix und Stromdichteoperator $\hat{\mathbf{j}}$ zu erhalten. Die Gleichgewichtsstromdichte \mathbf{j}_0 zu ρ_0 beziehungsweise H_0 zugehörig, liefert keine Beiträge zur resultierenden Gesamtstromdichte. Die Matrixelemente des Stromdichteoperators sind durch

$$\left[\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) \right]_{\beta\alpha} = \frac{e\hbar}{2mi} \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \quad (2.103)$$

gegeben mit

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) &= \psi_\beta^*(\mathbf{r}) \overleftrightarrow{\nabla} \psi_\alpha(\mathbf{r}) \\ &= \psi_\beta^*(\mathbf{r}) \nabla \psi_\alpha(\mathbf{r}) - \psi_\alpha(\mathbf{r}) \nabla \psi_\beta^*(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.104)$$

als reduziertem Stromdichteoperator. Die Berechnung der Stromdichte \mathbf{j}_1 nach (2.102) ist relativ aufwendig. Aus diesem Grund ist hier nur das Ergebnis

$$\mathbf{j}_1(\mathbf{r}) = \frac{e^2 \hbar^3 \pi}{4m^2} \int d\alpha \int d\beta f'(\epsilon_\alpha) \delta(\epsilon_\beta - \epsilon_\alpha) \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}' \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}') \quad (2.105)$$

mit $f'(\epsilon)$ als Ableitung der Besetzungsfunktion angegeben. Auf eine genaue Herleitung sei auf die Literatur verwiesen [90, 93]. Jedoch sollen die dabei verwendeten Näherungen erwähnt werden. Wie bereits zu Anfang erläutert, gilt diese Gleichung nur ohne externes Magnetfeld. Des weiteren gilt dieser Ausdruck für den Grenzfall einer statisch angelegten Spannung. Dabei wird zuerst der Grenzwert $\delta \rightarrow 0$ und anschließend $\omega \rightarrow 0$ gebildet. Letztere Grenzwertbildung ist auch Bestandteil der Spezialisierung der Kubo-Formel auf die Kubo-Greenwood-Formel [92].

Ein Vergleich von (2.95) und (2.105) liefert die nicht-lokale Antwortfunktion

$$\underline{\sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2 \hbar^3 \pi}{4m^2} \int d\alpha \int d\beta f'(\epsilon_\alpha) \delta(\epsilon_\beta - \epsilon_\alpha) \mathbf{W}_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) \mathbf{W}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}') . \quad (2.106)$$

Durch Integration der Stromdichte \mathbf{j}_1 über eine Querschnittsfläche A_R wird die Gesamtstromdichte

$$I = \int_{A_R} d\mathbf{s} \mathbf{j}_1(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{z}} \quad (2.107)$$

mit $\hat{\mathbf{z}}$ als Einheitsvektor in Stromrichtung erhalten. Die Verwendung von (2.95) liefert [93]

$$g = \frac{I}{V} = \int_{A_R} ds \int_{A_L} ds' \hat{\mathbf{z}} \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \cdot \hat{\mathbf{z}}', \quad (2.108)$$

wobei A_L eine weitere Querschnittsfläche in den Zuleitungen außerhalb der Störregion ist. Dabei wird die Tatsache ausgenutzt, daß $E = 0$ in den Zuleitungen in großer Entfernung von der Störregion ist.

Das beim Einsetzen von (2.106) in (2.108) entstehende Produkt der reduzierten Stromdichteoperatoren kann mit Hilfe von Greenschen Funktionen dargestellt werden. In den Leitwert eingesetzt, ergibt sich [93]

$$g = -\frac{e^2 \hbar^3}{16\pi m^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon [-f'(\epsilon)] \int_{A_R} ds \int_{A_L} ds' [G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \epsilon) - G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \epsilon)] \overleftrightarrow{\nabla}_z \overleftrightarrow{\nabla}_{z'} [G^+(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \epsilon) - G^-(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \epsilon)] \quad (2.109)$$

Die auftretenden Terme $G^+ \overleftrightarrow{\nabla}_z \overleftrightarrow{\nabla}_{z'} G^+$ und $G^- \overleftrightarrow{\nabla}_z \overleftrightarrow{\nabla}_{z'} G^-$ sind für ebene Wellen [90] und Blochwellen [94] exakt 0. Wird zusätzlich der Transport bei $0K$ betrachtet, wodurch die Besetzungsverteilung eine Sprungfunktion und die Ableitung dieser eine δ -Distribution wird, ergibt sich für den Leitwert

$$g = \frac{e^2 \hbar^3}{8\pi m^2} \int_{A_R} ds \int_{A_L} ds' G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E_F) \overleftrightarrow{\nabla}_z \overleftrightarrow{\nabla}_{z'} G^-(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E_F) \quad (2.110)$$

mit der Greenschen Funktion bei der Fermienergie E_F .

Da wie im Abschnitt 2.1.5 beschrieben, das KKR-Verfahren die Greenschen Funktion des Systems bereitstellt, kann mit Gleichung (2.110) im Prinzip der Leitwert berechnet werden. Im nächsten Abschnitt wird kurz auf die Darstellung der Formel von Baranger und Stone im KKR-Verfahren eingegangen. Zum Abschluß sei noch erwähnt, daß für den Fall von ebenen Wellen [90] und von Blochwellen [94] die Äquivalenz von (2.110) zur Landauer-Formel (2.93) gezeigt werden kann.

2.2.5 Berechnung des Leitwerts im KKR-Verfahren

Der erste Schritt zur Berechnung des Leitwerts nach Gleichung (2.110) im KKR-Formalismus (siehe Abschnitt 2.1.5) ist die Transformation auf zellzentrierte Koordinaten (siehe Abbildung 2.3). Dabei geht das Integral über die Flächen A_R und A_L in eine Summation über n_R und n_L und in eine Integration über A_{n_R} und A_{n_L} über

$$\int_{A_R} ds \int_{A_L} ds' \longrightarrow \sum_{n_R n_L} \int_{A_{n_R}} ds \int_{A_{n_L}} ds' \quad (2.111)$$

Die Summe über n_R (n_L) läuft dabei über alle ASA-Kugeln, die durch die Ebene A_R (A_L) geschnitten werden. A_{n_R} (A_{n_L}) sind die Schnittflächen der Ebene mit der jeweiligen Kugel. In der Arbeit von Mavropoulos *et al.* [94] wurde gezeigt, daß diese numerische Integration sehr ungenau ist, und daß mit einer Volumenintegration über die gesamte ASA-Kugel ein befriedigenderes Ergebnis erzielt werden kann. Diese Volumenintegration wurde in der vorliegenden Arbeit verwendet, wobei auch über eine dickere Schicht, die mehrerer Kugeln in Stromrichtung umfasst, gemittelt wurde. Konvergenztests bezüglich dieser Schichtdicke sind im Anhang 5.3 zu finden.

Durch Einführung der zellzentrierten Koordinaten kann die Entwicklung der Greenschen Funktion nach Gleichung (2.57) eingesetzt werden. Da die Flächen A_R und A_L räumlich getrennt gewählt werden, sind auch n_R und n_L immer unterschiedlich. Somit entfällt der Einzelstreubeitrag aus der Entwicklung. Unter Ausnutzung der Symmetrieeigenschaft

$$G_{LL'}^{n_R n_L^+} = (G_{L'L}^{n_L n_R^-})^* \quad (2.112)$$

zwischen retardierter und avancierter Greenscher Funktion und Einführung der Strommatrixelemente

$$J_{LL'}^n = \int_{A_n} ds \phi_L^n(\mathbf{r}) \nabla_z \phi_{L'}^n(\mathbf{r}) \quad (2.113)$$

kann der Leitwert im KKR-Verfahren wie folgt geschrieben werden

$$g = \frac{e^2 \hbar^3}{8\pi m^2} \sum_{n_R n_L} \sum_{LL'} \sum_{L''L'''} [J_{LL''}^{n_R} - (J_{L''L}^{n_R})^*] [J_{L'L'''}^{n_L} - (J_{L''L'}^{n_L})^*] g_{LL'}^{n_R n_L} (g_{L''L'''}^{n_R n_L})^* . \quad (2.114)$$

Dabei sind sowohl die Strommatrixelemente als auch die Strukturkonstanten g bei der Fermienergie einzusetzen. Wie bereits erwähnt, wird die Flächenintegration in Gleichung (2.113) im Programm als Volumenintegration ausgeführt, wie es ausführlich in [94] diskutiert ist. Der letzte Schritt ist die Ausnutzung der Translationsinvarianz senkrecht zur Transportrichtung analog zu Abschnitt 2.1.5.2. Damit wird die Summation über die unendliche Anzahl an Plätzen n_L und n_R in eine Summation über die Basisatome μ_L und μ_R und eine Integration über die erste Brillouinzone überführt. Die Zustände sind dabei durch die Quantenzahl $\mathbf{k}_{||}$ bestimmt. Somit geht die Summe über n_R und n_L über in

$$\sum_{n_R n_L} \longrightarrow \int_{1.BZ} d\mathbf{k}_{||} \sum_{\mu_R \mu_L} . \quad (2.115)$$

Zusätzlich wird aus dem Leitwert aus Gleichung (2.114) eine Leitwertdichte, die den Leitwert pro Einheitszelle repräsentiert. Diese Leitwertdichte kann als

$$g = g_0 \int_{1.BZ} d\mathbf{k}_{||} T_{\mathbf{k}_{||}}(E_F) \quad (2.116)$$

mit

$$T_{\mathbf{k}_{||}} = \frac{1}{g_0} \frac{e^2 \hbar^3}{8\pi m^2} \sum_{\mu_R \mu_L} \sum_{LL'} \sum_{L''L'''} [J_{LL''}^{n_R} - (J_{L''L}^{n_R})^*] [J_{L'L'''}^{n_L} - (J_{L''L'}^{n_L})^*] [g_{LL'}^{\mu_R \mu_L} (g_{L''L'''}^{\mu_R \mu_L})^*]_{\mathbf{k}_{||}} \quad (2.117)$$

geschrieben werden. Aus dem Vergleich von (2.116) mit der Landauer-Formel (2.93) kann $T_{\mathbf{k}_{||}}$ als $\mathbf{k}_{||}$ -aufgelöste Transmissionswahrscheinlichkeit interpretiert werden. In der Diskussion der Ergebnisse in der vorliegenden Arbeit werden $\mathbf{k}_{||}$ -aufgelöste Darstellungen der Transmissionswahrscheinlichkeit verwendet, um die zum Strom beitragenden Zustände zu charakterisieren.

Für die jeweiligen Spinkanäle werden die Gleichungen (2.116) beziehungsweise (2.117) getrennt ausgewertet und dann addiert, was einer Parallelschaltung beider Spinkanäle entspricht [95].

2.2.6 Spannungsabhängigkeit

Nachdem in den vorhergehenden Abschnitten die Berechnung des Leitwerts für verschwindende Spannungen gezeigt wurde, soll in diesem Abschnitt der Transport bei endlicher Spannung diskutiert werden. Grundsätzlich kann dabei von zwei Ansätzen ausgegangen werden: zum einen die weitere Verwendung der Gleichgewichts-Greenschen Funktion und zum anderen die Erweiterung auf Nichtgleichgewichts-Greenschen Funktionen. Letztere Ansätze werden unter dem Begriff Keldysh-Formalismus [96] zusammengefaßt, während Erstere, wie auch in der vorliegenden Arbeit verwendet, als Kubo-Formalismus (lineare Antwort) bezeichnet werden. Im Keldysh-Formalismus wird die Gleichgewichts-Greensche Funktion um einen Anteil, der die Störung durch das angelegte elektrische Feld beschreibt, erweitert. Dadurch ergeben sich Korrekturen zum Transport, die allerdings für die Fe/MgO/Fe-Tunnelkontakte bei Spannungen, die im Experiment relevant sind, sehr gering sind [97]. Vor allem wird der Transport immer noch als streng kohärent und elastisch betrachtet und es werden keine zusätzlichen inelastischen Streumechanismen berücksichtigt. Der Vorteil des Keldysh-Formalismus liegt in der selbstkonsistenten Bestimmung des Spannungsabfalls und der damit auftretenden Umladungseffekte, wie sie an der Grenzfläche zwischen Zuleitung und Barriere in einem Tunnelkontakt ähnlich zum Plattenkondensator auftreten. Wie bereits erwähnt, sind diese Einflüsse für das System Fe/MgO/Fe sehr gering.

Bei dem in der vorliegenden Arbeit verwendeten Kubo-Formalismus ist eine Annahme über den räumlichen Verlauf des Spannungsabfalls notwendig. Für die Tunnelbarriere ist aufgrund der stark unterschiedlichen Polarisierbarkeit ein kompletter Spannungsabfall über der Barriere anzunehmen. Dieser Abfall möge innerhalb der Barriere analog zum Plattenkondensator linear verlaufen. Diese Annahme wurde durch selbstkonsistente Rechnungen bestätigt [97]. Somit werden die selbstkonsistent bestimmten Gleichgewichtspotentiale um diesen angenommen externen Potentialverlauf, wie in Abbildung 2.8 skizziert, verschoben. In dem dargestellten Fall werden die Potentiale in den Zuleitungen symmetrisch jeweils um die Hälfte der angelegten Spannung verschoben. Da nur von elastischen Prozessen ausgegangen wird, kann für jede Energie innerhalb des Spannungsfensters $\mu_R < E < \mu_L$ der Leitwert nach (2.116) beziehungsweise unter

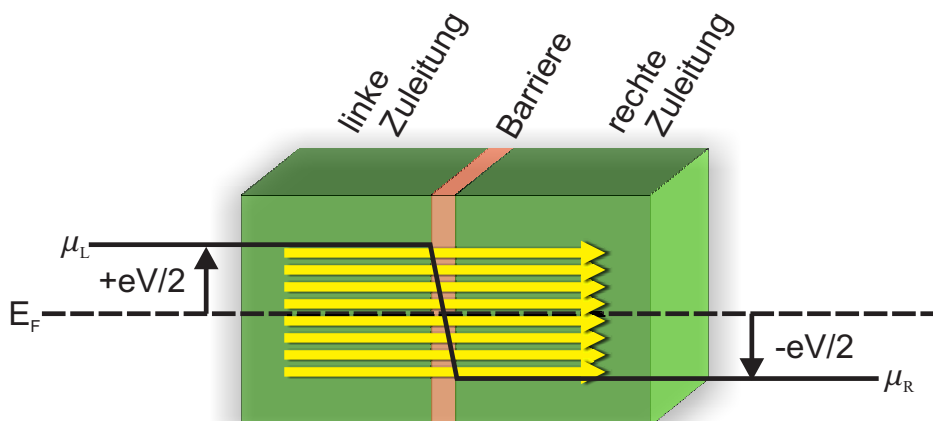


Abbildung 2.8: Angenommener linearer Verlauf des Spannungsabfalls in der Tunnelbarriere. Die gelben Pfeile symbolisieren die zu berechnenden Beiträge zum Strom im Energiebereich $\mu_R < E < \mu_L$.

Ausnutzung der Landauer-Formel (2.93) die Transmissionswahrscheinlichkeit $T(E, V)$ berechnet werden. Der Gesamtstrom ist proportional zum Integral über diese Transmissionswahrscheinlichkeiten

$$I(V) = g_0 \frac{1}{e} \int_{\mu_R}^{\mu_L} T(E, V) dE . \quad (2.118)$$

Daraus folgt für den Leitwert

$$g(V) = \frac{I(V)}{V} = g_0 \frac{1}{eV} \int_{\mu_R}^{\mu_L} T(E, V) dE , \quad (2.119)$$

der dann ebenfalls von der angelegten Spannung abhängt. Obwohl die einzelnen $T(E, V)$ in linearer Antwort berechnet werden, geht dieses Modell darüber hinaus, da der Leitwert nicht konstant in Abhängigkeit der Spannung ist. Allerdings werden bezüglich der Störungsreihe immer nur lineare Terme bezüglich des elektrischen Felds berücksichtigt.

Es sind alle Bestandteile, die zur Untersuchung der Transportgrößen eines Tunnelkontaktes notwendig sind, dargelegt worden. Die mit Hilfe der in den Abschnitten 2.1.1 bis 2.1.5 beschriebenen Methoden gewonnenen selbstkonsistenten Potentiale der Tunnelkontakte werden wie in diesem Abschnitt beschrieben um die angelegte Spannung verschoben. Durch die Berechnung der Transmissionswahrscheinlichkeit wie in den Abschnitten 2.2.3 bis 2.2.5 beschrieben, kann nach Gleichung (2.118) die Strom-Spannungs-Kennlinie berechnet werden. Die Ergebnisse der vielfältigen Untersuchungen werden im nächsten Kapitel ausführlich diskutiert.

Kapitel 3

Ergebnisse und Diskussion

In vorliegender Arbeit wurden die wichtigsten strukturellen Eigenschaften eines planaren Tunnelkontakts, die die elektronischen Transportgrößen beeinflussen können, theoretisch untersucht. Als Beispiel für einen Tunnelkontakt wurde Fe/MgO/Fe verwendet. Der Vorteil des Systems ist die gute Paßfähigkeit der Gitterstrukturen von Fe und MgO. Dadurch wird epitaktisches Wachstums einer kristallinen MgO-Barriere zwischen kristallinen Fe-Elektroden ermöglicht. Deshalb wird dieses System sehr breit sowohl experimentell [30, 31, 83, 84] als auch theoretisch [98, 99], [E1] untersucht. Zunächst soll die prinzipielle Entstehung des TMR-Effekts für dieses System im Abschnitt 3.1 durch die Analyse der Elektronenstruktur des Elektroden- und des Barrierenmaterials erklärt werden. Für die sich daran anschließende detaillierte Analyse ist es zweckmäßig, einen Tunnelkontakt in drei Bereiche einzuteilen: die Grenzfläche zwischen den Elektroden und der Barriere (Abschnitt 3.2), die Barriere (Abschnitt 3.3) und die Elektroden, deren Struktur im Abschnitt 3.4 diskutiert wird. Die jeweiligen Abschnitte beginnen mit einem Überblick über den experimentellen Stand, an dem eine kurze Darstellung der zu untersuchenden Aspekte anknüpft und schließen mit der Darlegung und der Diskussion der erzielten Ergebnisse im Vergleich zu experimentellen und anderen theoretischen Arbeiten ab.

3.1 Entstehung des TMR-Effekts in Fe/MgO/Fe

In diesem Abschnitt sollen zunächst einige generelle Aussagen zu dem betrachteten Tunnelkontakt Fe/MgO/Fe und zu den Ursachen des TMR-Effekts in diesem System getroffen werden. Dazu wird im Abschnitt 3.1.1 zunächst sowohl die atomare Struktur als auch die zugehörige selbstkonsistent berechnete Elektronenstruktur diskutiert. Im sich daran anschließenden Abschnitt 3.1.2 wird die Bedeutung der komplexen Bandstruktur der Barriere für den TMR-Effekt skizziert. Die Einbeziehung der lokalen Zustandsdichte im Abschnitt 3.1.3 ermöglicht die Analyse der zum Tunnelstrom beitragenden Zustände.

3.1.1 Atomare und elektronische Struktur von Fe/MgO/Fe

In der vorliegenden Arbeit wurden für die atomare Struktur der Fe/MgO/Fe-Tunnelkontakte von Meyerheim *et al.* [49, 50] experimentell gewonnene Daten verwendet. Wie im Abschnitt 3.2 gezeigt wird, hat die atomare Struktur der Grenzflächen entscheidenden Einfluß auf die Transportgrößen. Aus diesem Grund ist eine detaillierte Analyse

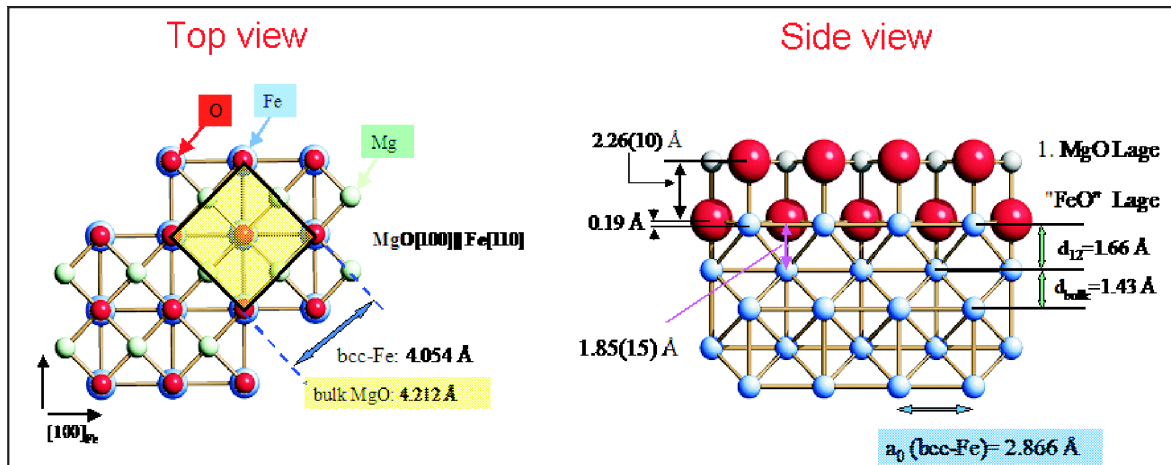


Abbildung 3.1: Strukturmodell der Grenzfläche Fe zu MgO [49].

der Grenzflächenstruktur von essentieller Bedeutung. Die Untersuchungen von Meyerheim *et al.* [49, 50] zeigen die Ausbildung einer FeO-Schicht an der Grenzfläche von Fe zu MgO. Es tritt eine Relaxation der Lagenabstände im Fe und im MgO in der Nähe der Grenzfläche auf. Die strukturellen Daten sind in der Abbildung 3.1 dargestellt. Es ist zu erkennen, daß der Abstand der letzten beiden Monolagen Fe etwas größer ist als der Monolagenabstand in reinem Fe. Bei der entstehenden FeO-Schicht sind die O-Atome um circa 0.2\AA aus der Fe-Ebene in Richtung MgO verschoben. Zusätzlich ist die FeO Schicht nicht vollständig oxidiert, sondern nur 60% der Sauerstoffplätze sind besetzt. Aktuelle Untersuchungen aus der gleichen Arbeitsgruppe zeigen eine ähnliche FeO-Schicht an der anderen Grenzfläche von MgO zu Fe [51]. In anderen Experimenten [31, 83] wird die Ausbildung einer FeO-Schicht durch die Regelung des Sauerstoffdrucks unterdrückt. Bevor die Analyse des Einflusses einer FeO-Schicht auf die Spannungsabhängigkeit des Stroms und des TMR-Verhältnisses vorgenommen wird (Abschnitt 3.2), soll in diesem Abschnitt die Elektronenstruktur am Beispiel eines idealen Tunnelkontakts diskutiert werden. Als idealer Kontakt wird ein System ohne FeO-Schicht bezeichnet. Die Relaxation der Fe-Lagen wird jedoch entsprechend Abbildung 3.1 angenommen.

Die selbstkonsistenten Berechnungen der Elektronenstruktur erfolgten mit 4 Monolagen MgO für die Untersuchung der Grenzfläche (Abschnitt 3.2) und mit 6 Monolagen MgO bei den Untersuchungen zur Barrierendicke (Abschnitt 3.3) sowie zur Struktur der Elektroden (Abschnitt 3.4). In allen Fällen ist die magnetische Entkopplung der beiden Grenzflächen durch die Barriere gewährleistet, um die Potentiale für die Berechnung der AP-Anordnung aus der P-Anordnung der Elektroden zueinander zu erhalten. Dies geschieht, indem in einer Hälfte des Tunnelkontakts die Potentiale des Majoritäts- und Minoritätsspins vertauscht werden, ohne einen zusätzlichen selbstkonsistenten Zyklus zu durchlaufen (frozen potential approximation [100, 101]).

Als ein Ergebnis der Berechnungen der Elektronenstruktur des Tunnelkontakts mit idealen Grenzflächen und vier Monolagen MgO ist die lokale Zustandsdichte von Fe fünf Monolagen entfernt von der Barriere und die von MgO in der Mitte der Barriere in Abbildung 3.2 dargestellt. Die lokale Zustandsdichte von Fe an der Grenzfläche wird im Abschnitt 3.2.2 diskutiert. Die lokale Zustandsdichte von Fe fünf Monolagen entfernt von der Barriere ist identisch zu der von kristallinem Fe. Die Zustandsdichte von MgO weist eine Bandlücke von $0.41Ry$ auf. Dieser Wert ist kleiner als der experi-

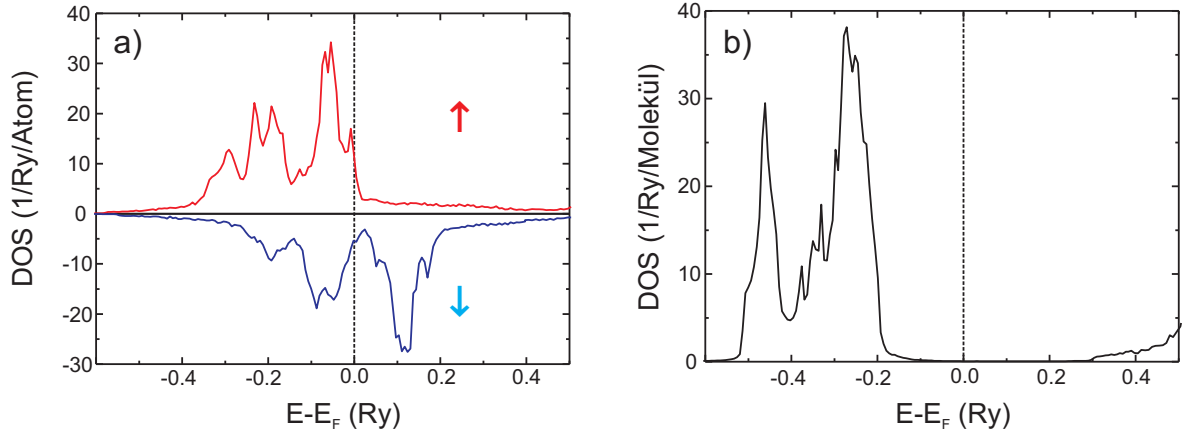


Abbildung 3.2: Lokale Zustandsdichte von a) Fe in fünf Monalagen Entfernung von der Barriere und b) MgO in der Mitte der Barriere.

mentelle Wert von $0.57Ry$ [102]. Der Grund hierfür ist die Behandlung innerhalb der LDA. Eine verbesserte Beschreibung der Korrelationseffekte liefert eine deutlich bessere Übereinstimmung der Breite der Bandlücke mit dem Experiment [103]. Der Abbruch der Drehimpulsentwicklung der Greenschen Funktion (2.57) bei endlichen Werten kann geringe Fehler in der Ladungsdichte verursachen. Diese Fehler fallen nur bei sehr kleinen oder verschwindenden Zustandsdichten an der Fermienergie wie zum Beispiel bei einer Bandlücke ins Gewicht. Diese Fehler können dazu führen, daß die Fermienergie nicht genau in der Bandlücke von MgO liegt, sondern leicht verschoben an der Valenzbandkante. Aus diesem Grund wurden für die Berechnung der Leitwerte falls erforderlich, die selbstkonsistenten Potentiale der zentralen MgO-Lagen so adjustiert, daß die Fermienergie innerhalb der Bandlücke liegt.

3.1.2 Komplexe Bandstruktur der Barriere

Im vorherigen Abschnitt wurde die Bandstruktur mit rein reellen Wellenvektoren an Hand der Zustandsdichte diskutiert. Neben dieser reellen Bandstruktur existiert eine komplexe Bandstruktur, bei der für eine betrachtete Energie die zugehörige Lösung der Schrödingergleichung einen komplexen Vektor \mathbf{k} liefert. Die zugehörigen Wellenfunktionen sind exponentiell an- oder absteigend. Dieses exponentielle Verhalten ist durch den Imaginärteil von \mathbf{k} bestimmt. Diese Zustände sind nicht von Bedeutung in Volumen-Systemen, jedoch in Systemen mit gebrochener Symmetrie.

