

## Kapitel 2

# Spinabhängiger Transport

In der Spinelektronik nutzt man aus, dass Ladungsträger zusätzlich zu ihrer Ladung ein magnetisches Moment besitzen, das an ihren Spin gekoppelt ist. Das heißt, die Träger des elektrischen Stroms sind gleichzeitig Elementarmagnete, die eine bestimmte Richtung ihres magnetischen Moments auszeichnet. In diesem Kapitel soll diskutiert werden, ob und wie die elektrischen Transporteigenschaften von der Richtung des Spins der Ladungsträger abhängen. Wir werden sehen, dass unter bestimmten Voraussetzungen die Ausrichtung der Spins zu einer Absenkung des elektrischen Widerstands führen kann – man erhält also einen *negativen Magnetwiderstand*. Die Ausrichtung der Spins kann durch die Wirkung eines äußeren Magnetfeldes erzielt werden. Für viele technische Anwendungen (z.B. magnetoresistive Sensoren, Lesköpfe für Festplatten) will man häufig eine möglichst große Widerstandsänderung mit einem möglichst kleinen Magnetfeldern erzielen.

Im Folgenden werden der positive Magnetwiderstand, der in allen metallischen Leitern auftritt, und die in der Einleitung bereits genannten negativen Magnetowiderstandseffekte eingeführt und zunächst phänomenologisch beschrieben. In den anschließenden Unterkapiteln wird dann eine vertiefende Diskussion des elektrischen Transports in nicht-magnetischen und magnetischen Materialien folgen.

## 2.1 Magneto-resistive Effekte – ein phänomenologischer Überblick

Im Allgemeinen führen Magnetfelder zu einer Lokalisierung der Ladungsträger in einem Festkörper und erhöhen dadurch geringfügig den elektrischen Widerstand. Wir erhalten somit einen *positiven Magnetowiderstandseffekt*, der z.B. in nicht-magnetischen Metallen wie Gold, Silber oder Kupfer auftritt. In bestimmten Fällen erhält man aber auch eine Abnahme des elektrischen Widerstands durch ein äußeres Magnetfeld. Wir sprechen dann von einem *negativen Magnetowiderstandseffekt*. Die für technische Anwendungen interessanten negativen Magnetowiderstandseffekte, AMR, GMR, TMR und CMR, sind üblicherweise wesentlich größer als der positive Magnetwiderstand. Sie wurden deshalb in den letzten Jahren intensiv untersucht.

### 2.1.1 Der positive Magnetwiderstand

Der "normale" oder positive Magnetwiderstand ist eine Folge der Lorentz-Kraft, die ein angelegtes Magnetfeld auf die sich bewegenden Ladungsträger ausübt. Die Elektronen bewegen sich deshalb zwischen zwei Stößen (z.B. mit Verunreinigungen oder Phononen) auf kreisförmigen Bahnen. Anschaulich kann man sich den positiven Magnetwiderstand durch eine Verkleinerung der effektiven freien Weglänge  $\ell$  zwischen zwei Stoßereignissen erklären (eine genauere Diskussion folgt später, siehe Seite 43). Der positive Magnetwiderstand folgt der so genannten **Kohler-Regel**<sup>1</sup>

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)} = F\left(\frac{B}{\rho(0)}\right). \quad (2.1.2)$$

Hierbei ist  $\rho$  der spezifische Widerstand,  $\rho(0)$  der spezifische Widerstand im Nullfeld und  $F$  eine Funktion, die von der Art des jeweiligen Metalls abhängt.<sup>2</sup> Das Magnetfeld setzt sich dabei aus drei Anteilen

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H}_a + \mathbf{H}_d + \mathbf{M}) \quad (2.1.3)$$

zusammen, wobei  $\mathbf{H}_a$  das angelegte Feld,  $\mathbf{H}_d$  das Entmagnetisierungsfeld und  $\mathbf{M}$  die Probenmagnetisierung ist;  $\mu_0$  ist die Vakuum-Permeabilität. Der positive Magnetwiderstand tritt immer auf, auch wenn er teilweise von wesentlich größeren negativen Magnetowiderstandseffekten überlagert wird. Gleichung (2.1.1) zeigt, dass der positive Magnetwiderstand sehr groß werden kann, wenn  $\rho_0$  sehr klein ist. Dies ist in sehr reinen Metallen bei sehr tiefen Temperaturen der Fall.<sup>3</sup> So nimmt z.B. in reinem Cu oder Ag der Widerstand in angelegten Feldern von etwa 10 T bei niedrigen Temperaturen um bis zu 5% zu. Bei Raumtemperatur ist der positive Magnetwiderstand aber generell klein und deshalb nicht für Anwendungen ausnutzbar.