Für das Material der Barriere eines Tunnelkontakts kann die komplexe Bandstruktur innerhalb der Bandlücke berechnet werden. Diese gibt, bei Betrachtung der Komponente in Stromrichtung k_{\perp} , Aufschluß darüber, wie die elektronischen Zustände sich innerhalb der Barriere verhalten. Zusammen mit den Anschlußbedingungen an der Grenzfläche von den Elektroden zur Barriere ist dadurch die Transmissionswahrscheinlichkeit bestimmt. In einem eindimensionalen Modell unter Annahme eines komplexen Wellenvektors innerhalb der Barriere kann die Abhängigkeit der Transmissionswahrscheinlichkeit T von der Barrierendicke d berechnet werden:

$$T(d) \propto e^{-2\text{Im}(k_{\perp})d} \sin^2(\text{Re}(k_{\perp})d) . \quad (3.1)$$

Die Anschlußbedingungen an der Grenzfläche bestimmen die Amplitude dieses Abklingverhaltens. Somit ist es möglich, durch eine Analyse der komplexen Bandstruktur

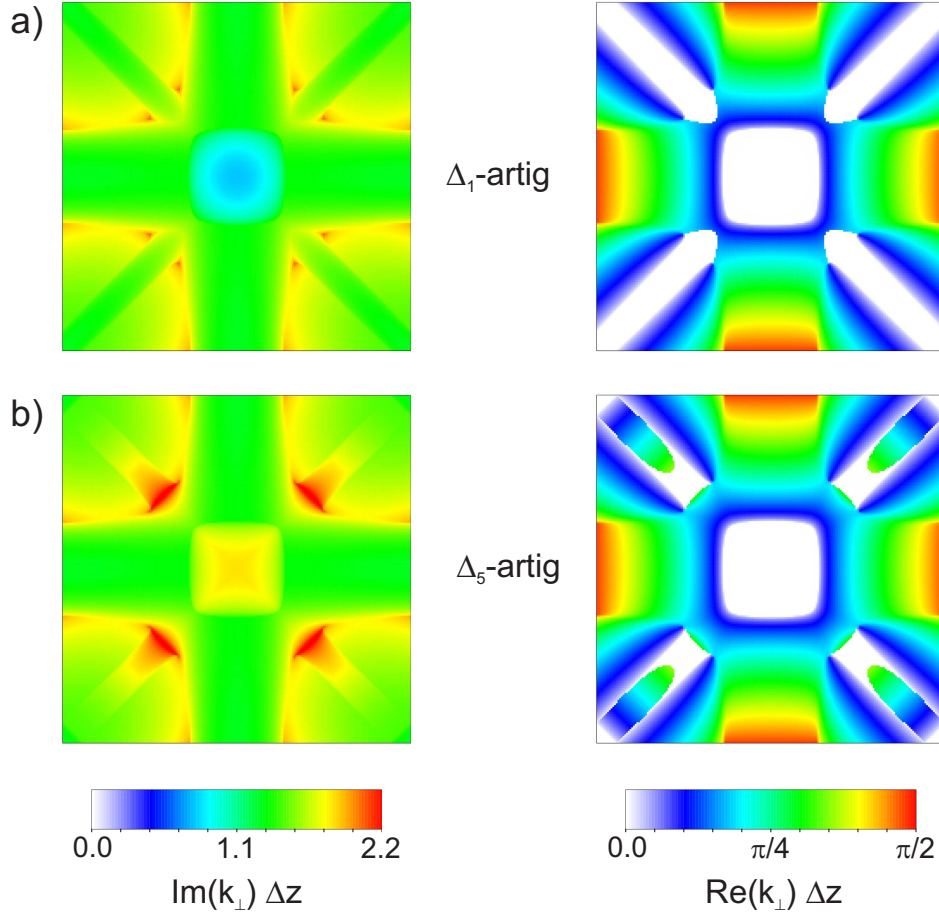


Abbildung 3.3: Real- und Imaginärteile von k_{\perp} in Abhängigkeit von \mathbf{k}_{\parallel} für zwei komplexe Bänder bei der Fermienergie innerhalb der Bandlücke des MgO. a) Band mit dem kleinsten Imaginärteil und mit Δ_1 -Symmetrie am Γ -Punkt. b) Band mit dem nächstgrößeren Imaginärteil und mit Δ_5 -Symmetrie am Γ -Punkt. Dargestellt ist die erste Brillouinzone mit \mathbf{k}_{\parallel} zwischen $(-\pi/a, -\pi/a)$ bis $(\pi/a, \pi/a)$ mit a als zugehöriger Gitterkonstante [E2].

bei der Fermienergie E_F Aussagen über die zu erwartenden Transporteigenschaften bei verschwindender Spannung zu treffen. In MgO befinden sich bei E_F mehrere Bänder. Zwei dieser Bänder, die den kleinsten Imaginärteil besitzen, sind in Abbildung 3.3 dargestellt. Dabei sind der jeweilige Imaginär- und Realteil \mathbf{k}_{\parallel} -aufgelöst innerhalb der ersten Brillouinzone abgebildet. In der Farbkodierung ist die Größe der Komponente k_{\perp} des komplexen \mathbf{k} -Vektors wiedergegeben. Eine Analyse der dargestellten Bänder am Γ -Punkt zeigt, daß die Zustände mit dem niedrigsten Imaginärteil Δ_1 -Symmetrie und die mit dem nächstgrößeren Imaginärteil Δ_5 -Symmetrie aufweisen [98]. Aus diesem Grund sollen im folgenden alle Zustände, die an das Band mit dem niedrigsten Imaginärteil ankoppeln können, als Δ_1 -artig und diejenigen, die an das zweite in Abbildung 3.3 dargestellte Band ankoppeln, als Δ_5 -artig bezeichnet werden. Es ist erkennbar, daß Δ_5 -artige Zustände vor allem im Brillouinzonenzentrum deutlich stärker gedämpft werden als die Δ_1 -artigen Zustände. Dadurch fungiert die Barriere im Brillouinzonenzentrum als Filter der Zustände bezüglich ihrer Symmetrie. Im Zonenzentrum können die Δ_1 -artigen Zustände am effektivsten tunneln. Entlang der Linie $\bar{\Gamma}\bar{H}$ entspricht der

dargestellte Imaginärteil der beiden Bänder den Rechnungen von Butler *et al.* [98]. Außerhalb des Brillouinzoneuzentrums findet keine Symmetrieselektion (grüne Bereiche in Abbildung 3.3) statt, da die Imaginärteile der Δ_1 - und Δ_5 -artigen Zustände in diesem Bereich identisch sind. Allerdings ist die Dämpfung der Δ_1 -artigen Zustände im Brillouinzoneuzentrum insgesamt am geringstem. Dadurch ist zu erwarten, daß dieser Bereich der Brillouinzone vor allem für große Barrierendicken dominiert.

Um einen TMR-Effekt zu erhalten, muß die Symmetrieselektion der Barriere im Brillouinzoneuzentrum in eine Spinfilterung umgewandelt werden. Dies ist die Aufgabe der ferromagnetischen Elektroden. Diese müssen Zustände im Brillouinzoneuzentrum anbieten, die einen unterschiedlich stark ausgeprägten Δ_1 -artigen Character besitzen.

Die Analyse der lokalen Zustandsdichte des in der vorliegenden Arbeit verwendeten Elektrodenmaterials Fe im nächsten Abschnitt erklärt die Entstehung des TMR-Effekts in den Fe/MgO/Fe-Tunnelkontakten. Ein Vergleich zur Transmissionswahrscheinlichkeit bekräftigt die Annahme der starken Symmetriefilterung der Barriere und daß vor allem Δ_1 -artige Zustände im Brillouinzoneuzentrum zum Strom beitragen.

3.1.3 Zusammenhang zwischen $k_{||}$ -aufgelöster lokaler DOS und Transmissionswahrscheinlichkeit

Um die Aufgabe der Elektroden, nämlich die Symmetriefilterung in eine Spinfilterung umzuwandeln, zu analysieren, zeigt die Abbildung 3.4 die in dieser Arbeit berechneten $k_{||}$ -aufgelösten lokalen Zustandsdichten im Vergleich zur $k_{||}$ -aufgelösten Transmissionswahrscheinlichkeit am Beispiel des Tunnelkontakts mit idealen Grenzflächen, das heißt ohne FeO-Schicht. Da der Transport bei verschwindender Spannung berechnet wurde, sind die lokalen Zustandsdichten bei E_F angegeben. Dabei wird deutlich, daß die lokale Zustandsdichte entfernt von der Grenzfläche keine Ähnlichkeiten mit der Transmissi-

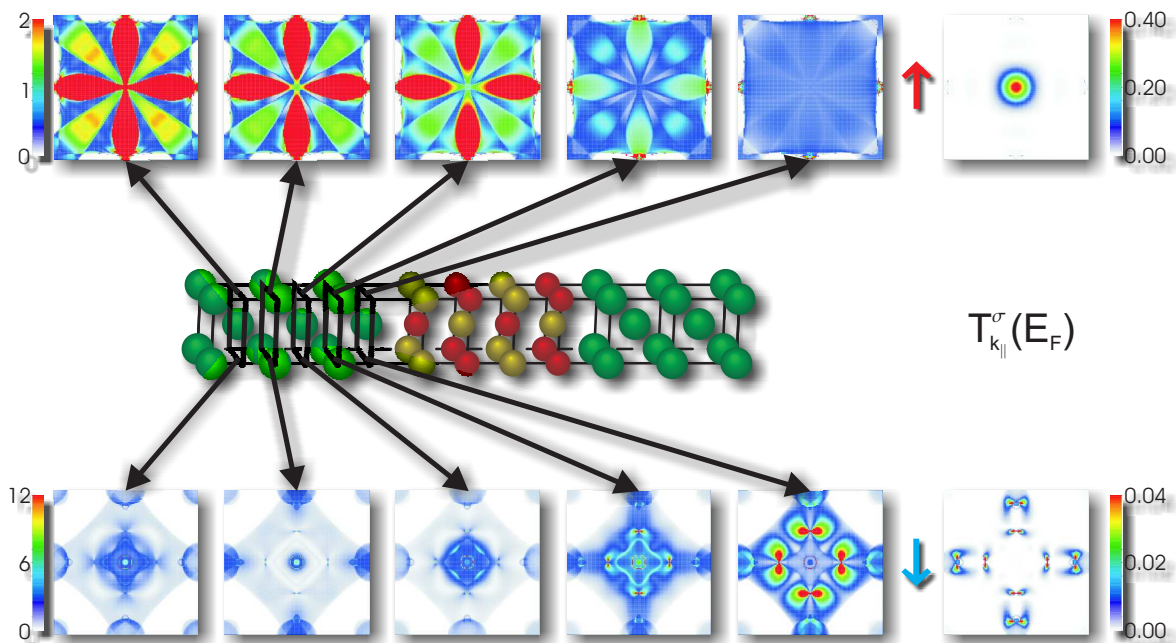


Abbildung 3.4: Lokale $k_{||}$ -aufgelöste Zustandsdichten (links) im Vergleich mit der $k_{||}$ -aufgelösten Transmissionswahrscheinlichkeit (rechts) der idealen Struktur pro Spinrichtung [E3].

onswahrscheinlichkeit aufweist, sondern daß sich nur die Strukturen im Minoritätskanal in entsprechenden Strukturen der Zustandsdichte direkt an der Grenzfläche widerspiegeln. Allerdings wird auch deutlich, daß nur relativ wenige Zustände tatsächlich zum Strom beitragen. Ob und in welchem Maße ein Zustand durch die Barriere tunnelt, bestimmen die Anschlußbedingungen an den Grenzflächen. Die freien Elektronen ähnliche gaußartige Verteilung der Transmissionswahrscheinlichkeiten im Majoritätskanal kann nur durch die fast homogene Zustandsdichte an der Grenzfläche verursacht werden, während die deutlichen Strukturen in der Zustandsdichte entfernt von der Grenzfläche in der Transmissionswahrscheinlichkeit nicht wiedergespiegelt werden.

Um die angesprochene Symmetriefilterung der Barriere mit der Zustandsdichte der Elektroden zu kombinieren, ist es notwendig, diese ebenfalls symmetrieraufgelöst zu betrachten. Die einfachste Symmetrierauflösung nach dem Drehimpuls ist für die lokale Zustandsdichte von Fe an der Grenzfläche in Abbildung 3.5 dargestellt. Dabei wird in beiden Spinkanälen deutlich, daß der s-Anteil derjenige ist, der die größten Ähnlichkeiten mit den erhaltenen Bildern der $k_{||}$ -aufgelösten Transmissionswahrscheinlichkeit aufweist. Der Grund liegt auf der Hand, da die s-Zustände Δ_1 -Symmetrie haben und somit von der Barriere selektiert werden. Zusätzlich werden auch Beiträge von p- und d-Zuständen auftreten, die mit zur Δ_1 -Symmetrie gehören, die aber hier nicht weiter aufgelöst wurden. Zusätzlich können im Minoritätskanal die zum Strom beitragenden Zustände auch Δ_5 -Symmetrie aufweisen, da diese stromtragenden Zustände relativ weit weg vom Zonenzentrum liegen. An diesen Stellen der Brillouinzone ist die Dämpfung für beide Zustände gleich (siehe Abbildung 3.3) und es liegt keine Symmetrieselektion durch die Barriere vor.

Ein weiterer wichtiger Punkt dieser Abbildung ist, daß für die Zustände, die am

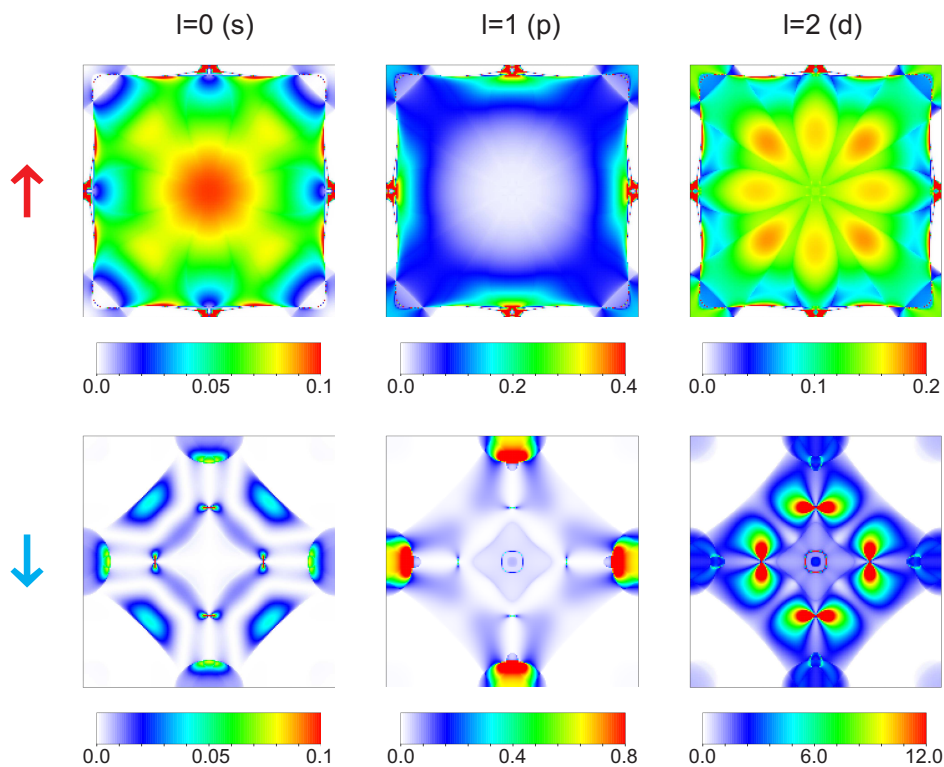


Abbildung 3.5: Lokale Drehimpuls- und $k_{||}$ -aufgelöste Zustandsdichten von Fe an der Grenzfläche der idealen Struktur [E4].

Γ -Punkt die Δ_5 -Symmetrie widerspiegeln [98], trotz des sehr hohen Anteils an d-Zuständen im Minoritätskanal keine nennenswerte Transmissionswahrscheinlichkeit um den Γ -Punkt auftritt, obwohl die Rechnungen für eine relativ dünne Barriere mit 4 Monolagen MgO durchgeführt wurden. Dadurch wird deutlich, daß im Brillouinzonezentrum tatsächlich vor allem die Δ_1 -artigen Zustände zum Gesamtstrom beitragen. Dieser Effekt wird bei dickeren Barrieren noch verstärkt, da aufgrund der unterschiedlichen Abklinglängen die zum Strom beitragenden Zustände dann ebenfalls im Minoritätskanal nahe des Brillouinzonezentrums liegen (siehe Abschnitt 3.3).

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß die MgO-Barriere als starker Symmetriefilter im Brillouinzonezentrum wirkt. Die Fe-Elektroden wandeln diese Symmetriefilterung in eine Spinfilterung um, da die Δ_1 -artigen Symmetrieanteile der Zustände im Majoritäts- und Minoritätsspin im Brillouinzonezentrum sehr unterschiedlich sind. Diese Spinfilterung führt zur Entstehung des TMR-Effekts in den Fe/MgO/Fe-Tunnelkontakten. In den folgenden Abschnitten wird der TMR-Effekt quantitativ diskutiert.

3.2 Grenzflächenstruktur

Im vorherigem Abschnitt konnte gezeigt werden, wie der TMR-Effekt als Wechselspiel zwischen der Symmetrieselektierung der Barriere und der Spinaufspaltung der Zustände der ferromagnetischen Schicht an der Grenzfläche entsteht. Dadurch ist die Grenzfläche zwischen ferromagnetischer Elektrode und Barriere entscheidend für das TMR-Verhältnis. Die Untersuchung dieses Einflusses auf die Strom-Spannungs-Kennlinien ist das Anliegen dieses Abschnitts.

3.2.1 Experimentelle Befunde

Die Bedeutung der Grenzfläche soll durch einen Vergleich zweier experimenteller Beobachtungen unterstrichen werden, die vollkommen unterschiedliche Resultate aufweisen. Abbildung 3.6 zeigt die Spannungsabhängigkeit des optimistischen TMR-Verhältnisses von Yuasa *et al.* [83] links und Tiusan *et al.* [84] rechts. Bei letzterem handelt es sich um zwei verschiedene Anordnungen: Fe/MgO/Fe (S1) und Fe/MgO/Fe/Pd (S2). Somit ist die Kurve (S1) mit der Kurve im linken Bild zu vergleichen. Die Spannungsabhängigkeit von Yuasa *et al.* zeigt einen nahezu symmetrischen Verlauf mit einem Maximum bei 0V und sinkendem TMR-Verhältnis mit steigendem Betrag der angelegten Spannung. Äquivalente Resultate erhielten auch Parkin *et al.* [31]. Des weiteren stützten Yuasa *et al.* [104] mit Röntgenabsorptionsspektroskopie die Annahme, ideale Fe/MgO-Grenzflächen zu haben. Das bedeutet, daß keine FeO-Schicht vorliegt. Im Gegensatz dazu haben Tiusan *et al.* [84] einen asymmetrischen Tunnelkontakt aufgrund unterschiedlichen Wachstums. Für negative Spannungen ist das TMR-Verhältnis konstant, während für positive Spannungen das TMR-Verhältnis mit steigender Spannung sinkt und sogar das Vorzeichen wechselt. Der Grund für die Asymmetrie sind verschiedene Grenzflächen, wobei vermutet wird, daß eine Grenzfläche ideal und die andere Grenzfläche oxidiert ist. Diese Aussage wird gestützt durch die Untersuchung eines Fe/MgO/Fe/Pd Tunnelkontakts (Abbildung 3.6 rechts, Kurve (S2)). Pd hat eine Bandlücke an der Stelle, bei der die FeO-Schicht an der Grenzfläche eine Resonanz in der Zustandsdichte zeigt. Durch das Hinzufügen von Pd verschwinden die Asymmetrie und der Vorzeichenwechsel des TMR-Verhältnisses. Dies ist ein Indiz dafür, daß eine Grenzfläche oxidiert ist, und daß der Vorzeichenwechsel des TMR-Verhältnisses von

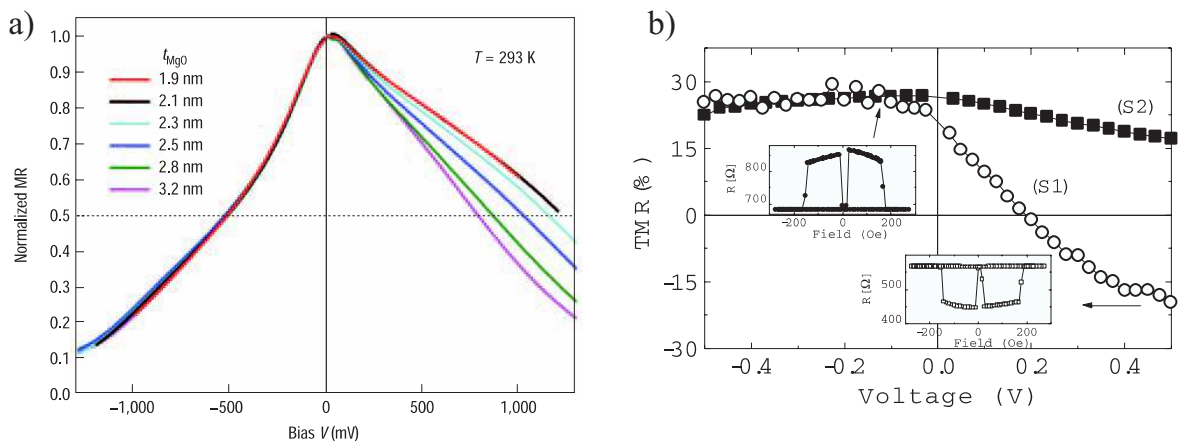


Abbildung 3.6: TMR-Verhältnis (Gleichung 1.1) in Abhängigkeit der Spannung von a) Yuasa *et al.* [83] (auf 1 normiert) und b) Tiusan *et al.* [84].

einer Resonanz an der FeO-Grenzfläche hervorgerufen wird. Die genaue Untersuchung dieses Vorzeichenwechsels und eine detaillierte Analyse des Einflusses der Resonanz wird im Abschnitt 3.2.4 gegeben.

3.2.2 Untersuchte Grenzflächenstrukturen

Um den Einfluß einer FeO-Schicht an der Grenzfläche zu untersuchen, werden in der vorliegenden Arbeit die in Abbildung 3.7 dargestellten Strukturmodelle betrachtet. Bei der ersten handelt es sich um eine ideale Grenzflächenstruktur ohne FeO-Schicht. Bei der symmetrischen Struktur ist an beiden Grenzflächen eine FeO-Schicht vorhanden. Um die Untersuchung zu komplettieren, wird bei der asymmetrischen Struktur die FeO-Schicht nur bei einer Grenzfläche angenommen. Bei allen Strukturen werden die strukturellen Daten von Meyerheim *et al.* [50] (siehe Abbildung 3.1) verwendet. Das heißt, die Relaxation der Lagenabstände findet bei allen Strukturen Berücksichtigung. Die FeO-Schicht wird in den Rechnungen immer als voll oxidierte FeO-Lage angenommen. Eine nur partiell oxidierte Schicht ist schwierig zu behandeln. Da der numerische Aufwand schon für die vorgestellten Strukturen sehr hoch ist, ist eine Behandlung der unvollständigen Oxidation in Form einer Superzellenrechnung mit Mittelung über alle möglichen Superzellen prinzipiell möglich, aber praktisch kaum handhabbar. Einen möglichen Ausweg stellt die Verwendung der Coherent Potential Approximation (CPA) dar. Dieses Verfahren kommt jedoch in dieser Arbeit nicht zur Anwendung. Als Barrierendicke werden jeweils 4 Monolagen MgO angenommen.

In Abbildung 3.8 ist die lokale Zustandsdichte von Fe an einer idealen und einer oxidierten Grenzfläche dargestellt. Nahe der Fermienergie ist eine Oberflächenresonanz im Minoritätskanal zu erkennen. Diese befindet sich bei der oxidierten Grenzfläche bei höheren Energien und ist deutlich ausgeprägter (beachte Achsenunterbrechung). Eine Rechnung unter Verwendung von GGA anstatt LDA liefert die Fermienergie genau in der Resonanz [105] für die ideale Grenzfläche. Das magnetische Moment beträgt $3,0\mu_B$ an der idealen Grenzfläche und $2,6\mu_B$ an der oxidierten Grenzfläche. Damit sind diese magnetischen Momente etwas höher als in reinem Eisen mit $2,3\mu_B$. Diese Erhöhung

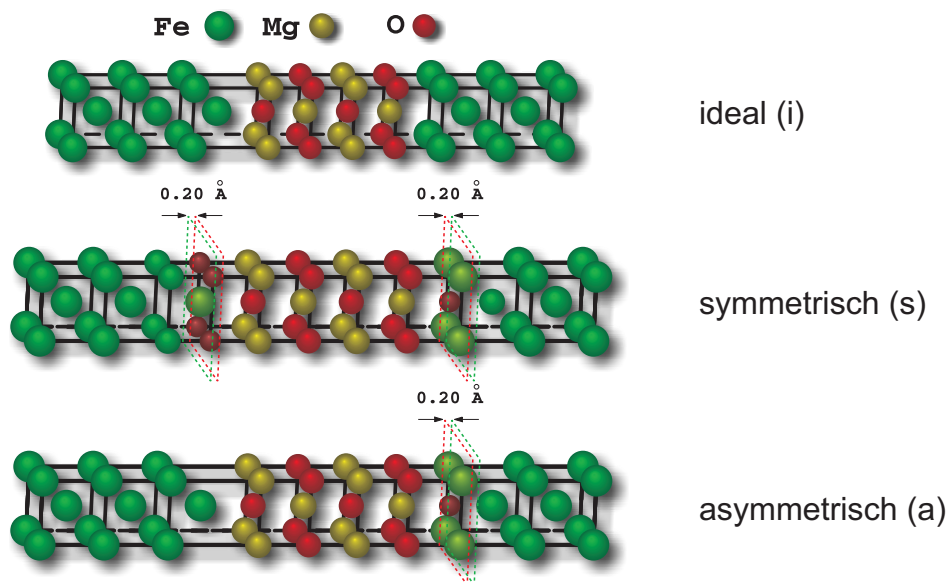


Abbildung 3.7: Betrachtete Grenzflächenstrukturen und Kontaktgeometrien.

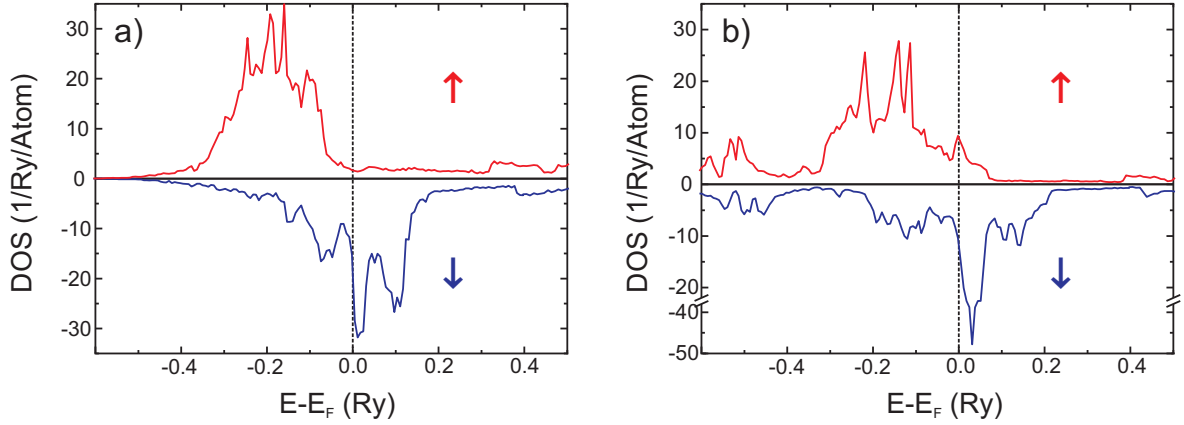


Abbildung 3.8: Lokale Zustandsdichte von Fe a) an der idealen Grenzfläche und b) an der oxidierten Grenzfläche.

des magnetischen Moments zur Grenzfläche hin, ist in Übereinstimmung mit anderen Rechnungen [98]. Allerdings wird in den folgenden Abschnitten nochmals deutlich, daß die lokale Zustandsdichte nicht ausreichend ist, um Strom-Spannungs-Kennlinien zu interpretieren. Dies ist bereits durch die Analyse der \mathbf{k}_{\parallel} -aufgelösten Zustandsdichte in Abschnitt 3.1.3 deutlich geworden.

3.2.3 Strom-Spannungs-Kennlinien

In Abbildung 3.9 sind die in der vorliegenden Arbeit berechneten Spannungsabhängigkeiten der Stromdichte I , der Polarisation der Stromdichten

$$P_I = \frac{I^{\uparrow\uparrow(\downarrow\downarrow)} - I^{\downarrow\downarrow(\uparrow\uparrow)}}{I^{\uparrow\uparrow(\downarrow\downarrow)} + I^{\downarrow\downarrow(\uparrow\uparrow)}} \quad (3.2)$$

für die P(AP)-Konfiguration, der Leitwertdichte g und des normalisierten TMR-Verhältnisses für die drei im vorherigen Abschnitt vorgestellten Grenzflächenstrukturen dargestellt. Dabei bezeichnet $\uparrow\uparrow$ ($\downarrow\downarrow$) den Stromfluß im Majoritätskanal (Minoritätskanal) in der P-Anordnung und $\uparrow\downarrow$ ($\downarrow\uparrow$) die zur AP-Konfiguration gehörenden Ströme. Die Abhängigkeiten sind bei den betrachteten Grenzflächen verschieden. Es zeigt sich die entscheidende Bedeutung der Grenzflächenstruktur, da sich trotz identischer Fe-Zuleitungen und identischer MgO-Barriere völlig andere Kurvenverläufe ergeben.

Die ideale Struktur zeigt für beide magnetische Orientierungen in etwa einen linearen Zusammenhang zwischen Stromdichte und Spannung. Damit folgt für die Leitwertdichte ein fast konstanter Wert unabhängig von der angelegten Spannung. Als Konsequenz ist das TMR-Verhältnis ebenfalls konstant über dem betrachteten Spannungsbereich. Die Polarisation der Stromdichten für den P-Fall ist mit über 70% hoch und wird bei höheren Spannungen nahezu 100%. Dadurch trägt praktisch nur der Majoritätskanal zum Transport bei. In der AP-Konfiguration ist die Polarisation hingegen sehr gering und beide Spinkanäle tragen annähernd äquivalent zum Gesamtstrom bei.

Der Spannungsverlauf für die symmetrische Grenzflächengeometrie ist vollkommen anders geartet. Während die Stromdichte in der P-Konfiguration nahezu linear mit der Spannung verläuft, steigt die Stromdichte in der AP-Orientierung mit zunehmender Spannung überproportional an. Dabei wird der Strom in der AP-Anordnung ab einer Spannung von 0.58V größer als in der P-Anordnung. Daraus folgt sofort, daß

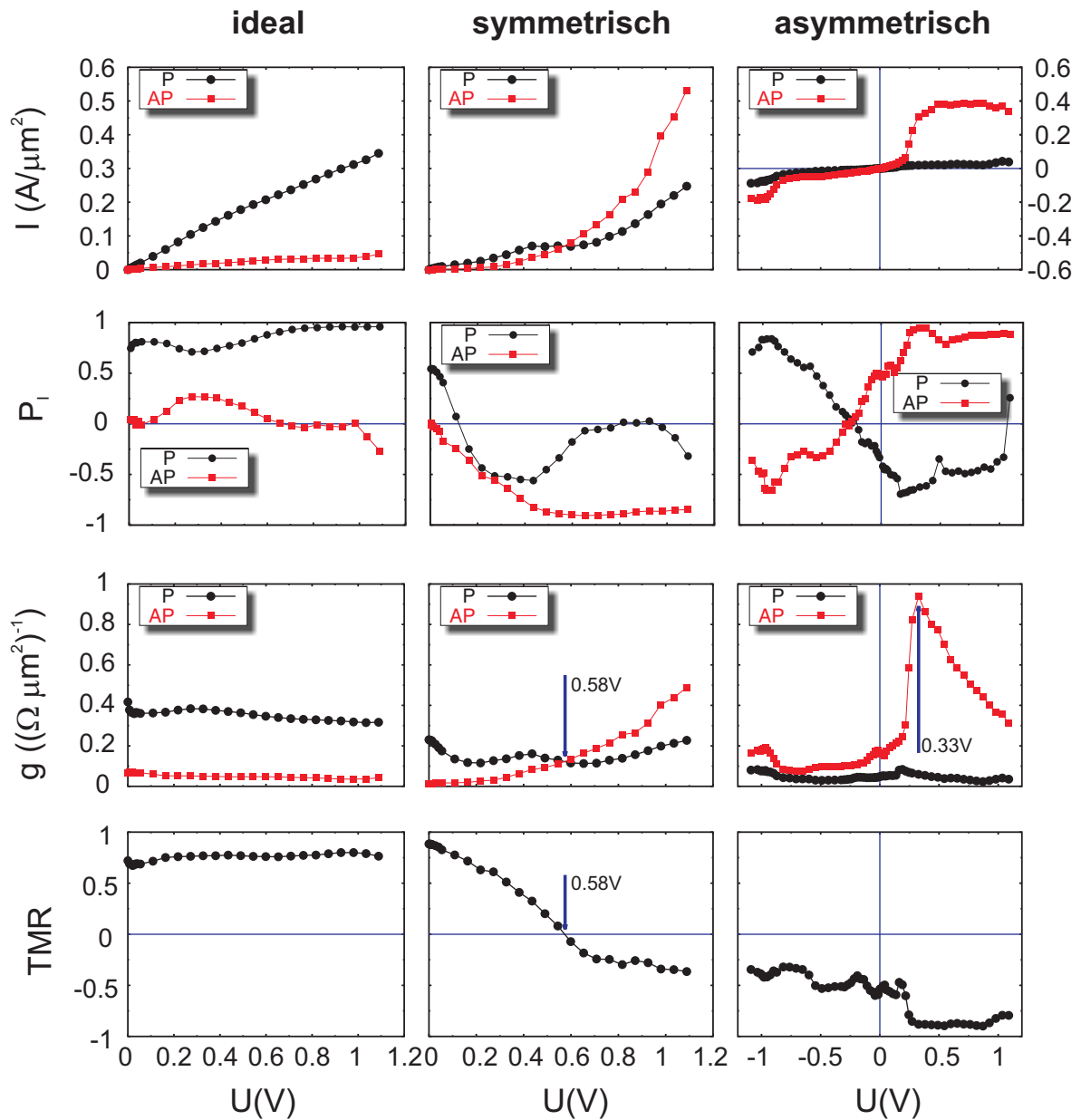


Abbildung 3.9: Spannungsabhängigkeit der Stromdichte I , der Stromdichtepolarisation P_I , der Leitwertdichte g und des normalisierten TMR-Verhältnisses [E1, E3].

das TMR-Verhältnis bei dieser Spannung einen Vorzeichenwechsel hat. Die zum Strom gehörenden Leitwertdichten zeigen einen fast konstanten Wert in der P-Konfiguration und einen monoton steigenden Wert in der AP-Konfiguration. Die Polarisation der Stromdichten ist im P-Fall zunächst positiv, wird dann mit steigender Spannung negativ. In der AP-Konfiguration startet die Polarisation bei 0, da ohne angelegte Spannung beide Spinkanäle aufgrund der Symmetrie entartet sind. Mit steigender Spannung wird die Polarisation sehr hoch, mit $I^{\uparrow\uparrow}$ als dominierendem Beitrag.

Die strukturelle Asymmetrie der dritten untersuchten Struktur spiegelt sich in einer ausgeprägten asymmetrischen Stromdichte-Spannungs-Kennlinie wider. Insbesondere die Stromdichte in der AP-Konfiguration hat einen stark asymmetrischen Verlauf mit einem großen Sprung bei einer Spannung von 0.33V. Desweiteren ist die Stromdichte

in der AP-Anordnung immer größer als in der P-Anordnung, was zu einem negativen TMR-Verhältnis über dem gesamten Spannungsbereich führt. Der Sprung in der Stromdichte ist ebenfalls in einem, wenn auch nicht so stark ausgeprägten Sprung des TMR-Verhältnisses wieder zu finden. Analog hierzu zeigt der Leitwert eine Art Resonanz, während der Leitwert in der P-Konfiguration nahezu konstant ist, wodurch die Stromdichte fast linear von der Spannung abhängt. Die Polarisation für beide magnetische Konfigurationen ändert sich stark mit der Spannung und mit jeweils entgegengesetztem Vorzeichen für große positive und negative Spannungen.

Bevor eine Einordnung dieser Ergebnisse in die experimentellen Resultate im Abschnitt 3.2.5 erfolgen soll, wird im Abschnitt 3.2.4 die Entstehung von spezifischen Merkmalen in den Spannungsabhängigkeiten diskutiert. Exemplarisch soll dabei der Sprung in der Stromdichte-Spannungs-Kennlinie bei 0.33V in der asymmetrischen Struktur im Detail analysiert werden.

3.2.4 Diskussion der Signaturen von Stromdichte-Spannungs-Kennlinien

Im Abschnitt 3.1.3 ist deutlich geworden, daß es notwendig ist, die \mathbf{k}_{\parallel} -aufgelöste lokale Zustandsdichte an der Grenzfläche zu analysieren, um Rückschlüsse auf die am Stromfluß beteiligten Zustände zu ziehen. Um den Sprung in der Stromdichte-Spannungs-Kennlinie der AP-Konfiguration bei 0.33V in der asymmetrischen Struktur (siehe Abbildung 3.9) zu verstehen, ist es zusätzlich notwendig zu wissen, Zustände welcher Energie zum Strom beitragen. Dazu ist in Abbildung 3.10 die energieabhängige Transmissionswahrscheinlichkeit für verschiedene Spannungen dargestellt. Die Integration dieser

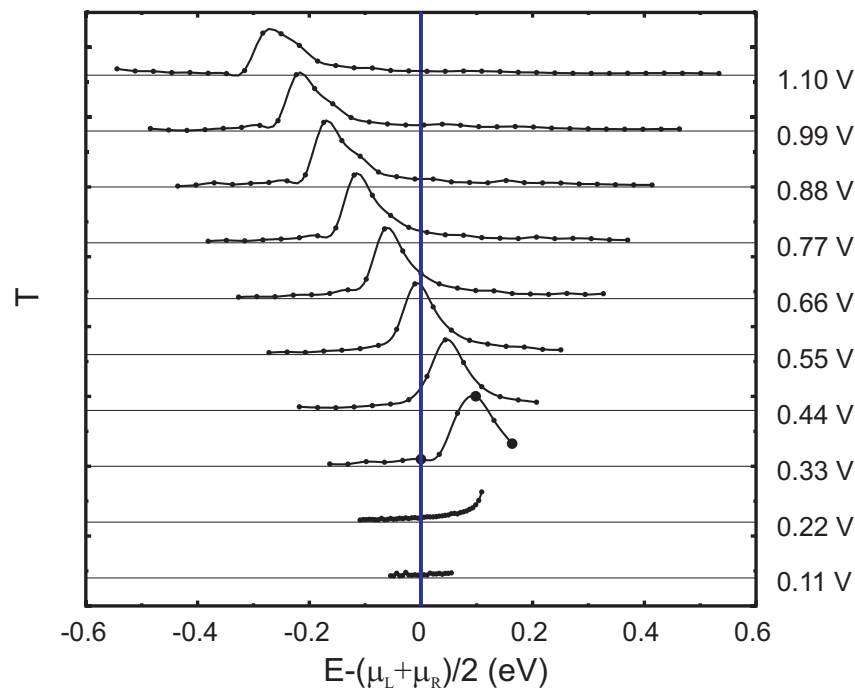


Abbildung 3.10: Transmissionswahrscheinlichkeit T in Abhängigkeit der Energie für verschiedene angelegte Spannungen. Der jeweilige dargestellte Energiebereich entspricht dem Integrationsintervall in Gleichung (2.118) bei der zugehörigen Spannung [E3].

$T(E)$ -Kurven über den zugehörigen Spannungsbereich liefert nach Gleichung (2.118) die zu der angelegten Spannung gehörende Stromdichte. In den dargestellten Kurven ist deutlich die Bildung einer Resonanz ab einer Spannung von $0.22V$ zu erkennen, die ab $0.33V$ komplett innerhalb des Integrationsintervalls liegt. Diese Resonanz verschiebt sich mit steigender Spannung zu niedrigeren Energien und ist auch die Erklärung für den sprunghaften Anstieg der Stromdichte. Eine Analyse dieser Transmissionswahrscheinlichkeiten zeigt, daß die Resonanz nur in dem Beitrag zum Strom auftritt, der von den Majoritätszuständen links zu den Minoritätszuständen rechts fließt. Abbildung 3.11 zeigt die zu einer Spannung von $0.33V$ gehörenden lokalen Zustandsdichten des Fe an der Grenzfläche links (ohne FeO) und rechts (mit FeO). Die Zustandsdichten sind links und rechts zueinander entsprechend der angelegten Spannung verschoben (siehe Abschnitt 2.2.6). Der zu integrierende Energiebereich ist ebenfalls eingezeichnet. Der Pfeil deutet den Transportkanal an, in dem die Resonanz auftritt. Aus der Darstellung wird deutlich, daß die Oberflächenresonanz in der lokalen Zustandsdichte auf der rechten Seite (mit FeO) nicht vollständig im Integrationsgebiet liegt. Damit kann diese Oberflächenresonanz nicht direkt für die Resonanz in der Transmissionwahrscheinlichkeit

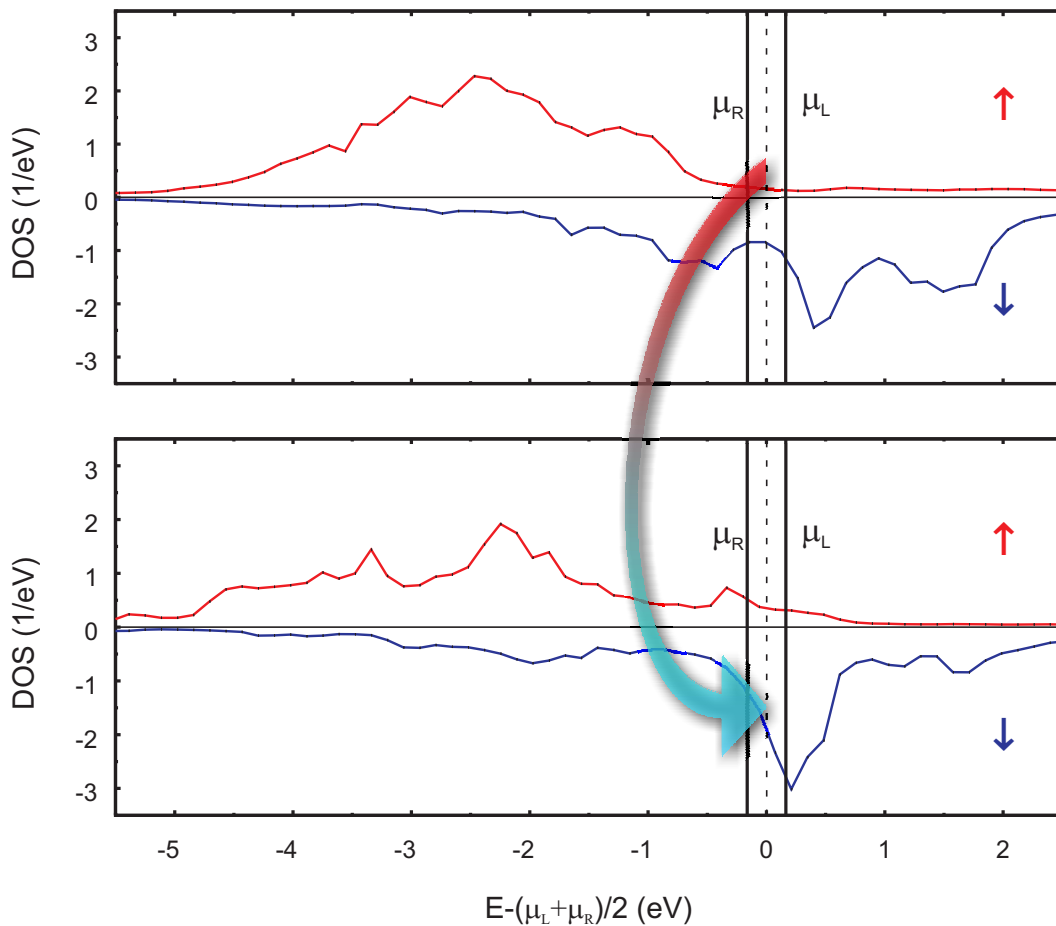


Abbildung 3.11: Lokale Zustandsdichte (DOS) an den Grenzflächen für den asymmetrischen Tunnelkontakt in AP-Konfiguration; oben: linke Grenzfläche (ohne FeO); unten: rechte Grenzfläche (mit FeO) mit einer angelegten Spannung von $0.33V$ [E3]. Der eingezeichnete Pfeil kennzeichnet den Spinkanal, in dem die Resonanz aus Abbildung 3.10 auftritt.

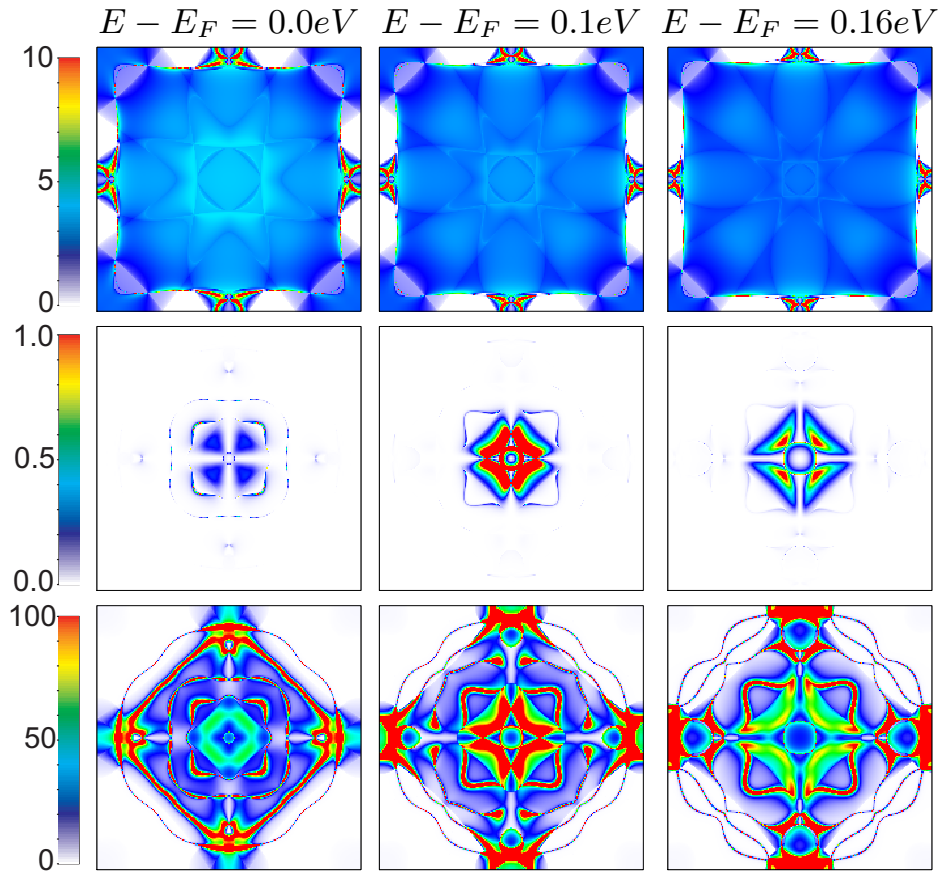


Abbildung 3.12: Lokale $\mathbf{k}_{||}$ -aufgelöste Zustandsdichte und Transmissionswahrscheinlichkeit bei einer angelegten Spannung von $0.33V$ für die in Abbildung 3.10 bei der Spannung markierten Energien. oben: Zustandsdichte der Majoritätselektronen der linken Grenzfläche (ohne FeO); unten: Zustandsdichte der Minoritätselektronen der rechten Grenzfläche (mit FeO); mitte: zugehörige Transmissionswahrscheinlichkeit [E3].

verantwortlich sein. Dieser Sachverhalt stützt die Aussagen des Abschnitts 3.1.3, daß aus der $\mathbf{k}_{||}$ -aufgelösten lokalen Zustandsdichte an der Grenzfläche nur wenige Zustände tatsächlich tunneln. Damit ist es nicht möglich, mit der über $\mathbf{k}_{||}$ -integrierten lokalen Zustandsdichte zu argumentieren wie dies zum Beispiel in Referenz [84] geschieht. Um diesen Aspekt zu illustrieren, zeigt die Abbildung 3.12 für die drei in der Abbildung 3.10 bei einer Spannung von $0.33V$ markierten Punkte die lokalen Zustandsdichten an den Grenzflächen und die zugehörigen Transmissionswahrscheinlichkeiten, beide $\mathbf{k}_{||}$ -aufgelöst. Für die linke Grenzfläche ist nur der Majoritätsspin und für die rechte Grenzfläche nur der Minoritätsspin dargestellt. Dabei treten an der rechten Grenzfläche mit FeO bei $0.1eV$ über der Fermienergie ($E - E_F = 0.1eV$) Zustände in der Nähe des Γ -Punkts auf, die sehr gut durch die Barriere an die ideale Grenzfläche ohne FeO ankoppeln. Diese Zustände sind verantwortlich für die Resonanz in der Transmissionskurve und damit für den Sprung in der Stromdichte-Spannungs-Kennlinie. Allerdings handelt es sich um relativ wenige Zustände im $\mathbf{k}_{||}$ -Raum.

Diese Analyse zeigt nochmals die Rolle der Matrixelemente bei der Interpretation der Transmissionswahrscheinlichkeit mit Hilfe der $\mathbf{k}_{||}$ -aufgelösten lokalen Zustandsdich-

te. Die Interpretation einer Strom-Spannungs-Kennlinie durch die Analyse der lokalen \mathbf{k}_{\parallel} -integrierten Zustandsdichte, wie zum Beispiel in Referenz [84] geschehen, ist damit unzureichend. In dieser zitierten Arbeit wird die Oberflächenresonanz im Minoritätsspin an der FeO-Grenzfläche zur Erklärung der Ergebnisse verwendet. Wie im Abschnitt 3.2.5 gezeigt wird, ist der Sprung in der Strom-Spannungs-Kennlinie des asymmetrischen Tunnelkontakts die Ursache für den experimentell beobachteten Vorzeichenwechsel des TMR-Verhältnisses (siehe Abbildung 3.6 rechts). Wie eben gezeigt, besteht jedoch zwischen der Oberflächenresonanz der lokalen Zustandsdichte und dem sprunghaften Anstieg der Stromdichte kein direkter Zusammenhang, sondern die Oberflächenresonanz liegt nur zufällig bei ähnlicher Energie.

Zusammengefaßt ist zu konstatieren, daß immer die \mathbf{k}_{\parallel} -aufgelöste lokale Zustandsdichte in Verbindung mit den Matrixelementen analysiert werden muß, um Signaturen von Strom-Spannungs-Kennlinien zu verstehen. Eine Analyse der lokalen \mathbf{k}_{\parallel} -integrierten Zustandsdichte ist dafür ungenügend.

3.2.5 Vergleich mit experimentellen Resultaten

Vergleicht man die berechneten TMR-Spannungs-Kennlinien mit den experimentellen Ergebnissen aus Abbildung 3.6, so wird deutlich, daß die von Yuasa *et al.* [83] erhaltenen Kurven mit keiner der berechneten übereinstimmen. Aus strukturellen Untersuchungen der verwendeten Tunnelkontakte [104] wird eine Übereinstimmung mit den Ergebnissen der idealen Grenzflächegeometrie erwartet. Das Abfallen des gemessenen TMR-Verhältnisses mit steigender Spannung kann entweder auf nicht ideale Grenzflächen beziehungsweise einer anderen als die betrachtete Grenzflächenstruktur oder auf andere Transportprozesse hinweisen. Eine mögliche Erklärung lieferten Zhang *et al.* [106], nach der die Entstehung der sogenannten zero-bias-Anomalie durch Magnonenstreuung hervorgerufen wird. Ohne diese Magnonenstreuung würde die TMR-Spannungs-Kennlinie konstant verlaufen und damit in Übereinstimmung mit der berechneten Kennlinie des idealen Tunnelkontakts sein.

Der Vergleich zu der zweiten experimentellen TMR-Spannungs-Kennlinie von Tiusan *et al.* [84] scheint auf den ersten Blick für negative Spannungen mit dem Kennlinienverlauf des idealen Kontakts und für positive Spannungen mit dem des symmetrischen Kontakts übereinzustimmen. Allerdings gibt es bei diesem Vergleich zwei grundlegende Probleme. Zum einen handelt es sich experimentell um einen asymmetrischen Kontakt und zum anderen liegt der Vorzeichenwechsel des TMR-Verhältnisses bei einer anderen Spannung. Da jedoch die berechnete Kennlinie des asymmetrischen Kontakts keine Ähnlichkeiten zu dem experimentellen Befund hat, liegt die Annahme nahe, daß es sich um einen asymmetrischen Tunnelkontakt mit unterschiedlicher Oxidation der Grenzflächen handelt, wobei die Grenzflächen unvollständig oxidiert sind.

Ein sehr einfaches Modell zur Beschreibung einer unvollständigen Oxidation stellt die Annahme einer makroskopischen Fluktuation der FeO-Schicht an den Grenzflächen dar. Ein Beispiel dazu ist in Abbildung 3.13 gezeigt, bei dem an der linken Grenzfläche ein Oxidationsgrad von $O_L = 50\%$ und an der rechten Grenzfläche von $O_R = 60\%$ angenommen ist. Damit gibt es Gebiete mit idealer, symmetrischer und asymmetrischer Struktur. Durch Parallelschaltung dieser Strukturen erhält man die Gesamtstromdichte

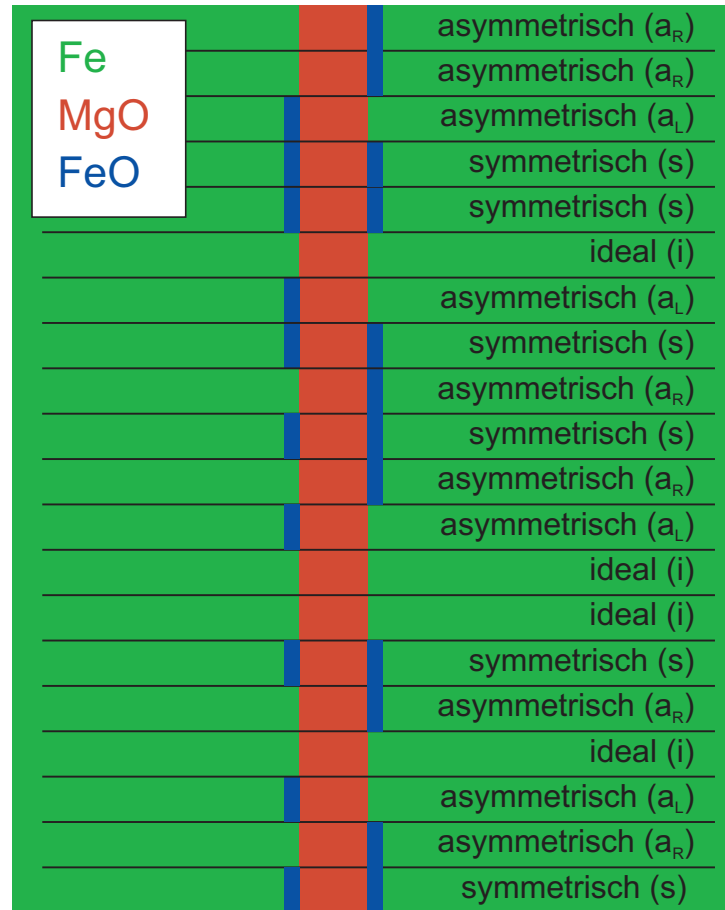


Abbildung 3.13: Simulation wachstumsbedingter Fluktuationen der FeO-Schicht für einen Oxidationsgrad von 50% links und 60% rechts.

I_{ges} des Tunnelkontakts

$$I_{ges} = (1 - O_L)(1 - O_R)I_{ideal} + O_L O_R I_{symmetrisch} + (1 - O_L)O_R I_{asymmetrisch1} + O_L(1 - O_R)I_{asymmetrisch2} \quad , \quad (3.3)$$

wobei die Indizes an den Stromdichten die jeweilige Grenzflächenstruktur bezeichnen. Bei der asymmetrischen Struktur gibt es zwei Möglichkeiten je nachdem, ob sich die FeO-Schicht links oder rechts der Tunnelbarriere befindet.

In Abbildung 3.14 sind verschiedene TMR-Spannungs-Kennlinien für mögliche Oxidationsgrade der linken und rechten Grenzfläche dargestellt. Die Berechnung erfolgte unter Verwendung von Gleichung (3.3) mit den Stromdichten aus Abbildung 3.9. Für Tunnelkontakte mit identischen Oxidationsgraden $O_L = O_R$ sind die Spannungsabhängigkeiten in Abbildung 3.14 a) dargestellt. Beginnend mit dem idealen Tunnelkontakt liegt das Maximum des TMR-Verhältnisses bei steigendem Oxidationsgrad immer bei verschwindender Spannung. Für die teilweise oxidierten Grenzflächen ist ein sprunghafter Abfall des TMR-Verhältnisses bei 0, 2V beziehungsweise $-0, 2V$ zu erkennen. Unterhalb und oberhalb dieser Spannung ist das TMR-Verhältnis nahezu konstant, wobei es für höhere Oxidationsgrade nach dem Sprung negativ ist. Ein Blick auf Abbildung 3.9 liefert als Grund für den Sprung den plötzlichen Anstieg der Stromdichte in der asymmetrischen Struktur des Tunnelkontakts. Ein Vergleich des Kurvenverlaufs bei 20% Oxidation links und rechts mit den gemessenen Spannungsabhängigkeiten von

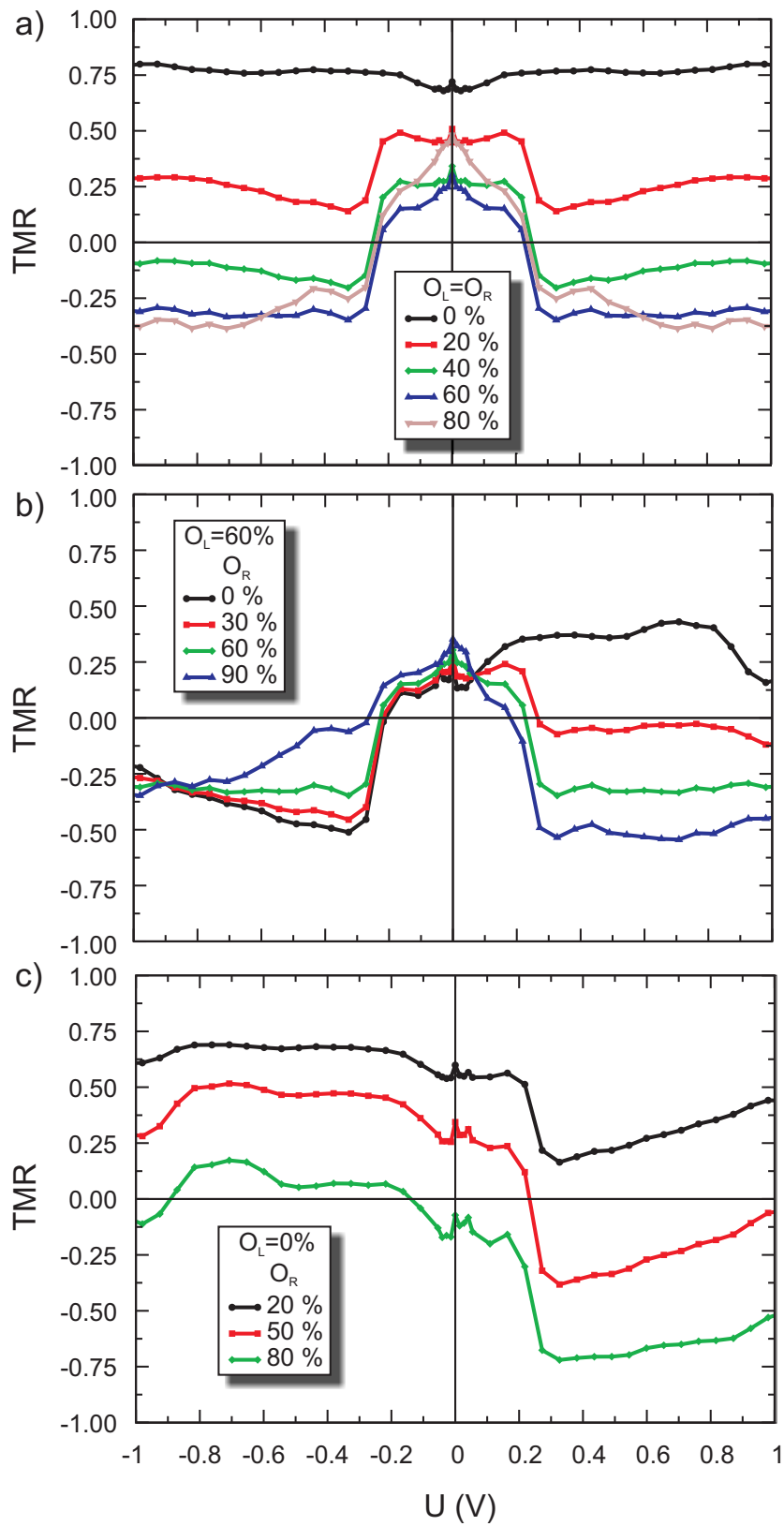


Abbildung 3.14: Spannungsabhängigkeit des TMR-Verhältnisses für verschieden angenommene Oxidationsstufen an der linken O_L und rechten O_R Grenzfläche [E5].

Yuasa *et al.* [83] (siehe Abbildung 3.6 a)) ergibt als Gemeinsamkeit das Abfallen des TMR-Verhältnisses mit steigender Spannung. Allerdings ist dieser Abfall im Experiment glatt und nicht sprunghaft wie in den berechneten Abhängigkeiten. Trotzdem zeigt dieses einfache Modell für die unvollständige Oxidation, daß durchaus eine geringe Oxidation der Grenzflächen dafür sorgen kann, daß aus dem fast konstanten TMR-Verhältnis des idealen Tunnelkontakts eine Spannungsabhängigkeit entsteht, wie sie experimentell bestimmt worden ist.

Um die experimentellen Ergebnisse von Tiusan *et al.* [84] (siehe Abbildung 3.6 b)) einzuordnen, zeigen Abbildung 3.14 b) und c) TMR-Spannungs-Kennlinien für asymmetrische Tunnelkontakte. In Abbildung 3.14 b) wird ein Oxidationsgrad von 60% an der linken Grenzfläche und verschiedene Oxidationsgrade an der rechten Grenzfläche betrachtet. Diese Strukturen weisen, für positive und negative Spannungen getrennt, einen ähnlichen Kurvenverlauf wie die Kurven in Abbildung 3.14 a) auf. Diese Teilverläufe werden asymmetrisch miteinander verknüpft. Jedoch hat keine dieser Spannungsabhängigkeiten einen ähnlichen Verlauf wie die experimentellen Daten von Tiusan *et al.* [84].

Folgt man der Argumentation von Tiusan *et al.* [84], daß nur eine der Grenzflächen oxidiert ist, so erhält man innerhalb des hier vorgestellten einfachen Modells die in Abbildung 3.14 c) dargestellten Spannungsabhängigkeiten. Unter Berücksichtigung des experimentell untersuchten Spannungsbereichs von $-0,5V$ bis $0,5V$ ist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der gemessenen (siehe Abbildung 3.6 b)) und der berechneten Spannungsabhängigkeit mit einem Oxidationsgrad von 50% an der rechten Grenzfläche zu erkennen. Insbesondere das konstante TMR-Verhältnis für negative Spannungen und der Vorzeichenwechsel bei der gleichen positiven Spannung sind hervorzuheben. Damit wird die Annahme der Experimentatoren gestützt, daß eine Grenzfläche ideal und die andere oxidiert ist. Die Ursache des Abfalls und damit auch des Vorzeichenwechsels des TMR-Verhältnisses ist der Sprung der Stromdichte in der asymmetrischen Kontaktgeometrie. Unter Einbeziehung der Analyse von Abschnitt 3.2.4 ist nicht, wie bei Tiusan *et al.* [84] argumentiert, die Oberflächenresonanz in der FeO-Zustandsdichte der Grund des Vorzeichenwechsels des TMR-Verhältnisses, sondern einige wenige Zustände im \mathbf{k}_{\parallel} -Raum, die sehr gut tunneln können und eine Resonanz in der Transmissionswahrscheinlichkeit verursachen. Die Zustände liegen energetisch in der Nähe der Oberflächenresonanz.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die in der vorliegenden Arbeit berechneten TMR-Spannungs-Kennlinien Grenzfälle für ideale und für vollständig oxidierte Grenzflächen darstellen. Da für alle drei betrachteten Strukturen deutlich unterschiedliche Spannungsabhängigkeiten erhalten wurden, liegt der Schluß nahe, daß durch den Oxidationsgrad der Verlauf der Spannungsabhängigkeit eingestellt werden kann. Innerhalb eines einfachen Modells Gleichung (3.3) können durch die Annahme von unvollständiger Oxidation die experimentellen Ergebnisse aus Abbildung 3.9 erklärt werden.

3.2.6 Vergleich zum Julliere-Modell

Die Bedeutung der kohärenten Beschreibung des Transports soll in diesem Abschnitt durch einen Vergleich zum Julliere-Modell hervorgehoben werden. Die dazu herangezogene Größe $f(V)$ wurde bereits im Abschnitt 2.2.2 in Gleichung (2.76) eingeführt. Der Proportionalitätsfaktor $f(V)$ ist ein Maß für die Abweichung der Identität (2.73) im Julliere-Modell. Streng innerhalb des Julliere-Modells gilt $f(V) \equiv 1$. Eine Abweichung

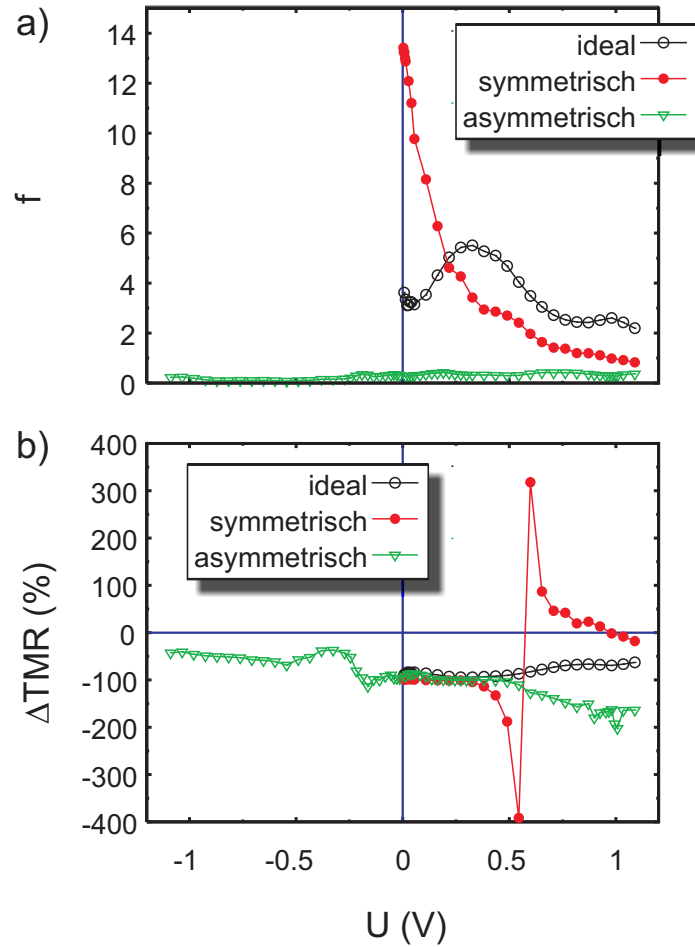


Abbildung 3.15: Spannungsabhängigkeit des Proportionalitätsfaktors $f(V)$ nach Gleichung (2.76) und der relativen Abweichung des TMR-Verhältnisses nach Gleichung (3.4) [E5].

der in der vorliegenden Arbeit parameterfrei berechneten spinabhängigen Stromdichten von dieser Identität bedeutet, daß diese Ergebnisse nicht innerhalb des Julliere-Modells erhalten werden können. Abbildung 3.15 a) zeigt die Spannungsabhängigkeit von f für die drei betrachteten Grenzflächenstrukturen. Dabei haben die ideale und die symmetrische Struktur ein großes positives f , welches für den symmetrischen Kontakt für hohe Spannungen gegen 1 geht. Für den asymmetrischen Tunnelkontakt ist $f(V)$ deutlich kleiner als 1.

Um diese Unterschiede deutlich zu machen, ist in Abbildung 3.15 b) die relative Abweichung

$$\Delta TMR = \frac{TMR - TMR_{jul}}{TMR} \quad (3.4)$$

des TMR-Verhältnisses im Julliere-Modell nach Gleichung (2.80) von dem TMR-Verhältnis im kohärentem Grenzfall dargestellt. Es wird offensichtlich, daß die Abweichung sehr groß ist und bis zu 400% betragen kann. Dadurch wird ersichtlich, daß das Julliere-Modell tatsächlich kein adäquates Modell ist, um Eigenschaften im Grenzfall des kohärenten Tunnelns zu erfassen.

3.3 Barriere

3.3.1 Experimentelle Befunde

Die Bedeutung der Tunnelbarriere als Symmetriefilter wurde im Abschnitt 3.1 verdeutlicht. In diesem Abschnitt soll die Abhängigkeit der Transportgrößen von der Barrierendicke dargestellt werden. Insbesondere ergibt sich die Frage, wie sich mögliche Signaturen in den Stromdichte-Spannungs-Kennlinien bei unterschiedlichen Dicken verhalten. In Abbildung 3.6 a) sind experimentell gewonnene TMR-Spannungs-Kennlinien für verschiedene Barrierendicken dargestellt [83]. Es ist zu erkennen, daß der prinzipielle Verlauf unverändert bleibt. Allerdings zeigen diese Kurven keine besonderen Charakteristika sondern einen glatten Verlauf. Die aus der gleichen Arbeit stammenden Abhängigkeiten des Flächenwiderstands und des TMR-Verhältnisses von der Barrierendicke sind in Abbildung 3.16 dargestellt. Der exponentielle Anstieg des Widerstandes ist sehr gut zu erkennen, wobei der Anstieg für beide magnetischen Konfigurationen für große Barrierendicken gleich ist. Das TMR-Verhältnis zeigt eine Oszillation mit einer Periode von 0.3nm , die jedoch nicht mit dem Lagenabstand im MgO von 0.22nm übereinstimmt.

Ein weiterer Aspekt der Barriere, auf den im Abschnitt 3.3.5 eingegangen wird, ist der Einfluß der Barrierendicke auf die tunnelnden Zustände und die damit verbundene Polarisation des Stroms.

3.3.2 Untersuchte Strukturen

In der vorliegenden Arbeit sollen die genannten Aspekte näher betrachtet werden. Dazu werden die drei im Abschnitt 3.2 vorgestellten Grenzflächenstrukturen (ideal, symmetrisch, asymmetrisch) mit einer Barriendicke von 6 Monolagen MgO selbstkonsistent berechnet. Die übrigen untersuchten Dicken werden durch Vervielfältigung der mittleren MgO-Potentiale ohne einen zusätzlichen selbstkonsistenten Zyklus erhalten. Die

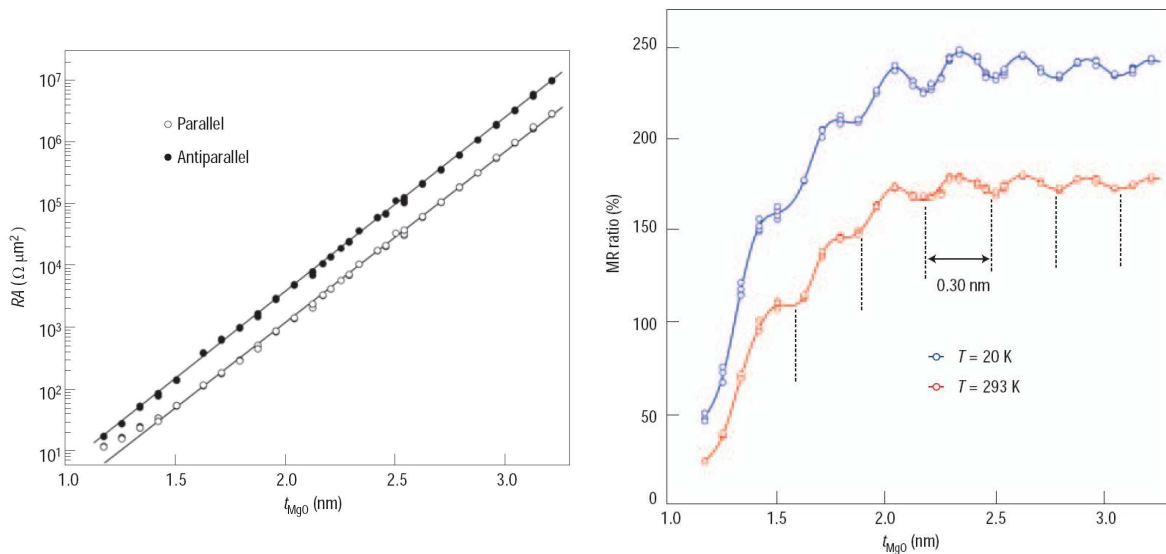


Abbildung 3.16: Experimentelle Abhängigkeit des Flächenwiderstandes (links) und des optimistischen TMR-Verhältnisses (rechts) von der Barrierendicke [83].

untersuchten Barrierendicken reichen von 6 bis 30 Monolagen MgO und gehen damit über die im Experiment [83] untersuchten Dicken von circa 6 bis 15 Monolagen MgO hinaus. Mit Hilfe eines dichten Netzes innerhalb des untersuchten Dickenbereiches soll geklärt werden, ob es sich bei den beobachteten Oszillationen (siehe Abbildung 3.16 rechts) um einen intrinsischen Effekt handelt. Dazu werden Rechnungen bei 0V und einer kleinen Spannung vorgenommen. Um der Frage nach den Charakteristika in den Stromdichte-Spannungs-Kennlinien nachzugehen, werden diese zusätzlich für 8 und 12 Monolagen MgO berechnet und mit den Ergebnissen der Analyse des Einflusses der Grenzflächenstruktur aus Abschnitt 3.2 verglichen.

3.3.3 Strom-Spannungskennlinien

Abbildung 3.17 zeigt die in der vorliegenden Arbeit berechneten Stromdichte-Spannungs-Kennlinien für die ideale, symmetrische und asymmetrische Grenzflächenstruktur für eine Barrierendicke von 8 und 12 Monolagen MgO. Ein Vergleich mit den Abhängigkeiten der Stromdichten bei einer dünnen Barriere von 4 Monolagen MgO aus Abbildung 3.9 (oberer Reihe) liefert einen prinzipiell gleichen Kurvenverlauf unabhängig von der Barrierendicke. Ein Unterschied ist in den absoluten Werten zu finden, die etwa um drei Größenordnungen beim Hinzufügen von je 4 Monolagen MgO kleiner werden. Die wichtigsten qualitativen Eigenschaften bleiben für alle drei Grenzflächenstrukturen erhalten. So hängt die Stromdichte für die ideale Struktur immer linear von der Spannung ab. Daß die Stromdichte in der AP magnetischen Konfiguration stärker steigt als in der P-Anordnung und ab einer gewissen Spannung sogar größer wird, ist für den symmetrischen Tunnelkontakt auch bei einer dickeren Barriere erfüllt. Der damit verbundene Vorzeichenwechsel verschiebt sich im Vergleich zur dünnen Barriere (siehe Abbildung 3.9) zu etwas höheren Spannungen, ist aber immer

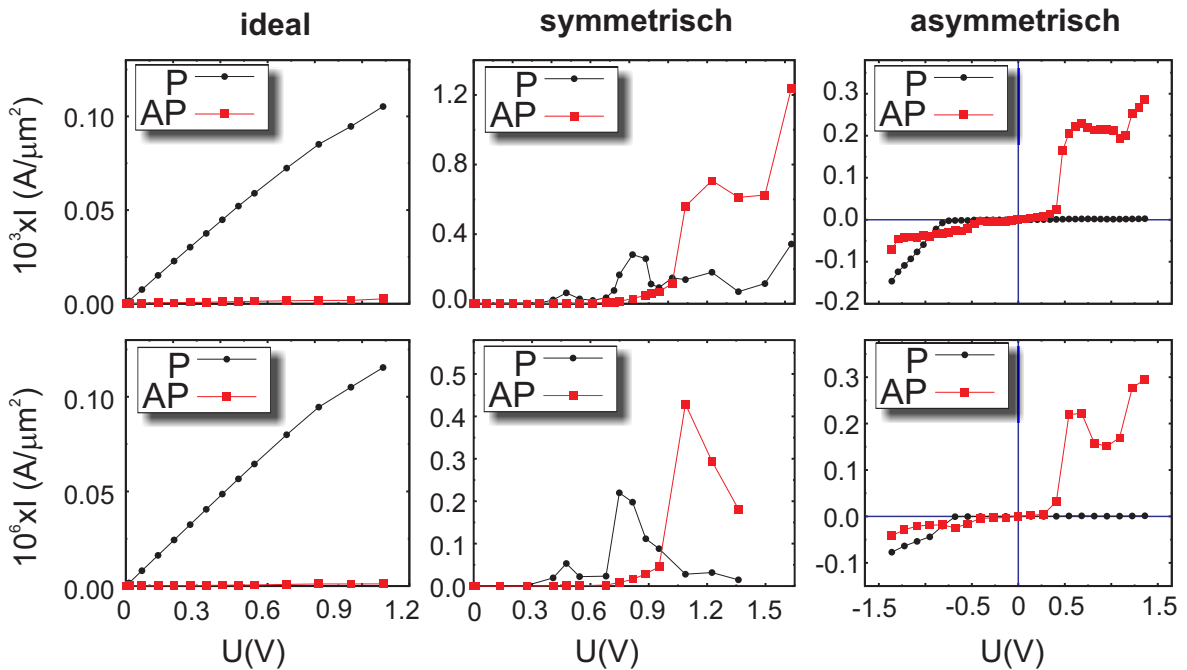


Abbildung 3.17: Stromdichte-Spannungs-Kennlinien für die ideale, symmetrische und asymmetrische Grenzflächenstruktur für 8 (obere Reihe) und 12 (untere Reihe) Monolagen MgO [E2].

noch vorhanden. Der Sprung der Stromdichte in der AP-Konfiguration mit asymmetrischer Grenzflächenstruktur tritt bei den dickeren Barrieren bei der gleichen Spannung auf.

Zusammengefaßt ist der qualitative Verlauf der Stromdichte-Spannungs-Kennlinien unabhängig von der Barrierendicke. Damit ist zu erwarten, daß Indizien für kohärentes Tunneln in den Strom-Spannungs-Kennlinien bei dickeren Barrieren ebenfalls nachweisbar sind. Voraussetzungen dafür sind zum einen eine qualitativ hochwertige einkristalline Barriere und zum anderen eine Grenzfläche, die interessante Eigenschaften in der Spannungsabhängigkeit verursacht. Betrachtet man zum Beispiel die Kennlinien aus Abbildung 3.6 links, so handelt es sich wahrscheinlich um ideale Grenzflächen (siehe Diskussion Abschnitt 3.2), die keine besonderen Merkmale aufweisen.

3.3.4 Dickenabhängigkeit bei verschwindender Spannung

Um die Frage nach den experimentell gefundenen Oszillationen beantworten zu können, sind in der Abbildung 3.18 der Flächenwiderstand und die zugehörigen TMR-Verhältnisse in Abhängigkeit der Barrierendicke über einen großen Bereich von 6 bis 30 Monolagen MgO dargestellt. Damit ist die maximal betrachtete Dicke viel größer als die maximale Barrierendicke im Experiment von Yuasa *et al.* [83] mit rund 15 Monolagen MgO. Der exponentielle Anstieg des Flächenwiderstandes mit zunehmender Barrierendicke ist sehr gut für alle drei betrachteten Strukturen wiedergegeben. Allerdings haben die verschiedenen Strukturen einen unterschiedlich starken Anstieg für geringe Barrierendicken, der für die ideale Grenzflächenstruktur am geringsten ist und für die symmetrische Struktur am größten. In Übereinstimmung mit anderen Rechnun-

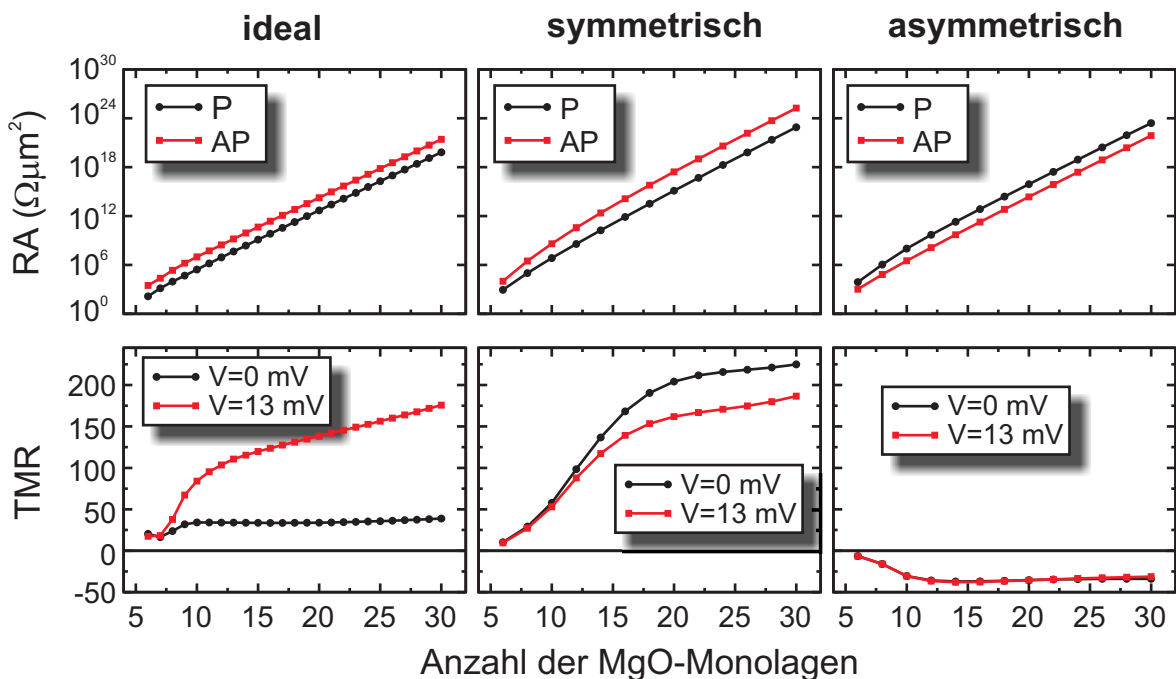


Abbildung 3.18: Abhängigkeit des Flächenwiderstands (oberer Reihe) für $V = 0 \text{ mV}$ und des zugehörigen TMR-Verhältnisses von der Barrierendicke für die ideale, symmetrische und asymmetrische Grenzflächenstruktur für $V = 0 \text{ mV}$ und $V = 13 \text{ mV}$ [E2].

gen [107] ist der berechnete exponentielle Anstieg für die ideale Struktur jedoch circa 1,5 mal größer als die experimentellen Ergebnisse. Ein Grund für den geringeren gemessenen Anstieg kann eine nicht perfekte Barriere sein, bei der durch Gitterdefekte die effektive Barrierenhöhe abgesenkt ist.

Die zu den Flächenwiderständen gehörenden TMR-Verhältnisse in Abbildung 3.18 sind für den Grenzfall verschwindender Spannung und einer kleinen angelegten Spannung von 13mV berechnet, um den möglichen Einfluß von starken Resonanzen ohne angelegte Spannung einzuschränken. Bei allen drei Strukturen nimmt der Betrag des TMR-Verhältnisses mit steigender Barrierendicke in Übereinstimmung mit dem Experiment [83] zu, wobei das TMR-Verhältnis für die asymmetrische Struktur immer negativ ist. Der Anstieg des TMR-Verhältnisses läßt sich auf eine unterschiedliche Dämpfung der Zustände in den Spinkanälen zurückführen. Wie bereits im Abschnitt 3.1.3 erklärt, ist die Position in der Brillouinzone der zum Strom beitragenden Zustände im Majoritäts- und Minoritätskanal unterschiedlich. Da die Spinkanäle im AP-Fall einfach abgeschätzt das Produkt des Majoritäts- und Minoritätskanals sind, gilt die Aussage über die Position ebenfalls beim Vergleichen von P- und AP-Anordnung. Die unterschiedliche Position in der Brillouinzone resultiert in einer unterschiedlichen Dämpfung (siehe Abbildung 3.3). Die Position der zum Strom beitragenden Zustände für dickere Barrieren und die damit verbundene Sättigung des TMR-Verhältnisses wird im nächsten Abschnitt diskutiert.

Die angelegte Spannung bewirkt nur für den idealen Tunnelkontakt eine nennenswerte Änderung. So bleibt der qualitative Verlauf unverändert, während die Größe des TMR-Verhältnisses deutlich ansteigt. Der entscheidende Punkt bei allen Strukturen ist allerdings das Fehlen jeglicher Oszillationen im TMR-Verhältnis wie es jedoch experimentell beobachtet wurde. Dies legt den Schluß nahe, daß es sich bei den beobachteten Oszillationen nicht um einen intrinsischen Quantensize-Effekt, hervorgerufen durch die endliche Barrierendicke, handelt. Damit müssen die gemessenen Oszillationen eine andere Ursache, wie zum Beispiel wachstumsbedingte Schwankungen, haben. Am Ende des nächsten Abschnitts wird noch einmal die Frage nach den Oszillationen aufgenommen, nachdem die zum Tunneln beitragenden Zustände analysiert wurden.

3.3.5 Stromtragende Tunnelzustände

Für das Verständnis der Abhängigkeit der elektronischen Transportgrößen von der Barrierendicke ist eine Analyse der Position der zum Strom beitragenden Zustände innerhalb der Brillouinzone notwendig. Das prinzipiell zu erwartende Verhalten wurde bereits anhand der komplexen Bandstruktur von MgO im Abschnitt 3.1.2 abgeschätzt. Dabei ist zu erwarten, daß die Symmetriefilterung mit dickerer Barriere immer stärker wird und sich die zum Strom beitragende Zustände im Brillouinzonenzentrum befinden. In diesem Abschnitt soll diese Betrachtung quantifiziert werden.

In Abbildung 3.19 ist der prozentuale Anteil der Zustände, die 99% der gesamten Stromdichte ausmachen, in Abhängigkeit von der Barrierendicke dargestellt. Unabhängig von der Grenzflächenstruktur ist ein starker Abfall des beitragenden Anteils zu erkennen. Ab 10 Monolagen MgO tragen bei fast allen Strukturen und magnetischen Konfigurationen weniger als 10% der Zustände nennenswert zum Transport bei. Ab 15 Monolagen sinkt der Anteil sogar unter 5%. Dabei ist dieser Anteil für dicke Barrieren bei der P- und AP-Konfiguration gleichermaßen gering.

Für eine genauere Analyse sind in Abbildung 3.20 die \mathbf{k}_{\parallel} -aufgelösten Transmissions-

wahrscheinlichkeiten exemplarisch für den asymmetrischen Tunnelkontakt dargestellt. Die jeweiligen vier möglichen Spinkanäle sind getrennt abgebildet und die Skala ist auf das jeweilige Maximum skaliert. Es wird deutlich, daß vor allem für die Kanäle $\uparrow\uparrow$, $\downarrow\downarrow$ und $\downarrow\uparrow$ für relativ dünne Barrieren eine hohe Anzahl von Zuständen beitragen, während für dicke Barrieren nur die Beiträge in der Nähe des Γ -Punktes übrig bleiben. Diese Aussage ist äquivalent zu der im Abschnitt 3.1 durchgeführten Analyse der komplexen Bandstruktur von MgO, in der gezeigt wurde, daß die Zustände am Γ -Punkt die geringste Abklinglänge besitzen. In der Arbeit von Butler *et al.* [98] wurde die komplexe Bandstruktur nur am Γ -Punkt analysiert. Gleichzeitig wird in der zitierten Arbeit eine Symmetrieanalyse am Γ -Punkt vorgenommen, um daraus abzuleiten, daß die Zustände mit Δ_1 -Symmetrie deutlich schwächer als Zustände mit Δ_5 -Symmetrie innerhalb der Barriere gedämpft werden. Unter Einbeziehung der Symmetrieanalyse von Fe am Γ -Punkt mit Δ_1 -Charakter im Majoritäts- und Δ_5 -Charakter im Minoritätsband folgt sofort der Anstieg des TMR-Verhältnisses mit steigender Dicke der Barriere, da die Spinkanäle $\downarrow\downarrow$, $\uparrow\downarrow$ und $\downarrow\uparrow$ deutlich stärker gedämpft werden als der Spinkanal $\uparrow\uparrow$. Daraus würde aber auch folgen, daß das TMR-Verhältnis unbeschränkt anwachsen müßte, was sowohl experimentell (siehe Abbildung 3.16) als auch theoretisch (siehe Abbildung 3.18) nicht der Fall ist. Eine weitere Schlußfolgerung dieses Modells wäre, daß im Grenzfall großer Dicken nur noch der Zustand am Γ -Punkt in der P-Konfiguration tunnelt.

Um mit dem zuletzt genannten Aspekt zu beginnen, wird die Analyse aus den Abbildungen 3.19 und 3.20 kombiniert. In Abbildung 3.21 a) ist die k_{\parallel} -aufgelöste Transmissionswahrscheinlichkeit für die symmetrische Grenzflächenstruktur bei einer Barrierendicke von 10 Monolagen MgO für die P-Konfiguration dargestellt. Die zugehörige Kreisscheibe innerhalb der ersten Brillouinzone in der die Zustände enthalten sind, die 90% der Stromdichte ausmachen, ist in Abbildung 3.21 b) zu sehen. Der minimale und maximale Radius dieser Kreisscheibe $k_{<}$, $k_{>}$, wurden für jede Grenzflächenstruktur und für alle Barrierendicken bestimmt. Die Ergebnisse dieser Analyse sind in Abbil-

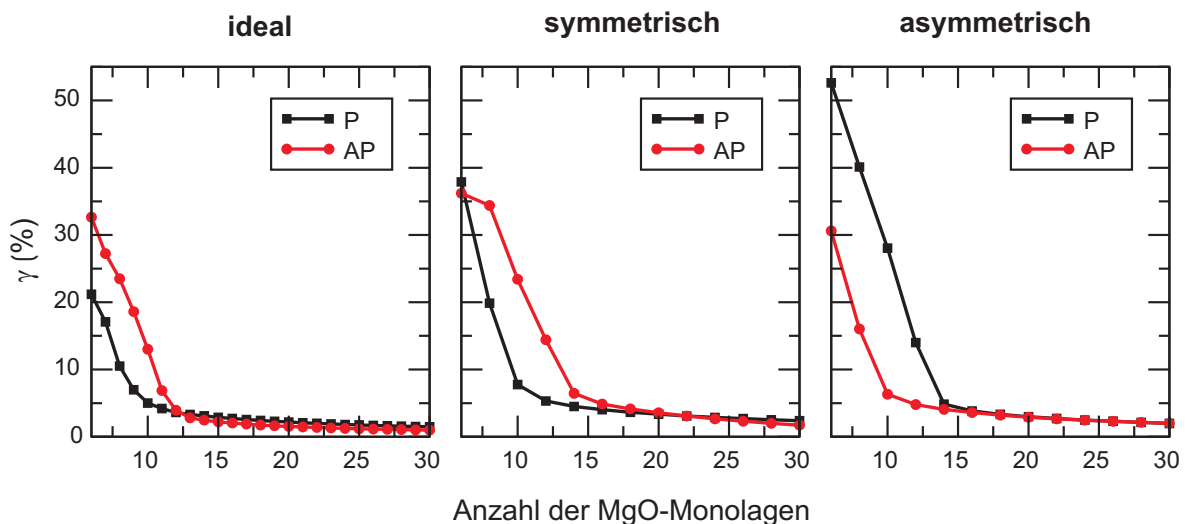


Abbildung 3.19: Relativer Anteil γ der Zustände innerhalb der ersten Brillouinzone, die 99% zur Stromdichte beitragen, in Abhängigkeit der Barrierendicke für die ideale, symmetrische und asymmetrische Grenzflächenstruktur [E6].

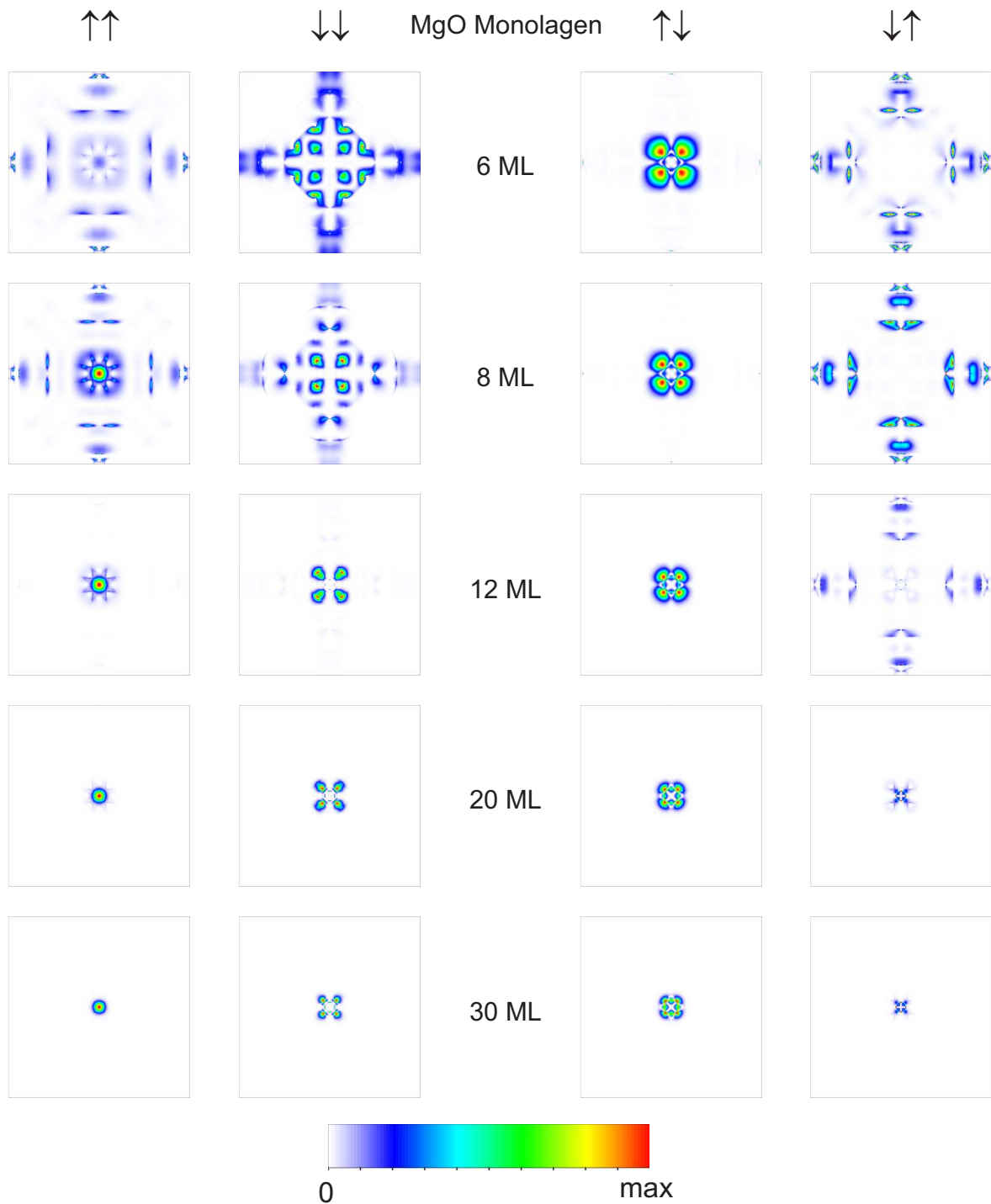


Abbildung 3.20: Spin-abhängige $k_{||}$ -aufgelöste Transmissionswahrscheinlichkeit in der 1. Brillouinzone für den asymmetrischen Tunnelkontakt in P- ($\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow$) und AP-Konfiguration ($\uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow$) für verschiedene Barrierendicken [E6].

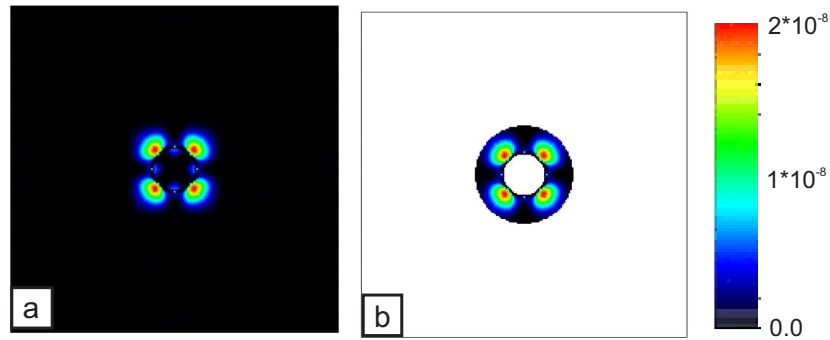


Abbildung 3.21: $k_{||}$ -aufgelöste Transmissionswahrscheinlichkeit für den symmetrischen Tunnelkontakt mit einer Barrierendicke von 10 Monolagen MgO für die P Konfiguration: a) gesamte Brillouinzone; b) Kreisscheibe in der sich die Zustände befinden, die 90% zur Leitwertdichte beitragen [E2].

Abbildung 3.22 in Form von Balkendiagrammen zusammengefaßt. Dabei gibt die Unterseite eines Balkens den minimalen und die Oberseite den maximalen Radius der zugehörigen Kreisscheibe in der ersten Brillouinzone an. Das bereits anhand der anderen Abbildungen erkennbare Zusammenziehen der beitragenden Zustände hin zum Zentrum der Brillouinzone wird noch einmal deutlich. Bei allen AP-Konfigurationen ist jedoch der Γ -Punkt für alle Barrierendicken ausgeschlossen. Der Grund hierfür liegt in der Δ_5 -Symmetrie der Zustände an diesem Punkt der Brillouinzone und dem damit verbundenen Fehlen von Δ_1 -Zuständen in den entsprechenden Spinkanälen. In der P-Anordnung tunnelt der Zustand am Γ -Punkt für dicke Barrieren bei der idealen und asymmetrischen Grenzflächenstruktur. Der Beitrag für den symmetrischen Tunnelkontakt ist jedoch verschwindend gering. Dies liegt daran, daß für diesen Fall der Minoritätsspinkanal dominiert. Die Anschlußbedingungen für den Majoritätskanal verschlechtert sich aufgrund der zwei FeO Schichten.

Um diese Annahme über die Rolle der Anschlußbedingungen zu bestätigen, ist es sinnvoll, die Abklinglängen der Transmissionswahrscheinlichkeit mit steigender Barrierendicke für alle Strukturen und Spinkanäle zu berechnen. Dazu wurde für jedes $k_{||}$

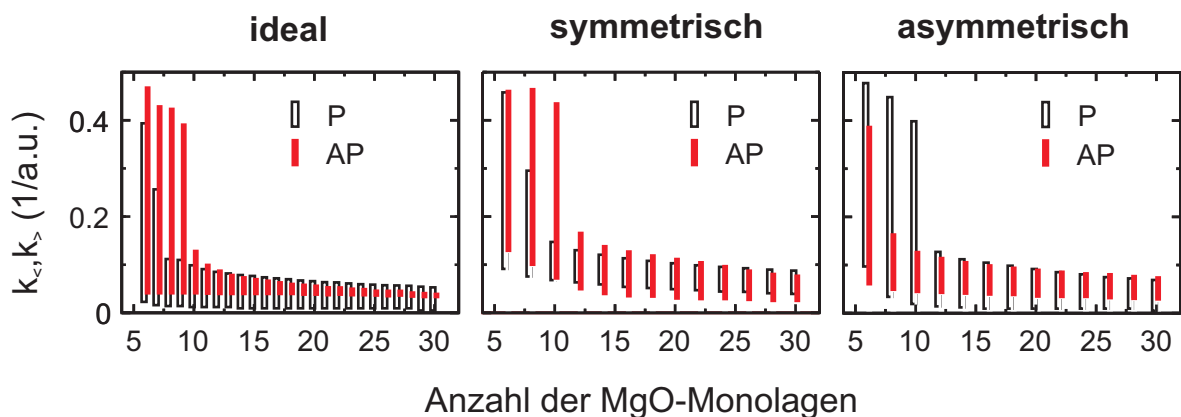


Abbildung 3.22: Radien der Kreisscheibe in der ersten Brillouinzone, die 90% der gesamten Leitwertdichte trägt (siehe Abbildung 3.21) für die ideale, symmetrische und asymmetrische Grenzflächenstruktur [E2].

die Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Barrierendicke analysiert und an einen exponentiellen Abfall angepaßt. Abbildung 3.23 zeigt die so bestimmten Abklinglängen. Diese stimmen für alle Spinkanäle und Grenzflächenstrukturen überein. Zusätzlich sind sie fast identisch mit dem Imaginärteil der komplexen Bandstruktur von MgO in der Mitte der Bandlücke (Abbildung 3.3). Insbesondere ist es für alle Spinkanäle das komplexe Band aus Abbildung 3.3 mit dem geringsten Imaginärteil. Zwischen den Skalen in Abbildung 3.3 und 3.23 ist noch zusätzlich ein Faktor 2, der aus Gleichung (3.1) folgt, da der exponentielle Abklingfaktor dem doppelten Imaginärteil des komplexen Wellenvektors entspricht. Alle Spinkanäle werden in gleicher Weise gedämpft. Das bestätigt die Annahme aus Abschnitt 3.1, daß für dicke Barrieren nur noch der Anteil der Zustände durch die Barriere tunnelt, die Δ_1 -artig sind. Dadurch ist die strikte Trennung der Spinkanäle aufgrund der Symmetrie nach Butler *et al.* [98] wenn überhaupt, nur für dünne Barrieren gültig. Die unterschiedlichen Transmissionswahrscheinlichkeiten in den Spinkanälen sind auf die unterschiedlichen Drehimpulsanteile (siehe Abschnitt 3.1) der Zustände, die an dieses Band ankoppeln, beziehungsweise auf ihre Position in der Brillouinzone zurückzuführen. So haben die Zustände in der Nähe des Γ -Punkts die geringsten Abklinglängen, wodurch die Reduktion der beitragenden Zustände aus Abbildung 3.20 in Übereinstimmung mit dem freien Elektronenmodell ist.

Das Anwachsen des TMR-Verhältnisses ist ebenfalls auf diese Reduktion zurückzuführen. Bei großen Barrierendicken sind die beitragenden Zustände nahezu im gleichen Gebiet der Brillouinzone und erfahren die gleiche Dämpfung. Dadurch erklärt sich

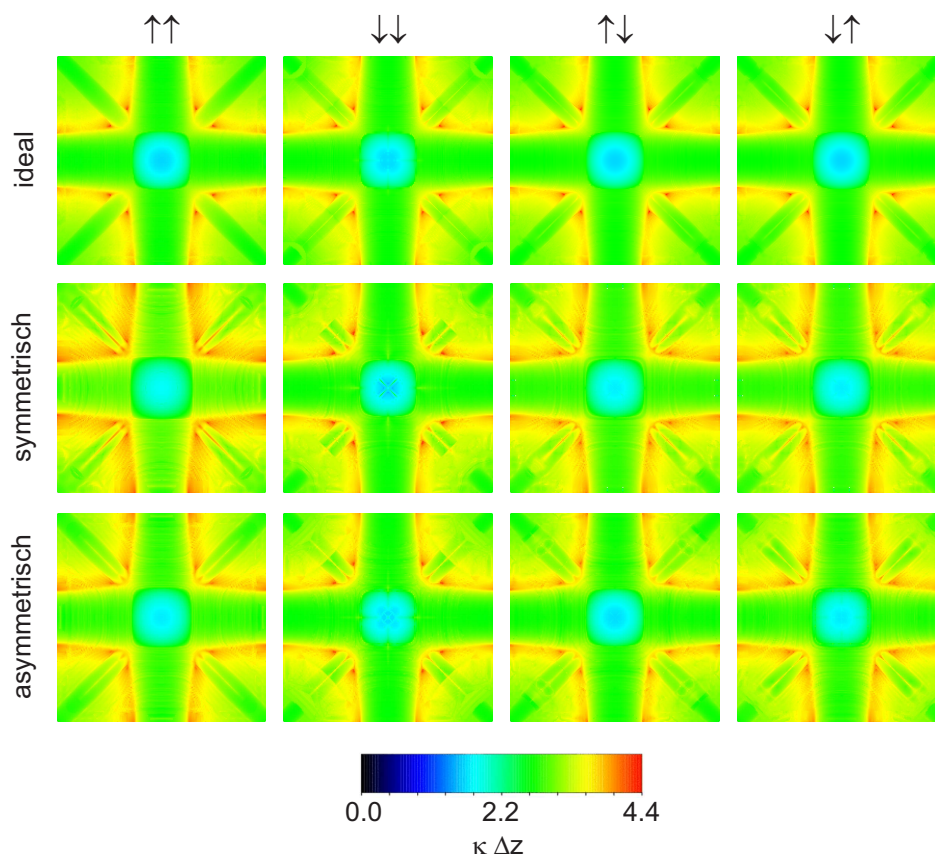


Abbildung 3.23: $k_{||}$ -aufgelöste inverse Abklinglängen ermittelt aus der Abhängigkeit der Transmissionswahrscheinlichkeit von der Barrierendicke [E2].

die einsetzende Sättigung des TMR-Verhältnisses für große Dicken. Der asymptotische Wert ist durch die in den jeweiligen Spinkanälen unterschiedlichen Drehimpulsanteile an Zuständen, die an das Δ_1 -artige Band mit dem geringstem Imaginärteil im MgO ankoppeln, gegeben.

Ob die experimentell beobachteten Oszillationen des TMR-Verhältnisses in Abhängigkeit der Barrierendicke auf die Verwendung einer MgO Barriere zurückzuführen sind, kann durch die weitere Analyse der komplexen Bandstruktur von MgO innerhalb der Bandlücke geklärt werden. Dazu kann der Realteil des zugehörigen komplexen Bandes in Abbildung 3.3 betrachtet werden. Die Wellenlänge einer Oszillation des TMR-Verhältnisses hervorgerufen durch die MgO-Barriere muß nach Gleichung (3.1) im Realteil des komplexen Wellenvektors wiedergegeben werden. Da die zum Strom beitragenden Zustände vor allem für dicke Barrieren praktisch nur im Brillouinzonezentrum liegen, sind keine Oszillationen zu erwarten. Dies liegt am verschwindendem Realteil des komplexen Wellenvektors in diesem Bereich der Brillouinzone.

Zusammengefaßt bestimmt die Tunnelbarriere, welche Zustände effektiv tunneln. Dabei haben unabhängig vom betrachteten Spinkanal immer nur die Zustände einen nennenswerten Beitrag, die an das Band mit dem geringsten Imaginärteil in der Barriere ankoppeln. Das bedeutet, daß alle Spinkanäle vor allem für dicke Barrieren die gleiche Dämpfung erfahren. Unterschiedliche Leitwerte in den Spinkanälen resultieren aus den entsprechenden Symmetrieanteilen der Zustände, die an dieses Band ankoppeln und deren Lage im \mathbf{k}_\parallel -Raum. Um ein hohes TMR-Verhältnis zu erhalten, müssen somit die Zuleitung beziehungsweise die Grenzfläche gewährleisten, daß es eine große Spinaufspaltung dieser Anteile in den Tunnelzuständen gibt.

3.4 Struktur der Elektroden

3.4.1 Aufbau der Zuleitungen

In einem realen Experiment besteht ein Tunnelkontakt aus einer Vielzahl von Schichten, die entweder zum kristallinen Wachstum des eigentlichen Tunnelkontakts oder zur Kontaktierung dessen notwendig sind. Ein solcher typischer Schichtaufbau einer Tunnelbarriere ist in Abbildung 3.24 skizziert. Dabei ist eine der ferromagnetischen Schichten, in dem dargestellten Fall die untere, magnetisch über eine antiferromagnetische Kopplung gepinnt. Die andere ferromagnetische Schicht ist die freie Schicht mit frei drehbarer Magnetisierung und kann durch ein äußeres Magnetfeld leicht geschaltet werden. Um die Struktur der jeweiligen Schichten genauer zu analysieren, zeigt die Abbildung 3.25 die Aufnahme eines typischen Tunnelkontakts mittels Transmissions-elektronenmikroskopie (TEM). In der abgebildeten Aufnahme [32] ist deutlich die kristalline MgO-Barriere, die sich zwischen zwei, auf den ersten Blick amorph wirkenden, CoFeB-Elektroden befindet, zu erkennen. Dies ist ein Unterschied zu früheren Experimenten der gleichen Gruppe [83] und auch anderer Gruppen [31], bei denen die Barriere zwischen kristallinen Fe-Elektroden eingebettet war. Trotz der Verwendung von amorphen Elektroden wurde ein sehr hohes TMR-Verhältnis von über 230% [32] erhalten, welches sogar über den Werten von Experimenten der gleichen Arbeitsgruppe [83] mit kristallinen Elektroden lag. Weitere experimentelle Untersuchungen dieser Tunnelkontakte deuten darauf hin, daß die Elektroden nicht vollständig amorph sind, sondern teilweise kristallisieren [109]. Die Ursache der Kristallation ist die kristalline MgO-Barriere, die als Keimzelle für das Elektrodenmaterial wirkt. Zusätzlich ist aus der Abbildung 3.25 die Dicke der ferromagnetischen Elektroden abzuschätzen. Diese liegt in der Größenordnung der Barrierendicke.

Aus diesen zwei genannten Sachverhalten leiten sich zwei Fragen ab. Zum einen, welchen Einfluß hat die mögliche amorphe Struktur der Elektroden auf den Transport und zum anderen die Frage nach dem Einfluß einer endlichen Schichtdicke der

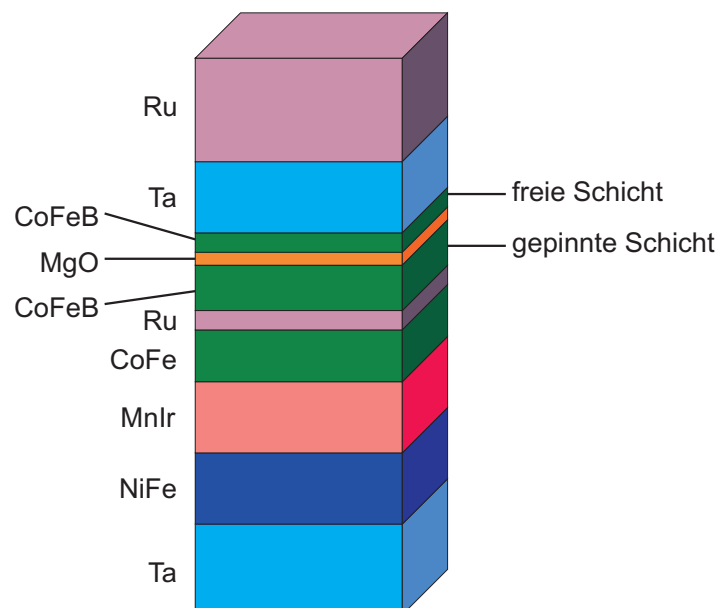


Abbildung 3.24: Typischer Schichtaufbau eines Tunnelkontakts [108].

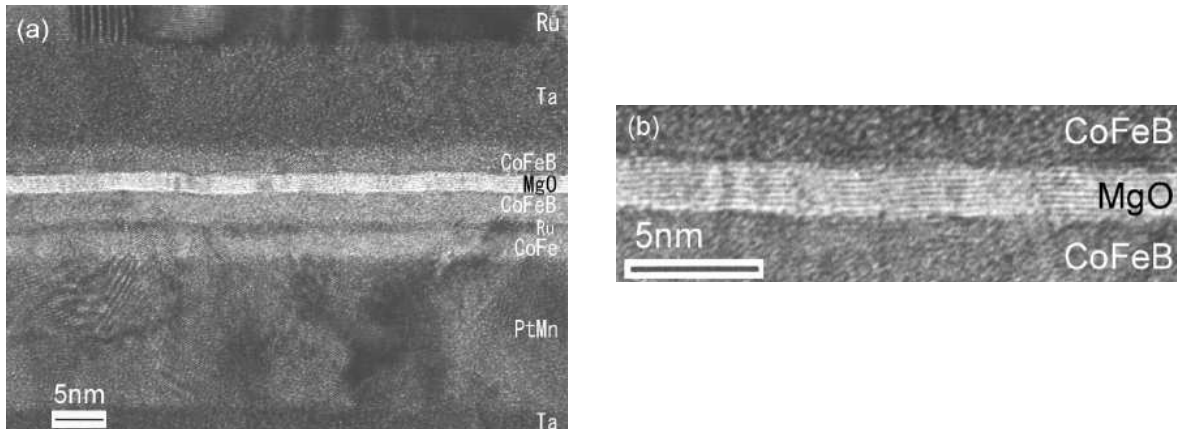


Abbildung 3.25: Transmissionselektronenmikroskopische (TEM) Aufnahme eines Tunnelkontakts. Rechts ist ein Ausschnitt des linken Bilds vergrößert dargestellt [32].

ferromagnetischen Elektroden.

3.4.2 Effektive Tunnelbarrieren

In der Diplomarbeit von Gradhand [110] wurde gezeigt, daß amorphes Fe ein ohmscher Leiter ist und Zustände homogen verteilt im k_{\parallel} -Raum liefert. Die in Abbildung 3.5 gezeigte Spin-Aufspaltung der Drehimpulsanteile in kristallinem Fe wird in amorphen Fe schwächer, wodurch die Symmetriefilterung der Barriere nicht mehr effektiv in eine Spinfilterung umgewandelt werden kann. Konsequenterweise ist das optimistische TMR-Verhältnis bei direktem Kontakt des amorphen Fe zur Barriere mit 44% relativ gering [110]. Daraus ergibt sich die Frage: Wie viele Monolagen kristallines Fe an der Barriere sind notwendig, um ein hohes TMR-Verhältnis zu erreichen?

Um den Einfluß einer endlichen kristallinen Fe-Schicht zu untersuchen, kann der Transport der Δ_1 - und Δ_5 -artigen Zustände durch diese Fe-Schicht diskutiert werden. Dazu wird der Tunnelkontakt in die Barriere, die Zuleitungen und die ferromagnetischen Schichten (FM) eingeteilt. Die Zuleitungen bieten einfach sowohl Δ_1 - als auch Δ_5 -artige Zustände nichtmagnetisch an. Die MgO-Barriere selektiert, wie in den Abschnitten 3.1.2 und 3.3.5 gezeigt, die Δ_1 -artigen Zustände vor allem für dickere Barrieren, bei denen der Strom von Zuständen im Brillouinzonezentrum dominiert wird. Die Δ_5 -artigen Zustände werden deutlich stärker gedämpft. Die Rolle der kristallinen Fe-Schicht kann durch eine Analyse der in Abbildung 3.26 dargestellten komplexen Bandstruktur von Fe für den Majoritäts- und Minoritätsspin analysiert werden. Im Fall der Majoritätselektronen schneidet die Fermienergie das Δ_1 -Band, während das Δ_5 -Band nur knapp berührt wird. Das bedeutet, daß Fe in der Umgebung um den Γ -Punkt leitend für die Δ_1 - und Δ_5 -artigen Zustände ist. Im Fall der Minoritätselektronen wird das Δ_5 -Band durch die Fermienergie geschnitten, während das Δ_1 -Band an dieser Stelle komplex ist. Das bedeutet, daß der Minoritätskanal eine zusätzliche Barriere für die Δ_1 -artigen Zustände darstellt, für die Δ_5 -artigen Zustände jedoch leitend ist.

Mit diesen Aussagen lassen sich zwei verschiedene effektive Tunnelbarrieren für Δ_1 - und Δ_5 -artige Zustände durch die endliche Fe-Schicht zusammen mit der MgO-Barriere definieren, die in der Umgebung des Γ -Punktes gültig sind. In Abbildung 3.27 sind die

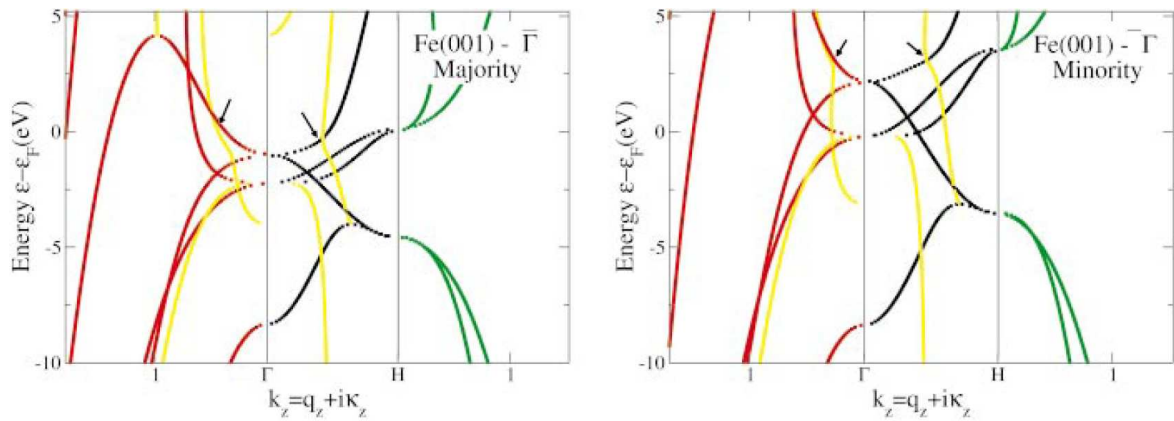


Abbildung 3.26: Komplexe Bandstruktur für die Majoritäts- (links) und Minoritäts-
elektronen (rechts). In Schwarz sind die reellen Bänder dargestellt, in Grün und Rot die rein imaginären Bänder und in gelb die komplexen Bänder mit Real- und Imaginärteil. κ_z ist in Einheiten von $1,89\text{\AA}^{-1}$ angegeben [111].

entstehenden Potentiale für die P- und AP-Konfiguration für die auftretenden Spin-
kanäle dargestellt. Für den AP-Fall ist nur ein Spinkanal angegeben, da für die be-
trachtete symmetrische Barriere beide Spinkanäle entartet sind. Die Symbole Δ_1 be-

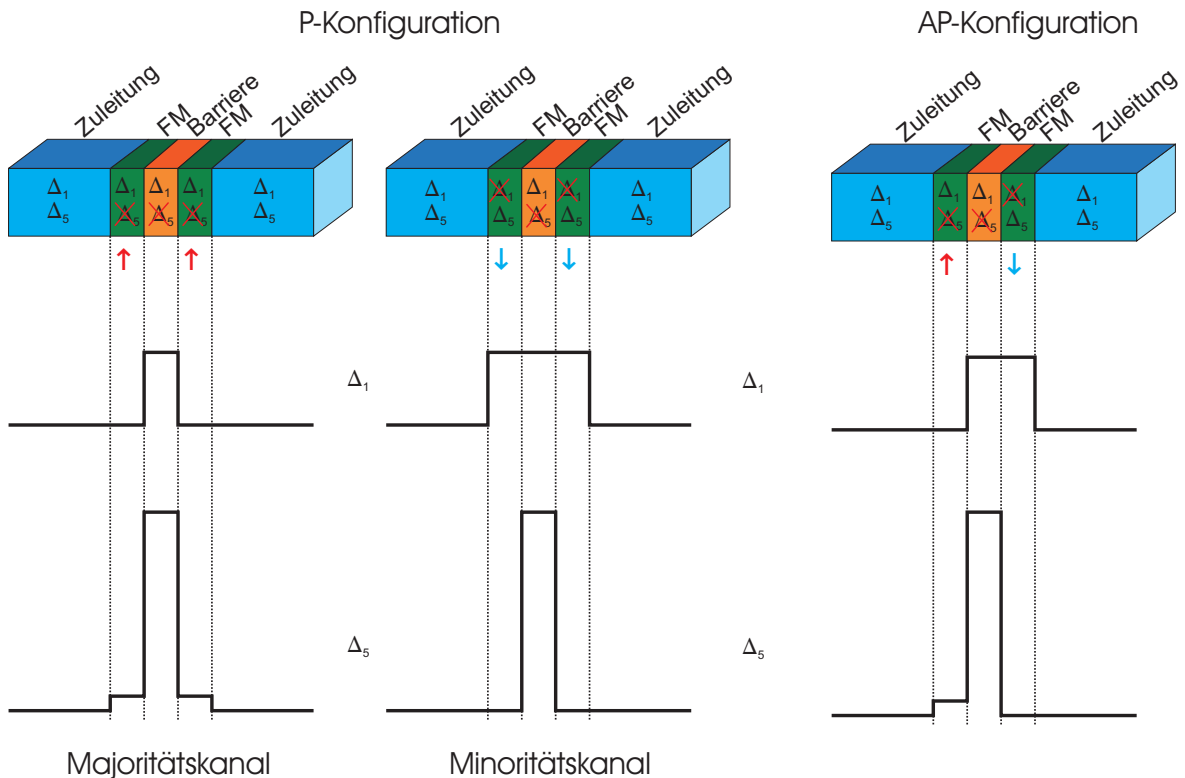


Abbildung 3.27: Effektive Tunnelbarrieren durch eine endliche Fe-Schicht (FM-
Ferromagnet) und durch die MgO-Barriere in Abhängigkeit der mag-
netischen Konfiguration. Δ_1 und Δ_5 stehen dabei für die Δ_1 - und
 Δ_5 -artigen Zustände um den Γ -Punkt. Sind diese Symbole durch-
gestrichen, so ist die Transmissionsamplitude gering [E7].

ziehungsweise Δ_5 stehen dabei für die zugehörigen Δ_1 - und Δ_5 -artigen Zustände. Ist ein Symbol durchgestrichen, müssen diese Zustände durch Fe tunneln beziehungsweise in MgO ist die Dämpfung deutlich größer als für die anderen Zustände. Die entstehenden effektiven Barrieren zeigen, daß für die Δ_1 -artigen Zustände im Majoritätskanal der P-Konfiguration die geringste Barriere auftritt. Für die Δ_5 -artigen Zustände haben in diesem einfachen Bild alle Spinkanäle das gleiche Potential zu überwinden. Damit ist die effektiv niedrigere Barriere in der P-Konfiguration zu finden, womit auch immer ein TMR-Effekt erwartet werden kann, unabhängig von den durch die Zuleitungen angebotenen Zuständen.

Die Frage nach der für ein hohes TMR-Verhältnis notwendigen Dicke der Fe-Schicht kann nur durch quantitative Rechnungen beantwortet werden, wobei die Details natürlich auch von der Grenzflächenstruktur abhängen, die eine zentrale Rolle spielt, wie im Abschnitt 3.2 gezeigt wurde. Um den numerischen Aufwand handhabbar zu halten, werden alle Einflüsse von magnetischen, nichtmagnetischen, amorphen und kristallinen Schichten, die relativ weit weg von der Barriere liegen, durch ein effektives freie-Elektronen-artiges Zuleitungsmaterial beschrieben. Die Zuleitungen sind nichtmagnetisch und dienen als Reservoir vor allem für Δ_1 -artige Zustände, die die geringste Abklinglänge in der MgO-Barriere haben. Das gewährleistet neben einem hohen TMR-Verhältnis gleichzeitig noch einen geringen Flächenwiderstand. Andere Zuleitungen wie zum Beispiel amorphes Fe würden nur zu einem spinabhängigen Angebot an Zuständen führen und somit den TMR-Effekt verstärken.

Zur Quantifizierung der notwendigen Fe-Dicke am Beispiel des idealen Tunnelkontaktes wurden Tunnelkontakte $Cu_{30-x}/Fe_x/(MgO)_6/Fe_x/Cu_{30-x}$ mit Monolagenanzahl $x = 0 \dots 20$ konstruiert. Für jedes betrachtete x wurden selbstkonsistente Rechnungen durchgeführt. Das verwendete Zuleitungsmaterial Cu wurde dabei im bcc-Gitter des kristallinen Fe belassen. Dies ist möglich, da dieses Material nur für die Bereitstellung der Zustände verantwortlich ist und die Details der Elektronenstruktur nicht entscheidend sind. Für die zugehörigen Transportrechnungen wurden die Tunnelkontakte zwischen halbunendliche Zuleitungen aus bcc-Cu eingebettet. Die Zustandsdichte dieses Zuleitungsmaterials ist in Abbildung 3.28 dargestellt.

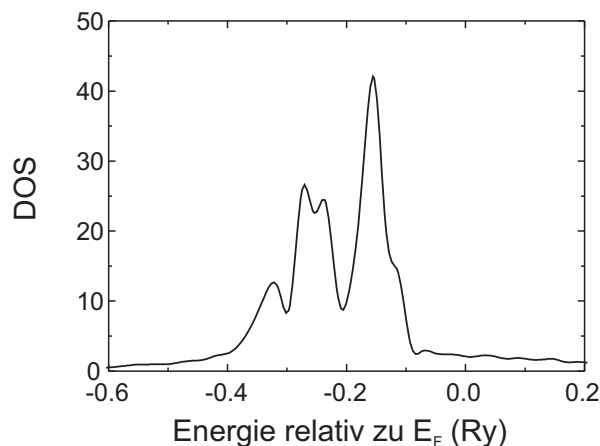


Abbildung 3.28: Zustandsdichte (DOS) von bcc-Cu.

3.4.3 Leitwert in Abhängigkeit der Fe-Dicke

Die Ergebnisse der Leitwertberechnungen in Abhängigkeit der Monolagenanzahl x der kristallinen Fe-Schicht sind in Abbildung 3.29 dargestellt. Ohne Fe ist der gesamte Tunnelkontakt nichtmagnetisch, wodurch die Leitwertdichte im P- und AP-Fall identisch ist. Jedoch genügt schon eine Monolage Fe, um ein drastisches Abfallen der Leitwertdichte in der AP-Konfiguration zu erreichen. Der Absolutwert ist dabei bereits in der Größe der Leitwertdichte mit halbusendlichen Fe-Zuleitungen. Es ist eine Oszillation zu erkennen, die durch die endliche Anzahl der Fe-Monolagen hervorgerufen wird. Dieser Quantensize-Effekt ist in der P-Anordnung stark ausgeprägt und die Leitwertdichte zeigt fast einen even-odd-Effekt. Wiederum schwankt die Leitwertdichte um den Wert des Systems mit halbusendlichen Fe-Zuleitungen. Das bedeutet, daß die Größenordnung der Leitwertdichte unabhängig von der Dicke der Fe-Schicht ist. Der Grund hierfür ist, daß der Widerstand maßgeblich durch die Tunnelbarriere festgelegt wird. Die wichtige Aussage der Abbildung ist der Spinfiltereffekt der Fe-Elektroden, der bereits mit einer Monolage Fe sehr groß ist. Dieser große Spinfiltereffekt, der wie bereits besprochen aufgrund der Symmetriefilterung der Barriere möglich ist, soll im folgenden weiter untersucht werden. Dabei kann sich wie im Abschnitt 3.1.2 diskutiert, der Spinfiltereffekt durch unterschiedliche Drehimpulsanteile oder deren Position in der Brillouinzone ergeben.

Um die Leitwerte genauer analysieren zu können, ist in Abbildung 3.30 die Polarisierung der Leitwertdichte $(g^\uparrow - g^\downarrow)/(g^\uparrow + g^\downarrow)$ in Abhängigkeit der Anzahl der Monolagen Fe für die P-Anordnung dargestellt. Für den AP-Fall ist die Polarisierung für alle Fe-

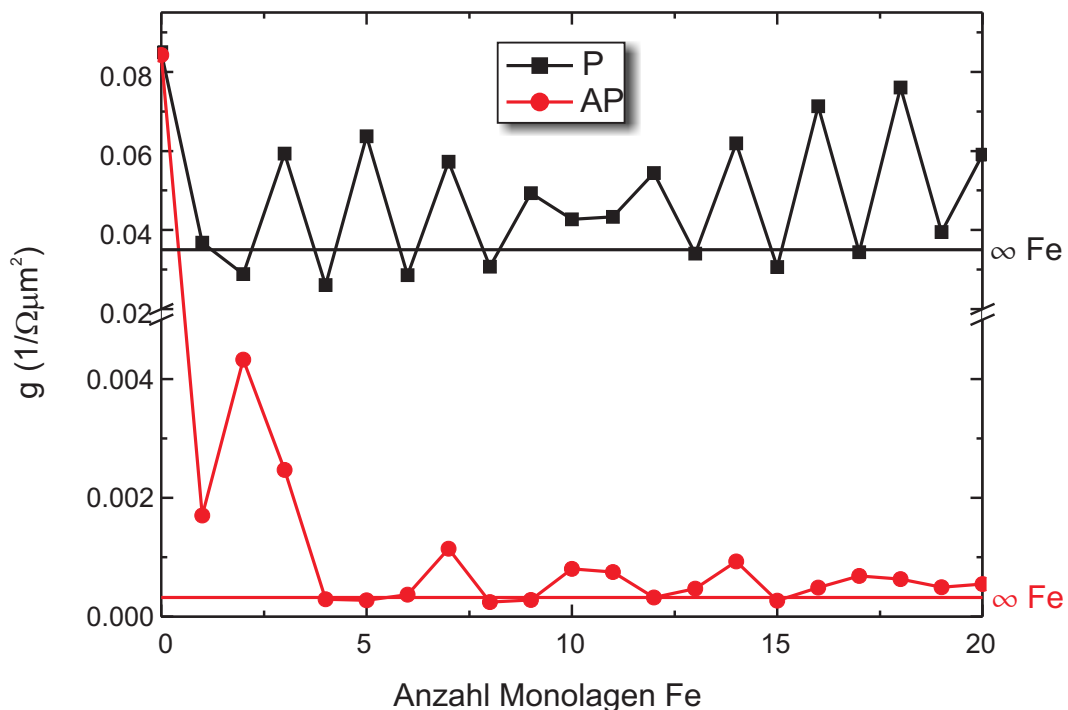


Abbildung 3.29: Leitwertdichte in Abhängigkeit der Anzahl kristalliner Fe-Monolagen für die P- und AP-Anordnung. Die jeweiligen Werte mit halbusendlichen Fe-Zuleitungen sind durch horizontale Linien gekennzeichnet. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung der Achsenabschnitte [E7].

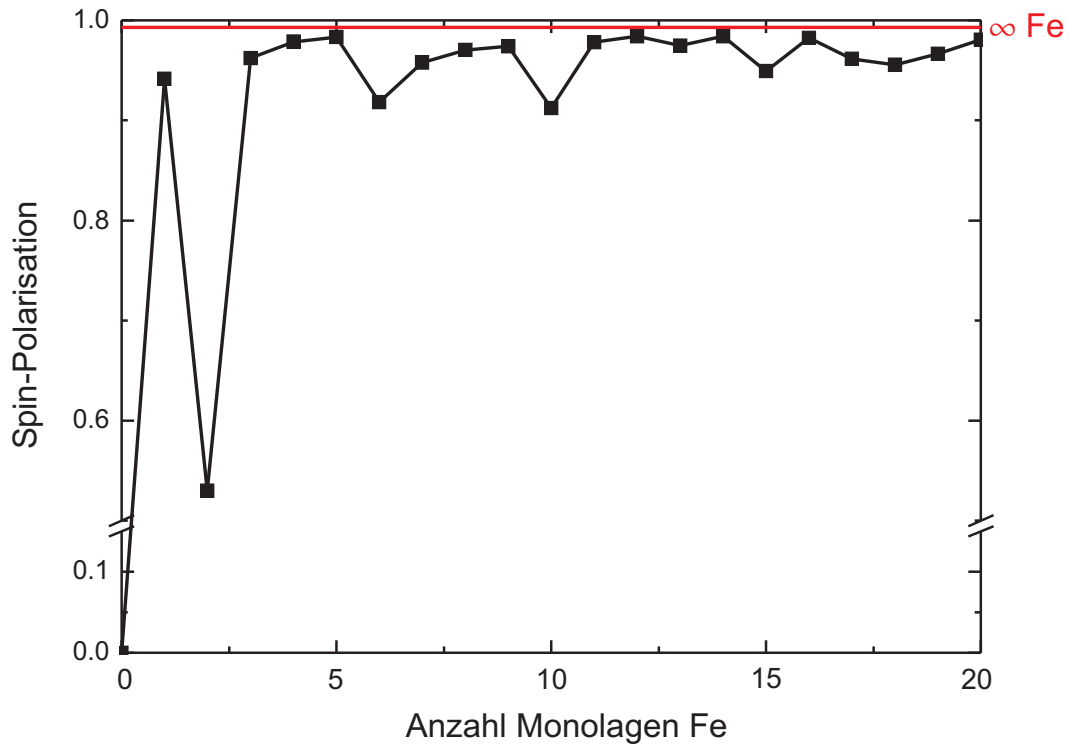


Abbildung 3.30: Polarisation der Leitwertdichte in Abhängigkeit der Anzahl kristalliner Fe-Monolagen für die P-Anordnung. Die Polarisation mit halbenendlichen Fe-Zuleitungen ist als horizontale Linie gekennzeichnet [E8].

Dicken 0, weil beide Spinkanäle für verschwindende Spannung entartet sind, da der Tunnelkontakt symmetrisch ist. Die Polarisation in der P-Anordnung ist bereits mit einer Monolage Fe sehr hoch, verringert sich für zwei Monolagen und ist für größere Dicken immer über 90%. Sogar für zwei Monolagen Fe ist die Polarisation mit über 70% noch sehr hoch. Aus dieser Betrachtung folgt, daß der Strom der Majoritätselektronen I^{\uparrow} der dominierende Anteil ist und nahezu den gesamten Strom ausmacht. Aus diesem Grund ist für eine tiefere Analyse nur die Betrachtung des Majoritätskanals notwendig.

Die \mathbf{k}_{\parallel} -aufgelösten Transmissionswahrscheinlichkeiten des Majoritätskanals sind in Abbildung 3.31 gezeigt. Alle Verteilungen sind sich sehr ähnlich mit einer gaußartigen Glockenkurve um den Γ -Punkt. Die Oszillation der Leitwertdichte aus Abbildung 3.29 ist durch die Schwankung der Farbskala wiedergegeben. Um die Analyse dieser Oszillation weiter zu vertiefen, zeigt die Abbildung 3.32 links die Anpassung der Transmissionwahrscheinlichkeit des Majoritätskanals am Γ -Punkt an eine Sinus-Funktion. Die sich daraus ergebende Periode beträgt $1,95\Delta z$ mit Δz als Monolagenabstand. Auf der rechten Seite der Abbildung 3.32 ist die Majoritäts- und Minoritätsbandstruktur von Fe entlang der (001)-Richtung dargestellt. Für die Majoritätselektronen schneidet die Fermienergie das freie Elektronen ähnliche, parabelförmige Δ_1 -Band. Der zu dem Schnittpunkt gehörende Vektor in Stromrichtung ist $k_{\perp} = \pi/(1,9\Delta z)$. Unter Berücksichtigung, daß sich die Transmissionswahrscheinlichkeit einer Tunnelbarriere proportional zu $\sin^2(k_{\perp}z)$ (siehe Gleichung (3.1)) verhält, ergibt sich daraus eine Periode von $1,9\Delta z$, die in sehr guter Übereinstimmung mit der aus Abbildung 3.32 links abgeschätzten ist.

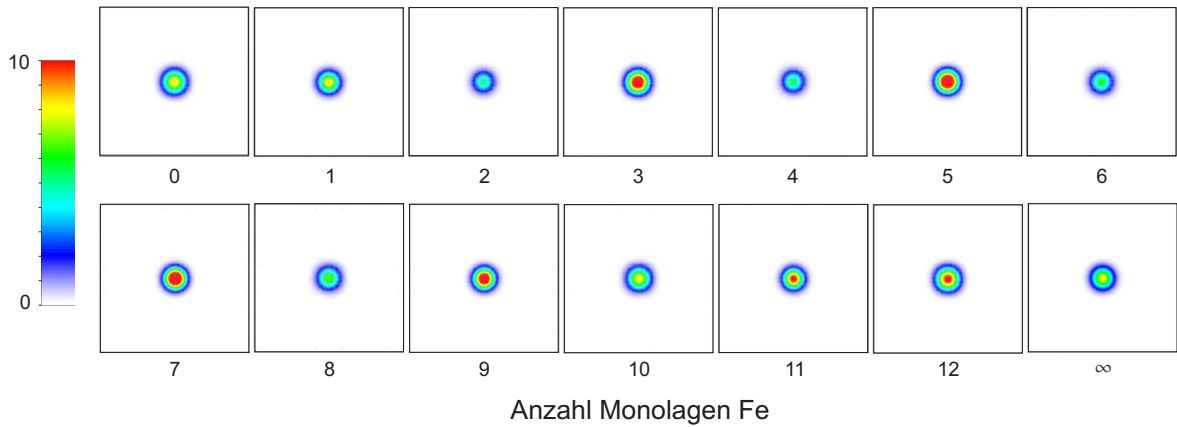


Abbildung 3.31: k_{\parallel} -aufgelöste Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Fe-Monolagen für den Majoritätskanal in der P-Anordnung.

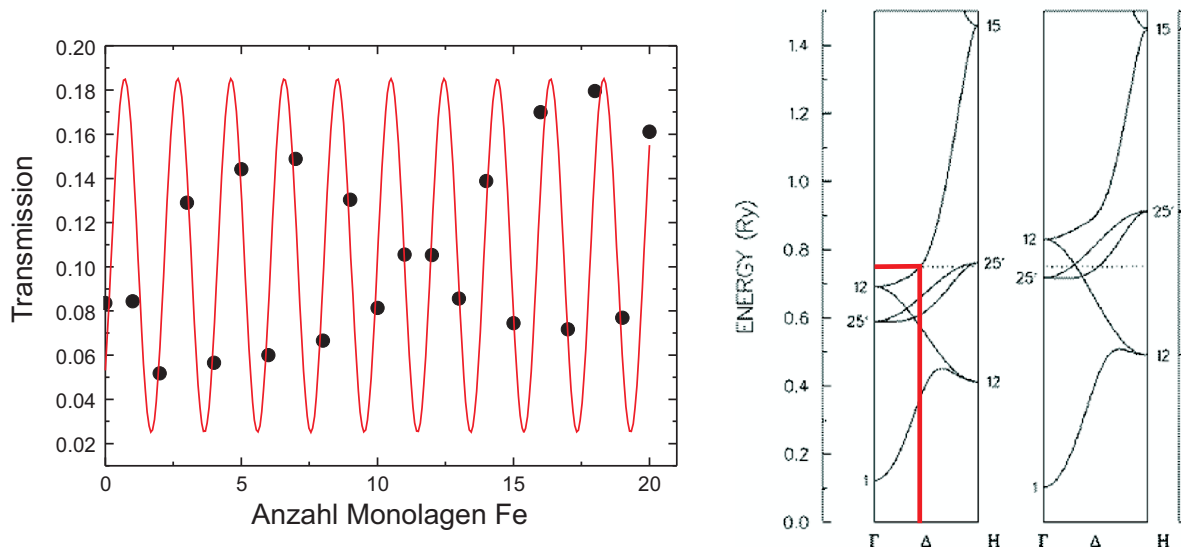


Abbildung 3.32: Links: Transmissionswahrscheinlichkeit am Γ -Punkt in Abhängigkeit der Anzahl kristalliner Fe-Monolagen für die P-Anordnung. Zusätzlich ist ein an diese Werte angepaßte Sinusfunktion eingezeichnet. Rechts: Bandstruktur von Fe entlang ΓH für die Majoritäts- und Minoritätselektronen. Für Erstere ist die Schnittlinie des Δ_1 -Bandes mit der Fermienergie eingezeichnet [112].

Zusammenfassend ist zu bemerken, daß die beobachteten Oszillationen des Leitwerts und des TMR-Verhältnisses direkt auf die Bandstruktur zurückgeführt werden können. Durch analoges Vorgehen kann auch die Oszillation im AP-Fall erklärt werden. Weiterhin sind die Größenordnungen der Leitwerte unabhängig von der Dicke der Fe-Schicht.

3.4.4 TMR-Verhältnis in Abhängigkeit der Fe-Dicke

Die zu den Leitwertdichten aus Abbildung 3.29 gehörenden TMR-Verhältnisse sind in der Abbildung 3.33 dargestellt. Ein sehr hohes TMR-Verhältnis nahe dem Wert mit halbusendlichen Fe-Zuleitungen ist bereits mit einer Monolage Fe zu beobachten. Nach einer Reduktion für zwei Monolagen Fe ist das TMR-Verhältnis für die dickeren Fe-Schichten sehr hoch und teilweise über dem Wert mit halbusendlichem Fe. Die Oszillation des TMR-Verhältnisses hat die gleiche Periode wie die Oszillation der Leitwertdichte im AP-Fall. Die Reduktion für zwei Monolagen Fe ist allerdings nur gering, da das zugehörige TMR-Verhältnis in der optimistischen Definition noch immer mehr als 540% beträgt. Damit ist bereits eine kristalline Monolage Fe ausreichend, um ein hohes TMR-Verhältnis zu erreichen. Die Richtigkeit der Annahme der im Abschnitt 3.4.2 entwickelten effektiven Barrieren (siehe Abbildung 3.27) läßt sich durch eine Analyse der \mathbf{k}_{\parallel} -aufgelösten Transmissionswahrscheinlichkeit, dargestellt in Abbildung 3.34, bestätigen. Die Verteilung ohne Fe-Monolage entspricht der Verteilung im P-Fall aus Abbildung 3.31, nur daß unterschiedliche Skalierungen verwendet werden. Die Verteilung innerhalb der ersten Brillouinzone ändert sich für die AP-Konfiguration sehr stark. So tragen für geringe Fe-Schichtdicken relativ viele Zustände gruppiert um den Γ -Punkt

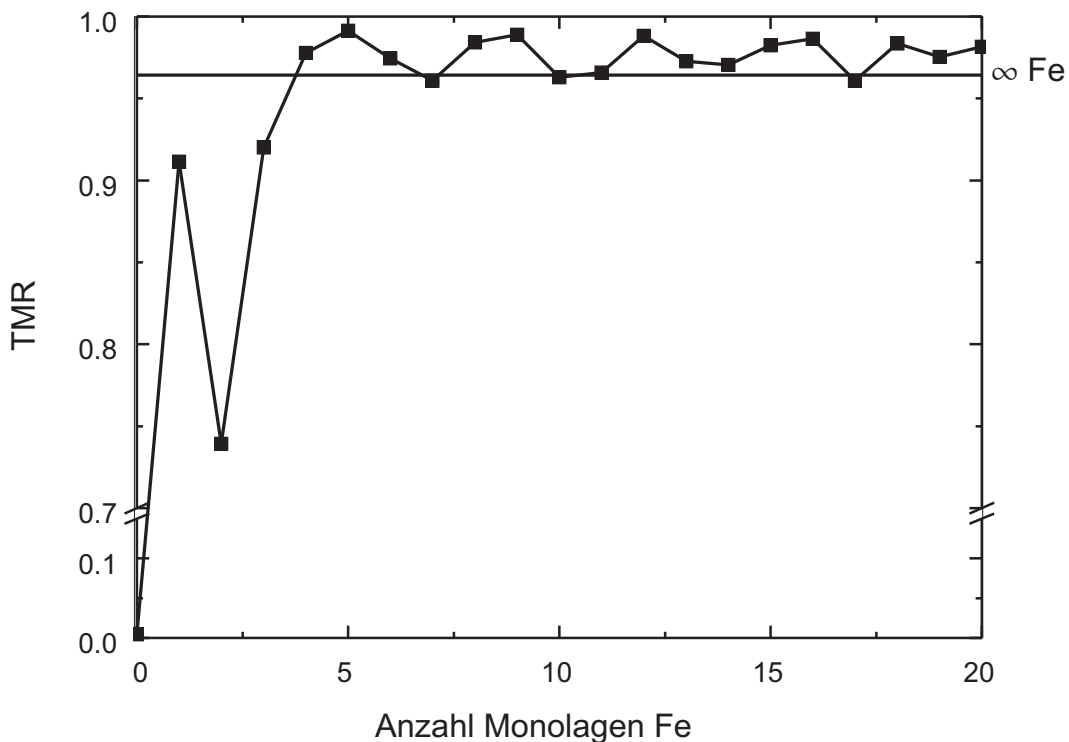


Abbildung 3.33: TMR-Verhältnis in Abhängigkeit der Anzahl kristalliner Fe-Monolagen. Das TMR-Verhältnis mit halbusendlichen Fe-Zuleitungen ist als horizontale Linien gekennzeichnet [E7].

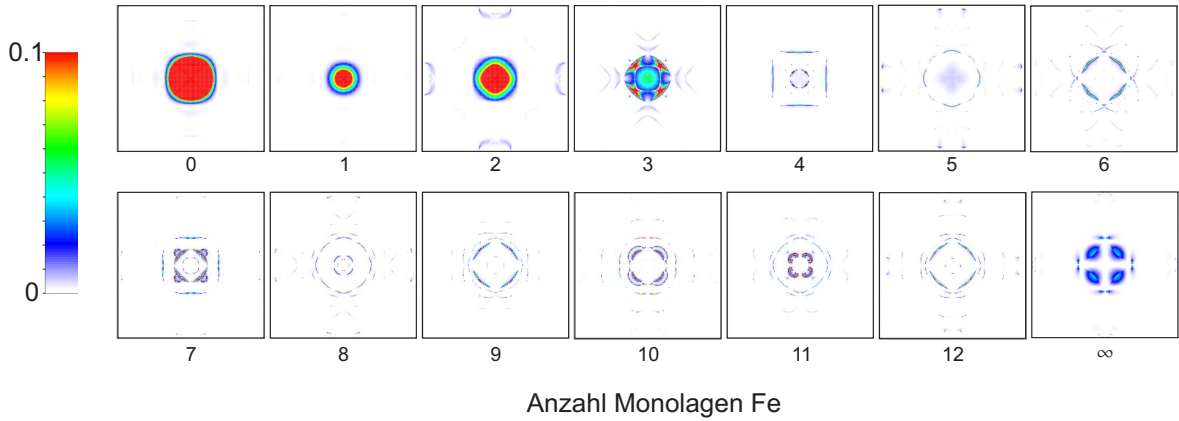


Abbildung 3.34: $k_{||}$ -aufgelöste Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Anzahl kristalliner Fe-Monolagen für die AP-Anordnung.

bei, während ab einer Dicke von 6 Monolagen Fe die Zustände am Γ -Punkt nicht mehr signifikant zum Transport beitragen. Es sind nur noch relativ wenige Zustände entfernt vom Zentrum, die den Strom dominieren. Die Transmissionswahrscheinlichkeit für die dünnen Schichten ähnelt stark denen im P-Fall mit seiner gaußartigen Verteilung. Allerdings nimmt der Absolutwert sehr stark ab. Um diese Abnahme detaillierter zu untersuchen, zeigt die Abbildung 3.35 die Transmissionswahrscheinlichkeit am Γ -Punkt in Abhängigkeit der Fe-Schichtdicke. Wie erwartet, ist ein exponentieller Abfall zu beobachten, der auch die starke Abnahme der Leitwertdichte begründet und dadurch hervorgerufen wird, daß ein Großteil der durch die Zuleitung angebotenen Δ_1 -artigen Zustände durch die kristalline Fe-Schicht im Brillouinzonezentrum tunneln. Die ebenfalls eingezeichnete Anpassung liefert einen exponentiellen Abfall von $0,92\text{\AA}^{-1}$. Ein Blick auf die komplexe Bandstruktur des Minoritätspins in Abbildung 3.26 liefert die Erklärung für den Abfall. Wie bereits diskutiert, hat Fe bei der Fermienergie kein Band mit Δ_1 -Symmetrie für die Minoritätselektronen am Γ -Punkt. Dadurch finden die Δ_1 -artigen Zustände um den Γ -Punkt, die vom Reservoir in beiden Spinkanälen geliefert werden, keine Anknüpfungspunkte an den Minoritätskanal im Fe und müssen durch diesen tunneln. Das bedeutet, daß das Fe im Minoritätskanal eine zum MgO zusätzliche Barriere für die Δ_1 -artigen Zustände um den Γ -Punkt darstellt. Analog zur Diskussion der komplexen Bandstruktur in MgO (siehe Abschnitt 3.1.2) kann der exponentielle Abfall, den diese Zustände erfahren, aus dem Imaginärteil des komplexen Wellenvektors des Δ_1 -Bands im Fe abgeschätzt werden. Dieser bestimmt sich zu $0,5\text{\AA}^{-1}$. Da nach Gleichung (3.1) der exponentielle Abfall der Transmissionswahrscheinlichkeit gerade dem Doppelten des Imaginärteils des komplexen Wellenvektors entspricht, handelt es sich um eine relativ gute Übereinstimmung in Anbetracht dessen, daß die Berechnung der Transportgrößen und die der komplexen Bandstruktur mit zwei unterschiedlichen Programmen erfolgte. Ein weiterer Punkt ist die relativ große Schwankung der Transmissionswahrscheinlichkeit um die exponentielle Anpassung in Abbildung 3.35. Für den Minoritätskanal im P-Fall läßt sich eine analoge Analyse der Transmissionswahrscheinlichkeit am Γ -Punkt vornehmen. Da hier der Minoritätsspin auf beiden Seiten des Tunnelkontakts auftritt, ist der exponentielle Abfall doppelt so hoch, wie für die Kanäle in der AP-Konfiguration.

Zusammengefaßt ist das TMR-Verhältnis bereits mit einer Monolage kristallinem Fe an der Barriere sehr groß. Der Grund hierfür liegt in einer effektiv dickeren Bar-

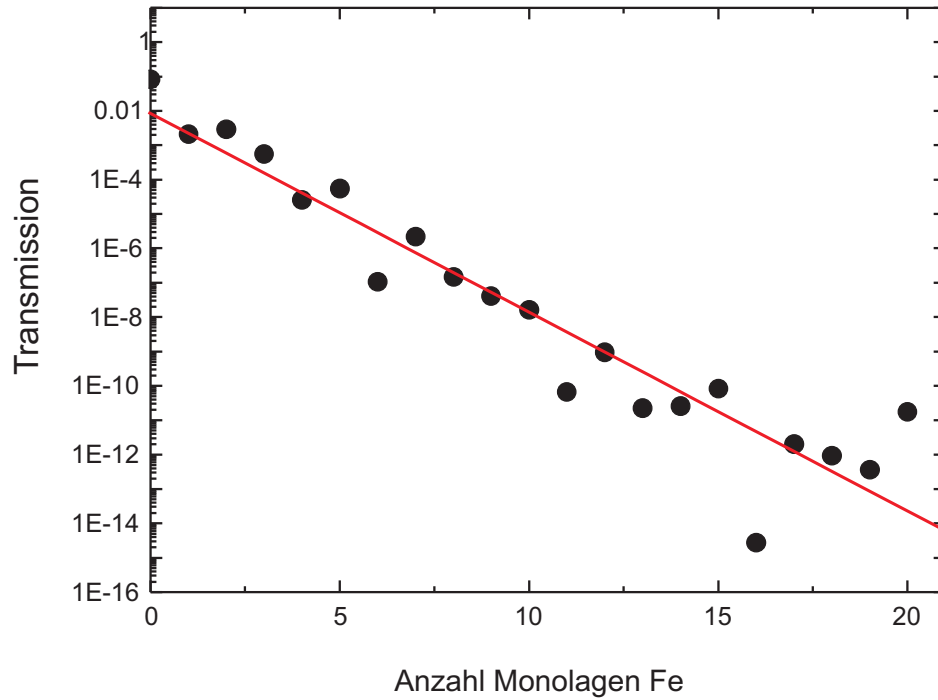


Abbildung 3.35: Transmissionswahrscheinlichkeit am Γ -Punkt in Abhängigkeit der Anzahl kristalliner Fe-Monolagen für die AP-Anordnung. Zusätzlich ist ein an diese Werte angepaßter exponentieller Abfall eingezeichnet [E7].

riere für die Spinkanäle, die den Minoritätsspin beinhalten, wie in dem einfachen Bild der effektiven Barrieren in Abbildung 3.27 gezeigt ist. Die Struktur der Zuleitungen ist für den Transport sekundär, solange diese freie-Elektronen-artige Zustände anbieten. Durch gezielte Ausnutzung von Details der Bandstruktur können allerdings die Transportgrößen beeinflusst werden, wie es experimentell gezeigt worden ist [84]. Entscheidend für die ferromagnetische Schicht ist, daß es Zustände gibt, die an das Band mit dem kleinsten Imaginärteil der Barriere ankoppeln können, was bezogen auf den gesamten \mathbf{k}_{\parallel} -Raum immer gegeben ist. Voraussetzung, um ein hohes TMR-Verhältnis zu erhalten, ist, daß diese Zustände in den einzelnen Spinkanälen des Ferromagneten unterschiedliche Anteile haben und unterschiedlich innerhalb des \mathbf{k}_{\parallel} -Raums verteilt sind, um durch Symmetrieselektion der Barriere eine Spinselektion des Stromes zu erzielen.

Kapitel 4

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden mittels *ab initio* Berechnungen die wichtigsten Aspekte eines magnetischen Tunnelkontakts untersucht. Die drei Bereiche eines Tunnelkontaktes, die Barriere, die Zuleitungen und die Grenzflächen, die die Transporteigenschaften beeinflussen können, wurden detailliert am Beispiel des technologisch interessanten Systems Fe/MgO/Fe diskutiert. Damit ist es möglich, sowohl die physikalisch stattfindenden Prozesse als auch die unterschiedlichen experimentellen Befunde aus mikroskopischer Sicht zu verstehen. Die Ergebnisse liefern Vorhersagen für zukünftige Untersuchungen und Aussagen für die Optimierung der Tunnelkontakte.

Die Barriere bestimmt, welche Zustände überhaupt zum Transport beitragen können. Insbesondere sind dies nur diejenigen, die an das komplexe Band mit dem kleinsten Imaginärteil in der Bandlücke der Barriere ankoppeln. Aus diesem Grund muß die ferromagnetische Schicht dafür Sorge tragen, daß diese Zustände in beiden Spinkanälen unterschiedlich starke Anteile haben beziehungsweise diese sich in anderen Bereichen der Brillouinzone befinden. Dies wäre ausreichend, da die Dämpfung, die die tunnelnden Zustände erfahren, abhängig von der Position innerhalb der Brillouinzone ist. Die Abklingraten sind dabei durch den Imaginärteil des komplexen Bands mit dem kleinsten Imaginärteil bestimmt. Eine Oszillation des TMR-Verhältnisses, hervorgerufen durch den zugehörigen Realteil des komplexen Bands, kann für MgO nicht erwartet werden. Damit müssen die experimentell beobachteten Oszillationen andere Ursachen haben und sind kein intrinsischer Effekt resultierend aus der Barrierendicke.

Die Zuleitungen eines Tunnelkontaktes haben vor allem die Aufgabe als Reservoir zu dienen. Betrachtet man die Zuleitungen entfernt von der Barriere, so muß die Zuleitung nur Zustände anbieten idealerweise breit verteilt im \mathbf{k}_{\parallel} -Raum, wie dies zum Beispiel durch quasi freie Elektronen gegeben ist. Ist dies der Fall, dann spielen die Zuleitungen ob magnetisch oder nichtmagnetisch, ob kristallin oder amorph nur eine sekundäre Rolle für den Transport. Natürlich ist es unter bestimmten Umständen möglich, durch Ausnutzung der Details der Elektronenstruktur die Transportgrößen zu beeinflussen. Allerdings ist dies praktisch nicht erwünscht, sondern die Kontrolle des Transports geschieht zwischen den ferromagnetischen Elektroden und der Barriere. Dabei genügt bereits eine kristalline Monolage Fe direkt an der Barriere, um ein sehr hohes TMR-Verhältnis zu erhalten. Die Struktur der Lagen angrenzend an diese Fe-Monolage ist unerheblich, solange diese die gestellten Forderungen an ein Reservoir erfüllen. Der Grund für das hohe TMR-Verhältnis bei sehr dünnen Fe-Schichten sind effektiv unterschiedliche Barrieren für den Majoritäts- und Minoritätsspin für die Zustände, die durch die Barriere aufgrund ihrer Symmetrie selektiert werden. Dabei

wird die unterschiedliche effektive Barriere durch die dünne Fe-Schicht hervorgerufen.

Die Grenzflächen zwischen den Zuleitungen und der Barriere haben die größte Bedeutung für den Transport. Es konnte gezeigt werden, daß eine unterschiedliche Grenzflächenstruktur völlig verschiedene Transporteigenschaften hervorrufen kann. Im speziellen wurden für drei betrachtete Grenzflächenstrukturen verschiedene Stromdichte-Spannungs-Kennlinien und dadurch auch TMR-Spannungs-Kennlinien erhalten. Die Grenzflächenstrukturen unterscheiden sich dabei, ob FeO an der Grenzfläche vorhanden ist oder nicht. Für den Fall ohne FeO (ideal) ist das TMR-Verhältnis nahezu konstant. Für die symmetrische Struktur mit FeO an beiden Grenzflächen sinkt das TMR-Verhältnis mit steigender Spannung, wechselt das Vorzeichen und bleibt negativ für größere Spannungen. Bei der asymmetrischen Struktur mit FeO nur an einer Grenzfläche ist das TMR-Verhältnis immer negativ. Eine Kombination der erhaltenen Kennlinien in einem einfachen Strukturmodell ermöglicht die Analyse von nicht vollständig oxidierten Grenzflächen. Damit lassen sich unterschiedliche experimentelle Befunde erklären. Eine weitere Folgerung ist, daß die Spannungsabhängigkeit des TMR-Verhältnisses durch die Grenzflächenstruktur im Prinzip auf einen gewünschten Verlauf eingestellt werden kann. Dadurch ist die zentrale Bedeutung der Grenzflächenstruktur noch einmal herausgehoben, da die unterschiedlichen Kennlinien bei gleicher Barriere und gleichen Zuleitungen gewonnen wurden.

Charakteristika in den Stromdichte-Spannungs-Kennlinien können in diesem Zusammenhang mit der lokalen $k_{||}$ -aufgelösten Zustandsdichte an der Grenzfläche in Verbindung gebracht werden. Da jedoch nur sehr wenige Zustände tatsächlich zum Transport beitragen, ist die Einbeziehung der Matrixelemente, die die Anschlußbedingungen beinhalten, essentiell. Die alleinige Verwendung der lokalen Zustandsdichte für die Interpretation von Stromdichte-Spannungs-Kennlinien ist unzureichend. Spezielle Signaturen in der Strom-Spannungs-Kennlinie sind somit Indizien für kohärentes Tunneln. Die Betrachtung der Barrierendickenabhängigkeit in der vorliegenden Arbeit ergab, daß solche Indizien in den Strom-Spannungs-Kennlinien auch bei dicken Barrieren experimentell beobachtbar sind. Voraussetzung hierfür sind qualitativ hochwertige Barrieren.

Die Bedeutung der Beschreibung mittels *ab initio* Rechnungen wurde mittels einer Diskussion und eines Vergleiches zum Julliere-Modell unterstützt. Dabei ist das Julliere-Modell, in dem jegliche Phaseninformation vernachlässigt wird, für Tunnelkontakte mit amorphen Barrieren adäquat, versagt aber für epitaktische kristalline Kontakte. Die Ursache liegt in den unterschiedlichen Grenzfällen des Elektronentransports begründet. Für den Tunnelkontakt mit amorphen Barrieren kann der Transport im diffusen Grenzfall beschrieben werden, während der Transport für kristalline Barrieren dem kohärenten Grenzfall entspricht. Für die Beschreibung des kohärenten Tunnelns ist eine *ab initio* Beschreibung die Methode der Wahl.

Kapitel 5

Anhang

In diesem Kapitel sollen die für die in der vorliegenden Arbeit vorgestellten Ergebnisse notwendigen Konvergenztests dargestellt werden. In den folgenden Abschnitten werden die erforderlichen Parameter für die Berechnung der Transportgrößen im verwendeten KKR-Programm diskutiert.

5.1 Clustergröße des Referenzsystems

Wie im Abschnitt 2.1.5.3 erläutert, wird die Dyson-Gleichung zur Bestimmung der Greenschen Funktion des gesuchten Systems in zwei Stufen gelöst. Zum einen wird die Greensche Funktion für ein System mit repulsivem Potential aus der Greenschen Funktion freier Elektronen mittels Lösung der Dyson-Gleichung im Ortsraum erhalten. Diese abgeschirmten Strukturkonstanten werden durch Fouriertransformation in den \mathbf{k} -Raum überführt und als Referenzsystem für die Dyson-Gleichung zur Lösung der gesuchten Greenschen Funktion verwendet. Als repulsives Potential wurden in den Rechnungen muffin-tin-Kugeln an den Atomplätzen mit einem Potential von $4 Ry$ verwendet. Die Bestimmung der abgeschirmten Strukturkonstanten im Ortsraum wird auf Clustern durchgeführt. Die Größe des notwendigen Clusters hängt von mehreren Faktoren ab. Für die Berechnung der selbstkonsistenten Potentiale genügen relativ geringe Clustergrößen vor allem aufgrund des dabei verwendeten relativ großen Imaginärteils der Greenschen Funktion. Im Rahmen dieser Arbeit wurde auf eine Diskussion dieses Imaginärteils verzichtet, ist aber als Parameter für die Konvergenztests notwendig. Dieser Imaginärteil der Energie in der Greenschen Funktion kann über die Boltzmannkonstante k_B formal in eine Temperatur T umgerechnet werden. Vor allem im folgenden Abschnitt wird dieser Temperaturbegriff verwendet, wobei es sich nicht um eine tatsächliche Temperatur handelt.

Die Temperatur bewirkt eine Verbreiterung der Zustände. So werden aus den Singularitäten bei den Eigenenergien in Gleichung (2.27) Lorentzverteilungen, die mit steigender Temperatur immer breiter werden. Für die selbstkonsistenten Berechnungen wurden Imaginärteile verwendet, die einer Temperatur bis zu $4000 K$ entsprechen. Dadurch sind bereits kleine Cluster mit 15 oder 27 Atomen im Fe ausreichend. Sollen andere Eigenschaften des Systems betrachtet werden, darf der Imaginärteil der Energie nicht so groß gewählt werden und ein entsprechend größerer Cluster ist notwendig.

Je kleiner der Imaginärteil der Energie, desto genauer ist die Berechnung der elektronischen Transportgrößen. Allerdings erhöht sich entsprechend der numerische Aufwand und ein günstiger Kompromiss muß gefunden werden. Bevor die Rolle der Tem-

Cluster	g^\uparrow	g^\downarrow
15	1.357E-03	1.658E-02
27	1.186E-02	2.420E-03
59	1.164E-02	1.470E-02
89	1.126E-02	2.564E-03
113	1.124E-02	2.673E-03
137	1.125E-02	3.114E-03
169	1.123E-02	3.103E-03
181	1.123E-02	3.092E-03
229	1.123E-02	3.093E-03
259	1.123E-02	3.084E-03

Tabelle 5.1: Leitwertdichte für Majoritäts- und Minoritätskanal des idealen Tunnelkontakts in P-Anordnung in Abhängigkeit der Clustergöße um die Fe-Atome bei $T = 0.2K$ und 5151 k-Punkten im irreduziblen Teil der Brillouinzone.

peratur und des k-Netzes im folgenden Abschnitt näher betrachtet wird, wird in diesem Abschnitt die notwendige Größe des Clusters bei einem sehr geringen Imaginärteil der Energie, einer Temperatur von $0.2 K$ entsprechend, untersucht. Als k-Netz werden 5151 k-Punkte im irreduziblen Teil der Brillouinzone ($1/8$ der gesamten Zone) verwendet.

In der Tabelle 5.1 sind die berechneten Leitwertdichten für den Majoritäts- und Minoritätskanal des idealen Tunnelkontakts in der P-Anordnung in Abhängigkeit der Größe der Cluster um die Fe-Atome aufgelistet. Dabei wird deutlich, daß ein Cluster von mindestens 137 Atomen notwendig ist, da für diesen Fall der Minoritätskanal konvergiert ist. Für den Majoritätskanal ist bereits ein Cluster mit 89 Atomen ausreichend, wie in Abbildung 5.1 ebenfalls an der \mathbf{k}_\parallel -aufgelösten Transmissionswahrscheinlichkeit

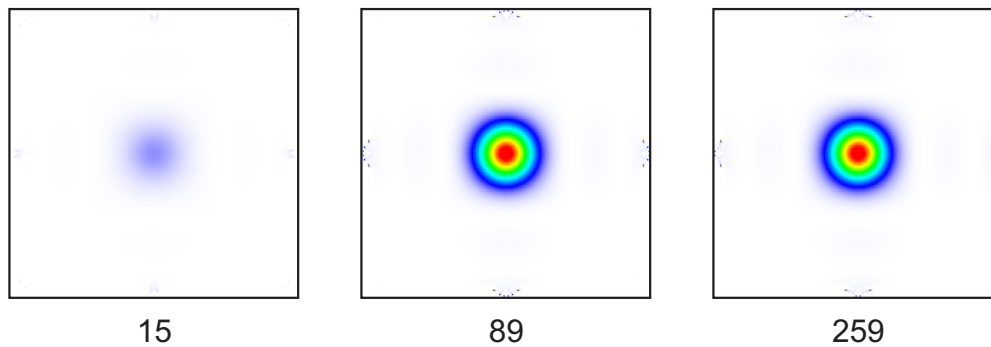


Abbildung 5.1: \mathbf{k}_\parallel -aufgelöste Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Clustergöße für den Majoritätskanal des Tunnelkontakts mit idealer Grenzflächenstruktur.

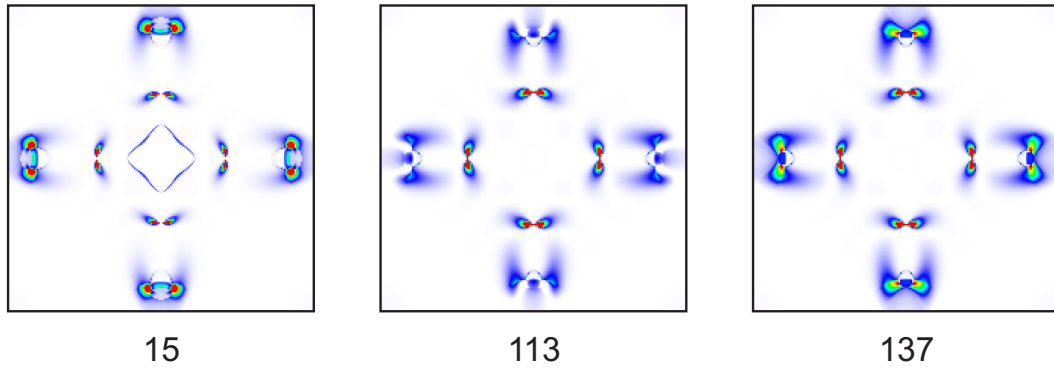


Abbildung 5.2: $k_{||}$ -aufgelöste Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Clustergröße für den Minoritätskanal des Tunnelkontakts mit idealer Grenzflächenstruktur.

erkennbar ist. In Abbildung 5.2 sind die Änderungen der $k_{||}$ -aufgelösten Transmissionswahrscheinlichkeit für kleine Clustergrößen im Minoritätskanal illustriert.

Aus den dargestellten Konvergenztests wurde sich in der vorliegenden Arbeit für eine Clustergröße von 169 Atomen in den Fe-Clustern für die Berechnungen der elektronischen Transportgrößen entschieden.

Neben der Clustergröße ist ebenfalls die Größe des verwendeten effektiven Lagen (principal layer) wichtig. Diese bestimmt, in Blöcke welcher Größe die zu invertierende Matrix für die Dezimationstechnik zerlegt wird, um eine Bandmatrix zu erhalten. Im Prinzip ist die notwendige Dicke der effektiven Lagen mit der Clustergröße gekoppelt. Allerdings kann eine getrennte Betrachtung zu einer Optimierung führen. Für diese Aufgabe sind in Abbildung 5.3 die $k_{||}$ -aufgelösten Transmissionswahrscheinlichkeiten für beide Spinkanäle in Abhängigkeit der effektiven Lagendicke für eine Clustergröße von 169 Atomen um die Fe-Atome dargestellt. Für eine effektive Lagendicke von 2 ist faktisch kein Transport zu beobachten. Dies liegt vor allem daran, daß bei einem principal layer von 2 die MgO-Lagen aufgrund der zusätzlichen leeren Kugeln nicht miteinander koppeln. Deutlich wird jedoch, daß ein principal layer von 6 ausreichend

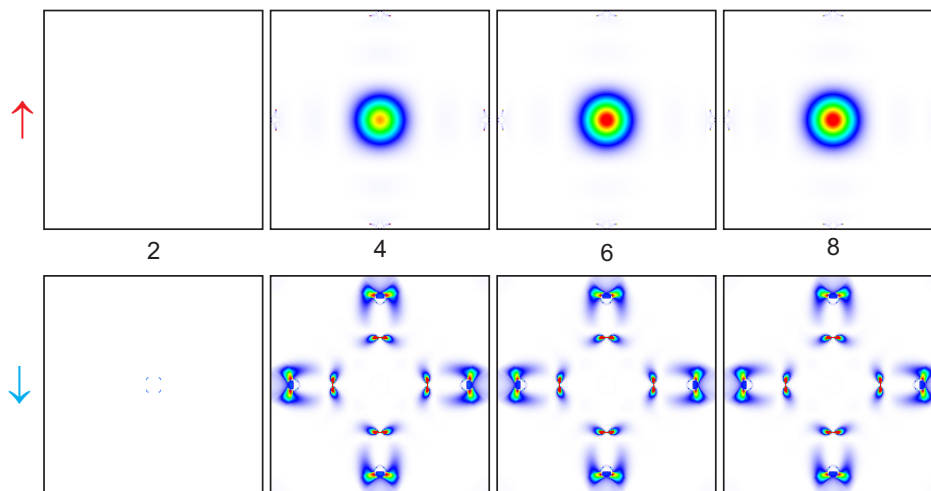


Abbildung 5.3: $k_{||}$ -aufgelöste Transmissionswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der effektiven Lagendicke (principal layer) für den Tunnelkontakt mit idealer Grenzflächenstruktur.

Principial layer	g^\uparrow	g^\downarrow
2	1.959E-06	3.144E-06
4	9.388E-03	2.548E-03
6	1.123E-02	3.103E-03
8	1.130E-02	3.183E-03

Tabelle 5.2: Leitwertdichte für Majoritäts- und Minoritätskanal des idealen Tunnelkontakts in P-Anordnung in Abhängigkeit der effektiven Lagendicke (principial layer).

ist, um die notwendigen Beiträge zum Strom zu erfassen. Dieses Verhalten ist in der Tabelle 5.2 für die integrierten Werte wiedergegeben.

5.2 Größe des k-Netzes

Für die eben bestimmte Clustergröße von 169 Atomen um die Fe-Atome und einem principial layer von 6 wurden die in der Tabelle 5.3 zusammengefaßten Konvergenztests für verschiedene Imaginärteile der Energie (Temperatur) und k-Netze durchgeführt. Dabei wird deutlich, daß mit steigender Temperatur ein geringeres k-Netz ausreichend ist. Allerdings ist dieser Unterschied nicht gravierend. Da mit sinkender Temperatur aber die Transportgrößen im Prinzip genauer sind, wurde in der vorliegenden Arbeit ein Imaginärteil der Energie entsprechend $0.2 K$ und ein k-Netz mit 5151 k-Punkten im irreduziblen Teil der Brillouinzone verwendet. Mit steigender Temperatur wird der zugehörige Leitwert größer, da der Imaginärteil der Energie in der Greenschen Funktion größer wird. Dies kann als eine Dämpfung der Zustände interpretiert werden, was in der Transportformel zu einem Abfall der Leitwerte mit steigendem Abstand zwischen den Ebenen, die zur Berechnung der Leitwerte verwendet werden, führt. Die Stärke dieses Abfalls nimmt mit der Temperatur entsprechend zu.

Eine noch geringere Temperatur wurde in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt, da zum einen bereits erkennbar ist, daß der Unterschied in den Absolutwerten zwischen $2K$ und $0.2K$ relativ gering ist und zum anderen eine niedrigere Temperatur neben einem dichteren k-Netz auch einen größeren Cluster erfordern würde. Der daraus resultierende deutlich höhere Rechenzeitaufwand wäre nicht sinnvoll.

T	k	g^\uparrow	g^\downarrow
0.2 K	21	1.611	4.716E-3
	452	1.337	1.355E-2
	1326	1.282	2.828E-2
	2145	1.283	2.571E-2
	5151	1.277	2.944E-2
	20301	1.274	2.871E-2
	125751	1.2717	2.793E-2
2.0 K	21	1.396	4.560E-3
	452	1.140	9.936E-3
	1326	1.056	1.720E-2
	2145	1.059	1.787E-2
	5151	1.058	1.870E-2
	20301	1.057	1.801E-2
	125751	1.054	1.770E-2
20.0 K	21	0.377	3.526E-3
	452	0.306	4.648E-3
	1326	0.283	5.722E-3
	2145	0.283	5.745E-3
	5151	0.283	5.747E-3
	20301	0.283	5.721E-3
	125751	0.282	5.700E-3

Tabelle 5.3: Leitwertdichte für Majoritäts- und Minoritätskanal des idealen Tunnelkontakts in P-Anordnung in Abhängigkeit der Temperatur T und der Anzahl der k-Punkte im irreduziblen Teil der Brillouinzone.

5.3 Volumenintegration zur Berechnung des Leitwerts

In der Arbeit von Mavropoulos *et al.* [94] wurde gezeigt, daß anstatt einer Ebenenintegration zur Auswertung der Formel von Baranger und Stone (2.113) eine Integration über das Volumen der ASA-Kugeln günstiger ist. Dabei ist allerdings die Frage nach der Anzahl der Atome, die die linke beziehungsweise rechte Seite repräsentieren, die zur Bestimmung der Leitwertdichte verwendet werden, zu untersuchen. Die Tabelle 5.4 zeigt die Leitwertdichte in Abhängigkeit der Anzahl der atomaren Ebenenpaare. Aus der Tabelle wird ersichtlich, daß bereits eine relativ geringe Anzahl an Ebenenpaaren genügt, um eine Konvergenz zu erreichen. In den in der vorliegenden Arbeit präsentierten Untersuchungen wurden 16 Ebenenpaare verwendet.

Ebenenpaare	g^\uparrow	g^\downarrow
1	1.123E-2	2.940E-3
4	1.224E-2	2.961E-3
16	1.123E-2	3.103E-3
36	1.124E-2	2.972E-3
64	1.124E-2	2.924E-3

Tabelle 5.4: Leitwertdichte für Majoritäts- und Minoritätskanal des idealen Tunnelkontakts in P-Anordnung in Abhängigkeit der Ebenenpaare bei $T = 0.2K$ und einer Clustergröße von 169 um die Fe-Atome.

Literaturverzeichnis

- [1] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, D. M. Treger. *Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future*. Science **294**, 1488 (2001).
- [2] S. Datta, B. Das. *Electronic analog of the electro-optic modulator*. Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [3] D. A. Allwood, G. Xiong, C. C. Faulkner, D. Atkinson, D. Petit, R. P. Cowburn. *Magnetic Domain-Wall Logic*. Science **309**, 1688 (2005).
- [4] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky, H. Sowers. *Layered Magnetic Structures: Evidence for Antiferromagnetic Coupling of Fe Layers across Cr Interlayers*. Phys. Rev. Lett. **57**, 2442 (1986).
- [5] M. Baibich, J. Broto, A. Fert, F. N. V. Dau, F. Petro, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, J. Chazelas. *Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices*. Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).
- [6] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, W. Zinn. *Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange*. Phys. Rev. B **39**, 4828 (1989).
- [7] M. Julliere. *Tunneling between ferromagnetic-films*. Phys. Lett. **54A**, 225 (1975).
- [8] J.S. Moodera, Lisa R. Kinder, Terrilyn M. Wong, R. Meservey. *Large Magnetoresistance at Room Temperature in Ferromagnetic Thin Film Tunnel Junctions*. Phys. Rev. Lett. **74**, 3273 (1995).
- [9] T. Miyazaki, N. Tezuka. *Giant magnetic tunneling effect in Fe/Al₂O₃/Fe junction*. J. Magn. Mater. **139**, L231 (1995).
- [10] <http://www.hitachigst.com/hdd/technolo/overview/chart02.html>.
- [11] http://www.samsung.com/Products/HardDiskDrive/news/HardDiskDrive-20050801_0000197917.htm.
- [12] S. A. Wolf, A. Y. Chtchelkanova, D. M. Treger. *Spintronics - A retrospective and perspective*. IBM J. RES. & DEV. **50** (No . 1), 101 (2006).
- [13] J. Åkerman. *Toward a Universal Memory*. Science **308**, 508 (2005).

- [14] **J. Barnaś, A. Fuss, R. E. Camley, P. Grünberg, W. Zinn.** *Novel magnetoresistance effect in layered magnetic structures: Theory and experiment.* Phys. Rev. B **42**, 8110 (1990).
- [15] **B. Dieny, V. S. Speriosu, S. S. P. Parkin, B. A. Gurney, D.R. Wilhoit, D. Mauri.** *Giant magnetoresistive in soft ferromagnetic multilayers.* Phys. Rev. B **43**, 1297 (1991).
- [16] **S. S. P. Parkin.** *Origin of enhanced magnetoresistance of magnetic multilayers: Spin-dependent scattering from magnetic interface states.* Phys. Rev. Lett. **71**, 1641 (1993).
- [17] **H. J. M. Swagten, G. J. Driekers, M. M. H. Willekens, W. J. M. de Jonge.** *Analysis of scattering lengths in Co/Cu spin-valves using a Ru barrier.* J. Magn. Magn. Mater. **156**, 329 (1996).
- [18] **W. F. Egelhoff, P. J. Chen, C. J. Powell, M. D. Stiles, R.D. McMichael, J. H. Judy, K. Takano, A. E. Berkowitz.** *Oxygen as a surfactant in the growth of giant magnetoresistance spin valves.* J. Appl. Phys. **82**, 6142 (1997).
- [19] **T. Kato, K. Miyashita, S. Iwata, S. Tsunashima, H. Sakakima, Y. Sugita, Y. Kawawake.** *Temperature dependence of giant magneto-resistance in PtMn- and Fe₂O₃-based specular spin valves.* J. Magn. Magn. Mater. **240**, 168 (2002).
- [20] **W. J. Gallagher, S. S. P. Parkin, Yu Lu, X. P. Bian, A. Marley, K. P. Roche, R. A. Altman, S. A. Rishton, C. Jahnes, T. M. Shaw, Gang Xiao.** *Microstructured magnetic tunnel junctions (invited).* J. Appl. Phys. **81**, 3741 (1997).
- [21] **R. C. Sousa, J. J. Sun, V. Soares, P. P. Freitas, A. Kling, M. F. da Silva, J. C. Soares.** *Large tunneling magnetoresistance enhancement by thermal anneal.* Appl. Phys. Lett. **73**, 3288 (1998).
- [22] **S.S.P. Parkin, K.P. Roche, M.G. Samant, P.M. Rice, R.B. Beyers, R.E. Scheuerlein, E.J. O'Sullivan, S.L. Brown, J. Bucchigano, D.W. Abraham, Yu Lu, M. Rooks, P.L. Trouilloud, R.A. Wanner, W.J. Gallagher.** *Exchange-biased magnetic tunnel junctions and application to nonvolatile magnetic random access memory (invited).* J. Appl. Phys. **85**, 5828 (1999).
- [23] **S. Cardose, P. P. Freitas, C. de Jesus, P. Wei, J. C. Soares.** *Spin-tunnel-junction thermal stability and interface interdiffusion above 300 Å° C.* Appl. Phys. Lett. **76**, 610 (2000).
- [24] **X.-F. Han, T. Daibou, M. Kamijo, K. Yaoita, H. Kubota, Y. Ando, T. Miyazaki.** *High-Magnetoresistance Tunnel Junctions Using Co₇₅Fe₂₅ Ferromagnetic Electrodes.* Jap. J. Appl. Phys. **39**, L439 (2000).
- [25] **Y. Lou, M. Esseling, A. Käufler, K. Samwer, T. Dimopoulos, G. Gieres, M. Vieth, M. Rührig, J. Wecker, C. Rudolf, T. Niermann, M. Seibt.** *Co-rich magnetic amorphous films and their application in magnetoelectronics.* Phys. Rev. B **72**, 014 426 (2005).

- [26] L. Yuan, S. H. Liou, Dexin Wang. *Temperature dependence of magnetoresistance in magnetic tunnel junctions with different free layer structures.* Phys. Rev. B **73**, 134403 (2006).
- [27] T. S. Plaskett, P. P. Freitas, N. P. Barradas, M. F. da Silva, J. C. Soares. *Magnetoresistance and magnetic properties of NiFe/oxide/Co junctions prepared by magnetron sputtering.* J. Appl. Phys. **76**, 6104 (1994).
- [28] M. Bowen, V. Cros, F. Petroff, A. Fert, C. Martínez Boubeta, J. L. Costa-Krämer, J. V. Anguita, A. Cebollada, F. Briones, J. M. de Teresa, L. Morellón, M. R. Ibarra, F. Güell, F. Peiró, A. Cornet. *Large magnetoresistance in Fe/MgO/FeCo(001) epitaxial tunnel junctions on GaAs(001).* Appl. Phys. Lett. **79**, 1655 (2001).
- [29] J. Faure-Vincent, C. Tiusan, E. Jouguelet, F. Canet, M. Sajjeddine, C. Bellouard, E. Popova, M. Hehn, F. Montaigne, A. Schuhl. *High tunnel magnetoresistance in epitaxial Fe/MgO/Fe tunnel junctions.* Appl. Phys. Lett. **82**, 4507 (2003).
- [30] S. Yuasa, A. Fukushima, T. Nagahama, K. Ando, Y. Suzuki. *High Tunnel Magnetoresistance at Room Temperature in Fully Epitaxial Fe/MgO/Fe Tunnel Junctions due to Coherent Spin-Polarized Tunneling.* Jpn. J. Appl. Phys. **43**, L588 (2004).
- [31] S.S.P. Parkin, C. Kaiser, A. Panchula, P.M. Rice, B. Hughes, M. Samant, S.-H. Yang. *Giant tunnelling magnetoresistance at room temperature with MgO (100) tunnel barriers.* Nature Materials **3**, 862 (2004).
- [32] D. D. Djayaprawira, K. Tsunekawa, M. Nagai, H. Maehara, S. Yamagata, N. Watanabe, S. Yuasa, Y. Suzuki, K. Ando. *230Magnetic Tunnel Junctions.* Appl. Phys. Lett. **89**, 032505 (2005).
- [33] S. Ikeda, J. Hayakawa, Y. M. Lee, R. Sasaki, T. Meguro, F. Matsukura, H. Ohno. *Dependence of Tunnel Magnetoresistance in MgO Based Magnetic Tunnel Junctions on Ar Pressure during MgO Sputtering.* Jpn. J. Appl. Phys. **44**, L1442 (2005).
- [34] S. Yuasa, A. Fukushima, H. Kubota, Y. Suzuki, K. Ando. *Giant tunneling magnetoresistance up to 410% at room temperature in fully epitaxial Co/MgO/Co magnetic tunnel junctions with bcc Co(001) electrodes.* Appl. Phys. Lett. **89**, 042505 (2006).
- [35] J. A. Katine, F. J. Albert, R. A. Buhrman, E. B. Myers, D. C. Ralph. *Current-Driven Magnetization Reversal and Spin-Wave Excitations in Co /Cu /Co Pillars.* Phys. Rev. Lett. **84**, 3129 (2000).
- [36] S. Urazdhin, N. Birge, W. P. Pratt, J. Bass. *Switching current versus magnetoresistance in magnetic multilayer nanopillars.* Appl. Phys. Lett **84**, 1516 (2004).

- [37] J. Grollier, V. Cros, A. Hamzic, J.-M. George, H. Jaffres, A. Fert, G. Faini, J. B. Youssef, H. LeGall. *Spin-polarized current induced switching in Co/Cu/Co pillars*. Appl. Phys. Lett. **78**, 3663 (2001).
- [38] S. I. Kiselev, J. Sankey, I. Krivorotov, N. Emley, R. Schoelkopf, R. Buhrman, D. Ralph. *Microwave oscillations of a nanomagnet driven by a spin-polarized current*. Nature **425**, 380 (2003).
- [39] J. Grollier, V. Cros, H. Jaffres, A. Hamzic, J.-M. George, G. Faini, J. B. Youssef, H. LeGall, A. Fert. *Field dependence of magnetization reversal by spin transfer*. Phys. Rev. B **67**, 174 402 (2003).
- [40] J. Sun, D. Monsma, D. Abraham, M. Rooks, R. Koch. *Batch-fabricated spin-injection magnetic switches*. Appl. Phys. Lett. **81**, 2202 (2002).
- [41] M. Elsen, O. Boulle, J.-M. George, H. Jaffrès, R. Mattana, V. Cros, A. Fert, A. Lemaitre, R. Giraud, G. Faini. *Spin transfer experiments on (Ga,Mn)As/(In,Ga)As/(Ga,Mn)As tunnel junctions*. Phys. Rev. B **73**, 035 303 (2006).
- [42] Y. Huai, F. Albert, P. Nguyen, M. Pakala, T. Valet. *Observation of spin-transfer switching in deep submicron-sized and low-resistance magnetic tunnel junctions*. Appl. Phys. Lett. **84**, 3118 (2004).
- [43] Y. Liu, Z. Zhang, P. Freitas, J. Martins. *Current-induced magnetization switching in magnetic tunnel junctions*. Appl. Phys. Lett. **82**, 2871 (2003).
- [44] G. D. Fuchs, N. Emley, I. Krivorotov, P. Braganca, E. Ryan, S. Kiselev, J. Sankey, D. Buhrman. *Spin-transfer effects in nanoscale magnetic tunnel junctions*. Appl. Phys. Lett. **85**, 1205 (2005).
- [45] M. D. Stiles, A. Zangwill. *Anatomy of spin-transfer torque*. Phys. Rev. B **66**, 014 407 (2002).
- [46] D. M. Edwards, F. Federici, J. Mathon, A. Umerski. *Self-consistent theory of current-induced switching of magnetization*. Phys. Rev. B **71**, 054 407 (2005).
- [47] C. Sommers, P. Weinberger. *Current-induced switching in Co/Cu/Co spin valves: The effect of interdiffusion*. Phys. Rev. B **72**, 054 431 (2005).
- [48] J. Barnaś, A. Fert, M. Gmitra, I. Weymann, V. K. Dugaev. *From giant magnetoresistance to current-induced switching by spin transfer*. Phys. Rev. B **72**, 024 426 (2005).
- [49] H. L. Meyerheim, R. Popescu, J. Kirschner, N. Jedrecy, M. Sauvage-Simkin, B. Heinrich, R. Pinchaux. *Geometrical and Compositional Structure at Metal-Oxide Interfaces: MgO on Fe(001)*. Phys. Rev. Lett. **87**, 076 102 (2001).
- [50] H.L. Meyerheim, R. Popescu, N. Jedrecy, M. Vedpathak, M. Sauvage-Simkin, R. Pinchaux, B. Heinrich, J. Kirschner. *Surface x-ray diffraction analysis of the MgO/Fe(001) interface: Evidence for an FeO layer*. Phys. Rev. B **65**, 144 433 (2002).

- [51] **C. Tusche, H. L. Meyerheim, N. Jedrecy, G. Renaud, A. Ernst, J. Henk, P. Bruno, J. Kirschner.** *Oxygen-Induced Symmetrization and Structural Coherency in Fe/MgO/Fe(001) Magnetic Tunnel Junctions.* Phys. Rev. Lett. **95**, 176 101 (2005).
- [52] **M. Born, R. Oppenheimer.** *Zur Quantentheorie der Moleküle.* Annalen der Physik **84**, 457 (1927).
- [53] **P. Hohenberg, W. Kohn.** *Inhomogeneous Electron Gas.* Phys. Rev. B **136**, 864 (1964).
- [54] **W. Kohn.** *Highlights of Condensed Matter Theory.* Amsterdam (1985).
- [55] **W. Kohn, L. J. Sham.** *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects.* Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [56] **U. von Barth, L. Hedin.** *A local exchange-correlation potential for the spin polarized case: I.* J. Phys. C: Solid State Phys **5**, 1629 (1972).
- [57] **J. Kübler.** *Theory of Itinerant Electron Magnetism.* Clarendon Press (2000).
- [58] **L.M. Sandratskii.** *Energy-band structure calculations for crystals with spiral magnetic-structure.* phys. stat. sol. (b) **136**, 167 (1986).
- [59] **G. Czycholl.** *Theoretische Festkörperphysik.* Vieweg Verlag (2000).
- [60] **L. Hedin, B. Lundqvist.** *Explicit local exchange-correlation potentials.* J. Phys. C: Solid State Phys **4**, 2064 (1971).
- [61] **V. L. Moruzzi, J. F. Janak, A. R. Williams.** *Calculated electronic properties of Metals.* Pergamon ., New York (1978).
- [62] **S. H. Vosko, L. Wilk, N. Nussair.** *Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin-density calculations - a critical analysis.* Can. J. Phys. **58**, 1200 (1980).
- [63] **J. P. Perdew, Y. Wang.** *Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy.* Phys. Rev. B **45**, 13 244 (1992).
- [64] **D. M. Ceperley, B. J. Alder.** *Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method.* Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).
- [65] **Y. Wang, J. P. Perdew.** *Spin scaling of the electron-gas correlation energy in the high-density limit.* Phys. Rev. B **43**, 8911 (1991).
- [66] **C. Amador, W. R. L. Lambrecht, B. Segall.** *Application of generalized gradient-corrected density functionals to iron.* Phys. Rev. B **46**, 1870 (1992).
- [67] **V. I. Anisimov, F. Aryasetiawan, A. I. Liechtenstein.** *First - principles calculations of the electronic structure and spectra of strongly correlated systems: the LDA + U method.* J. Phys.: Condens. Matter **9**, 767 (1997).

- [68] **D. Ködderitzsch.** *Beschreibung der elektronischen Struktur von Übergangsmetalloxiden mittels selbstwechselwirkungskorrigierter Dichtefunktionaltheorie: Volumenkristalle, Oberflächen und Punktdefekte.* Doktorarbeit Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (2003).
- [69] **A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg.** *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions.* Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [70] **G. Onida, L. Reining, A. Rubio.** *Electronic excitations: density-functional versus many-body Green's-function approaches.* Rev. Mod. Phys. **74**, 601 (2002).
- [71] **Ph. Mavropoulos, N. Papanikolaou.** *Computational Nanoscience: Do It Yourself* Kap. The Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) Green Function Method I. Electronic Structure of Periodic Systems, S. 131. NIC-Directors (2006).
- [72] **B. A. Lippmann, J. Schwinger.** *Variational Principles for Scattering Processes. I.* Phys. Rev. **79**, 469 (1950).
- [73] **J. Korringa.** *On the calculation of the energy of a Bloch wave in a metal.* Physica **13**, 392 (1947).
- [74] **W. Kohn, N. Rostoker.** *Solution of the Schrödinger Equation in Periodic Lattices with an Application to Metallic Lithium.* Phys. Rev. **64**, 1111 (1954).
- [75] **I. Mertig, E. Mrosan, P. Ziesche.** *Multiple Scattering Theory of Point Defects in Metals: Electronic Properties.* Teubner-Texte zur Physik. B.G. Teubner Verlagsgesellschaft Leipzig (1987).
- [76] **J. Binder.** *Giant Magnetoresistance - eine ab-initio Beschreibung.* Doktorarbeit Technische Universität Dresden (2000).
- [77] **J. Opitz.** *Ab initio Beschreibung der elektronischen Struktur und der Transporteigenschaften von metallischen Nanodrähten.* Doktorarbeit Technische Universität Dresden (2002).
- [78] **G. Lehmann.** *Ergebnisse der Elektronentheorie der Metalle.* Akademie-Verlag (1983).
- [79] **P. Zahn.** *Screened Korringa-Kohn-Rostoker-Methode für Vielschichten.* Doktorarbeit Technische Universität Dresden (1998).
- [80] **K. Wildberger.** *Tight-Binding-Korringa-Kohn-Rostoker-Methode und Grenzflächenreflektivität in magnetischen Schichtsystemen.* Doktorarbeit RWTH Aachen (1997).
- [81] **R. Zeller, P.H. Dederichs, B. Újfalussy, L. Szunyogh, P. Weinberger.** *Theory and convergence properties of the screened Korringa-Kohn-Rostoker method.* Phys. Rev. B **52**, 008 807 (1995).
- [82] **P.M. Tedrow, R. Meservey.** *Spin Polarization of Electrons Tunneling from Films of Fe, Co, Ni, and Gd.* Phys. Rev. B **7**, 318 (1973).

- [83] **S. Yuasa, T. Nagahama, A. Fukushima, Y. Suzuki, K. Ando.** *Giant room-temperature magnetoresistance in single-crystal Fe/MgO/Fe magnetic tunnel junctions.* Nature Materials **3**, 868 (2004).
- [84] **C. Tiusan, J. Faure-Vincent, C. Bellouard, M. Hehn, E. Jouguelet, A. Schuhl.** *Interfacial Resonance State Probed by Spin-Polarized Tunneling in Epitaxial Fe=MgO=Fe Tunnel Junctions.* Phys. Rev. Lett. **93**, 106 602 (2004).
- [85] **J.M. De Teresa, A. Barthélémy, A. Fert, J.P. Contour, R. Lyonnet, F. Montaigne, P. Seneor, A. Vaurès.** *Inverse Tunnel Magnetoresistance in Co/SrTiO₃/La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃: New Ideas on Spin-Polarized Tunneling.* Phys. Rev. Lett. **82**, 4288 (1999).
- [86] **R. Landauer.** *Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction.* IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957).
- [87] **R. Landauer.** *Conductance from transmission: common sense points.* Physica Scripta **T42**, 110 (1992).
- [88] **M. Büttiker.** *Four-Terminal Phase-Coherent Conductance.* Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986).
- [89] **D. S. Fisher, P. A. Lee.** *Relation between conductivity and transmission matrix.* Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).
- [90] **H. U. Baranger, A. D.s Stone.** *Electrical linear-response theory in an arbitrary magnetic field: A new Fermi-surface formation.* Phys. Rev. B **40**, 8169 (1989).
- [91] **R. Kubo.** *Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple application to magnetic and conduction problems.* J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 570 (1957).
- [92] **J. Banhart.** *Transporteigenschaften komplexer metallischer Systeme.* Habilitation Universität Bremen (1997).
- [93] **M. Czerner.** *Elektronischer Transport in Nanokontakten.* Diplomarbeit Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (2003).
- [94] **Ph. Mavropoulos, N. Papanikolaou, P. H. Dederichs.** *Korringa-Kohn-Rostoker Green-function formalism for ballistic transport.* Phys. Rev. B **69**, 125 104 (2004).
- [95] **N.F. Mott.** *Electrons in Transition Metals.* Adv. Phys. **13**, 325 (1964).
- [96] **J. Rammer, H. Smith.** *Quantum field-theoretical methods in transport theory of metals.* Rev. Mod. Phys. **58**, 323 (1986).
- [97] **C. Zhang, X.-G. Zhang, P. S. Krstić, Hai ping Cheng, W. H. Butler, J. M. MacLaren.** *Electronic structure and spin-dependent tunneling conductance under a finite bias.* Phys. Rev. B **69**, 134 406 (2004).
- [98] **W. H. Butler, X.-G. Zhang, T. C. Schulthess, J. M. MacLaren.** *Spin-dependent tunneling conductance of Fe—MgO—Fe sandwiches.* Phys. Rev. B **63**, 054 416 (2001).

- [99] **J. Mathon, A. Umerski.** *Theory of tunneling magnetoresistance of an epitaxial Fe/MgO/Fe(001) junction.* Phys. Rev. B **63**, 220 403 (2001).
- [100] **D. G. Pettifor.** *Pressure-cell boundary relation and application to transition-metal equation of state.* Comm. on phys. **1**, 141 (1976).
- [101] **D. G. Pettifor, C. M. Varma.** *Heat of formation within the density functional formalism.* J. Phys. C **12**, L253 (1979).
- [102] **R.C. Whited, C.J. Flaten, W.C. Walker.** *Exciton thermoreflectance of MgO and CaO.* Solid State Commun. **13**, 1903 (1973).
- [103] **U. Schönberger, Aryasetiawan.** *Bulk and surface electronic structures of MgO.* Phys. Rev. B **52**, 8788 (1995).
- [104] **K. Miyokawa, S. Saito, T. Katayama, T. Saito, T. Kamino, K. Hanashima, Y. Suzuki, K. Mamiya, T. Koide, S. Yuasa.** *X-ray Absorption and X-ray Magnetic Circular Dichroism Studies of a Monatomic Fe(001) Layer Facing a Single-Crystalline MgO(001) Tunnel Barrier.* Jpn. J. Appl. Phys. **44**, L9 (2005).
- [105] **I. Rungger, A. R. Rocha, O. Mryasov, O. Heinonen, S. Sanvito.** *Bias Dependent TMR in Fe/MgO/Fe(100) Tunnel Junctions.* In: Magnetic Thin Films, Heterostructures, and Device Materials (herausgeg. von **C. Ross**) Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. **941**, Q01–03 (2006).
- [106] **S. Zhang, P.M. Levy, A.C. Marley, S.S.P. Parkin.** *Quenching of Magnetoresistance by Hot Electrons in Magnetic Tunnel Junctions.* Phys. Rev. Lett. **79**, 3744 (1997).
- [107] **I. Rungger.** Priv. Komm.
- [108] **J. Hayakawa, S. Ikeda, Y. M. Lee, R. Sasaki, T. Meguro, F. Matsukura, H. Takahashi, H. Ohno.** *Current-Driven Magnetization Switching in CoFeB/MgO/CoFeB Magnetic Tunnel Junctions.* Jpn. J. Appl. Phys. **44**, L1267 (2005).
- [109] **S. Yuasa, Y. Suzuki, T. Katayama, K. Ando.** *Characterization of growth and crystallization processes in CoFeB/MgO/CoFeB magnetic tunnel junction structure by reflective high-energy electron diffraction.* Appl. Phys. Lett. **87**, 242 503 (2005).
- [110] **M. Gradhand.** Diplomarbeit Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg (2006).
- [111] **D. Wortmann, H. Ishida, S. Blügel.** *Ab initio Green-function formulation of the transfer matrix: Application to complex band structures.* Phys. Rev. B **65**, 165 103 (2002).
- [112] **D.A. Papaconstantopoulos.** <http://cst-www.nrl.navy.mil/ElectronicStructureDatabase/>.

Eigene Veröffentlichungen

- [E1] **C. Heiliger, P. Zahn, B. Yu. Yavorsky, I. Mertig.** *Influence of the interface structure on the bias dependence of tunneling magnetoresistance.* Phys. Rev. B **72**, 180 406 (R) (2005).
- [E2] **C. Heiliger, P. Zahn, B. Yu. Yavorsky, I. Mertig.** *Thickness dependence of the tunneling current in the coherent limit of transport.* Phys. Rev. B submitted (2006).
- [E3] **C. Heiliger, P. Zahn, B. Yu. Yavorsky, I. Mertig.** *Interface structure and bias dependence of Fe/MgO/Fe tunnel junctions: Ab initio calculations.* Phys. Rev. B **73**, 214 441 (2006).
- [E4] **C. Heiliger, P. Zahn, I. Mertig.** *Microscopic origin of tunneling magnetoresistance.* Materials Today accepted (2006).
- [E5] **C. Heiliger, P. Zahn, I. Mertig.** *Influence of interface oxidation on the TMR ratio of Fe/MgO/Fe tunnel junctions.* J. Magn. Magn. Mater. accepted (2006).
- [E6] **C. Heiliger, P. Zahn, I. Mertig.** *Which states contribute to the tunneling current for large barrier thicknesses?* In: Magnetic Thin Films, Heterostructures, and Device Materials (herausgeg. von **C. Ross**) Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. **941** , Q03–05 (2006).
- [E7] **C. Heiliger, M. Gradhand, P. Zahn, I. Mertig.** *Very high TMR even with one Fe layer.* submitted (2006).
- [E8] **C. Heiliger, P. Zahn, I. Mertig.** *How Many Fe layers Cause TMR?* In: Magnetic Thin Films, Heterostructures, and Device Materials (herausgeg. von **C. Ross**) Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. **941** , Q01–02 (2006).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen Personen bedanken, die zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben. Ich möchte mich bei allen Mitarbeitern der Fachgruppe Theoretische Physik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg für das angenehme Arbeitsklima bedanken.

Besonders sei an dieser Stelle Frau Prof. Dr. Mertig für die Möglichkeit der selbstständigen Bearbeitung dieses sehr interessanten Themas gedankt. Die zahlreichen Diskussionen mit ihr, aus denen alle Beteiligten mit neuen Erkenntnissen gegangen sind, werden mir stets in Erinnerung bleiben. Vor allem die Möglichkeit der Zusammenarbeit mit Studenten, sei es bei der Betreuung von Forschungspraktika und Diplomarbeiten oder in den Computerübungen haben mir neben neuen Erkenntnissen auch sehr viel Freude bereitet. Letztendlich möchte ich mich auch für die Möglichkeit der zahlreichen Besuche von Konferenzen und Ferienschulen bedanken.

Bei Herrn Dr. P. Zahn möchte ich mich vor allem für die ständige Diskussionsbereitschaft bedanken. Ohne diese wäre ein gutes Gelingen der vorliegenden Arbeit und die Artikel der letzten Jahre kaum denkbar gewesen. Neben den fachlichen Diskussionen bin ich auch für das ein oder andere private Gespräch dankbar.

Für die Einführung in die KKR-Methode und den Transportformalismus möchte ich mich bei Herrn M. Czerner recht herzlich bedanken. Unsere Zusammenarbeit beginnend beim Elektronikpraktikum, über das Forschungspraktikum, bis hin zur Diplomarbeit und schließlich das Promotionsstudium waren immer sehr nützlich. Aber auch unsere privaten „Plaudereien“ vor allem stundenlang übers Telefon waren immer angenehm und werden hoffentlich auch in Zukunft weiterhin stattfinden.

Durch die Bereitstellung der ersten Potentiale und der Struktur von Fe/MgO/Fe von Herrn Dr. B. Yu. Yavorski waren die ersten Transportrechnungen überhaupt möglich. Dafür und für die immer freundliche Diskussionsbereitschaft möchte ich mich bedanken.

Die in der vorliegenden Arbeit dargestellten Diskussionen zum Einfluß der Struktur der Elektroden auf den elektronischen Transport wären ohne Herrn M. Gradhand nicht denkbar gewesen. Neben seinen Rechnungen sind damit vor allem die erhellenden Diskussionen gemeint, für die ich besonders dankbar bin.

Wenn es jemals ein Problem mit komplizierten Formeln gab, insbesondere wenn darin eine Greensche Funktion vorkommt, konnte man mit der Hilfe von Herrn S. Walczak rechnen. Daneben bin ich für den Ausgleich dankbar, den „Jungspund“ über das Feld jagen zu können.

Die etwas andere Sichtweise des elektronischen Transports von Dr. M. D. Stiles hat einen Teil dazu beigetragen die Diskussion der Ergebnisse präziser und deutlicher darzustellen, wofür ich sehr dankbar bin.

Meinen Eltern danke ich für die stetige Unterstützung während der gesamten Zeit. Meinem größten Kritiker fühle ich mich besonderem Dank verpflichtet, da er stets die Sichtweise eines Außenstehenden verkörpert hat und dadurch auf andere Aspekte beim Durchschauen der Arbeit geachtet hat, als die „Fachidioten“.

Meiner Frau Mandy gilt ein besonderer Dank. Ohne ihre ständige Motivation und Unterstützung vor allem in manch verzweifelter Stunde wäre diese Arbeit undenkbar.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich gemäß §5 Abs. 2b der Promotionsordnung der Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg vom 3.2.2004, daß ich die vorliegende Arbeit

Elektronentransport durch planare Tunnelkontakte: Eine *ab initio* Beschreibung

selbständig und ohne fremde Hilfe verfaßt, andere als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt und die den benutzten Werken wörtlich oder inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Halle, den 13.02.2007

Christian Heiliger

Lebenslauf

Name: Christian Heiliger

Wohnort: Guldeinstr. 49
80339 München

Geburtstag: 14.05.1980

Geburtsort: Halle/Saale

Staatsangehörigkeit: Deutsch

Familienstand: verheiratet

Schulbildung:

1986-1988	Grundschule (Huttenschule)
ab 1988	Schule mit erweitertem Fremdsprachenunterricht (Dr.-Kurt-Fischer-Schule)
1991	wurde diese Schule Gymnasium (Johann-Gottfried-Herder-Gymnasium)
1998	Schulabschluß (Abitur, Note:1,1), Auszeichnung durch den Freundeskreis des Gymnasiums

Studium:

WS 1998	Beginn des Studiums der Physik und Informatik an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
SS 2000	Vordiplom im Fach Physik (Note: sehr gut)
01.09.2003	Diplom im Fach Physik (Note: sehr gut)
ab 01.09.2003	Doktorand am FB Physik der MLU, Fachgruppe Theoretische Physik

Halle/Saale, den 13.02.2007