Wir unterscheiden generell zwischen dem *transversalen* und *longitudinalen Magnetwiderstand*, je nachdem ob das angelegte Magnetfeld senkrecht oder parallel zur Stromrichtung ist. Der transversale Magnetwiderstand ist im Allgemeinen größer als der longitudinale Magnetwiderstand.

<sup>1</sup>siehe z.B. Z. M. Ziman, *Electrons and Phonons*, Clarendon Press (1963), p. 491

<sup>2</sup>In einem ferromagnetischen Metall ist  $\rho_0 = \rho_{\parallel}$  oder  $\rho_{\perp}$  je nachdem, ob das angelegte Feld parallel oder senkrecht zur Magnetisierungsrichtung ist.

<sup>3</sup>E. Fawcett, *Advances in Physics* **13**, 139 (1964).

### 2.1.2 Der negative Magnetwiderstand – Streuung an Spinunordnung

Man beobachtet, dass ferromagnetische Übergangsmetalle (z.B. Fe, Co, Ni) unterhalb der Curie-Temperatur  $T_C$  einen niedrigeren elektrischen Widerstand besitzen als nicht-ferromagnetische Übergangsmetalle (z.B. Pd). Abb. 2.1 zeigt ein typisches Beispiel für dieses Verhalten.

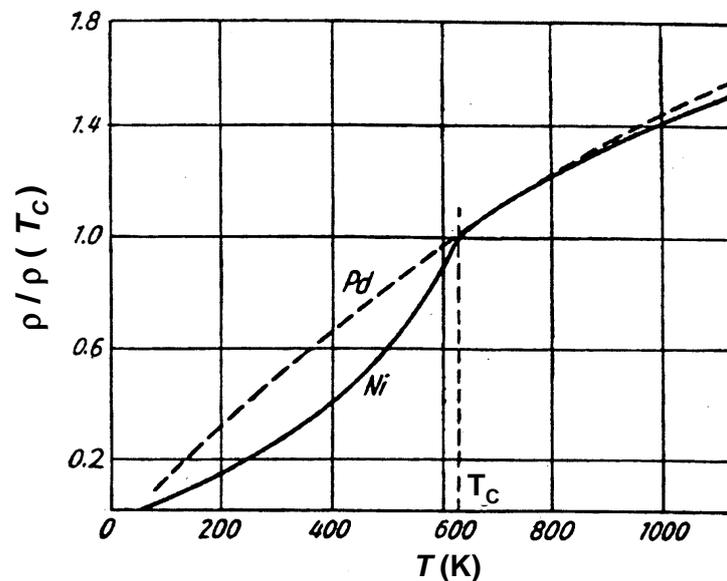


Abbildung 2.1: Elektrischer Widerstand von Nickel und Palladium (Coles 1958). Die Widerstandsachse ist auf den spezifischen Widerstand des jeweiligen Materials bei der Curie-Temperatur  $T_C$  normiert.

Für das ferromagnetische Nickel nimmt der spezifische Widerstand unterhalb der Curie-Temperatur schneller mit sinkender Temperatur ab als für das nicht-magnetische Palladium, dessen elektronische Struktur aber derjenigen von Nickel sehr ähnlich ist. Eine anschauliche Erklärung für diesen Effekt wurde von **Sir N. F. Mott** gegeben.<sup>4</sup> In einem Übergangsmetall wird der elektrische Strom hauptsächlich von den Elektronen des  $s$ -Bandes getragen (wegen ihrer kleineren effektiven Masse), während der spezifische Widerstand hauptsächlich durch die Streuung dieser  $s$ -Elektronen in die freien Zustände des  $d$ -Bandes an der Fermi-Kante bestimmt wird. Die hohe Zustandsdichte des  $d$ -Bandes resultiert in einer großen Streurrate und damit einem hohen spezifischen Widerstand der Übergangsmetalle. Im ferromagnetischen Zustand spalten allerdings die  $d$ -Subbänder für die Minoritäts- und Majoritätsspins durch die endliche Austauschkopplung auf und das Subband der Majoritätsspins kann unter die Fermi-Kante absinken (siehe Abb. 2.2). Als Folge können die Majoritätsspin  $s$ -Elektronen nicht mehr in die  $d$ -Zustände gestreut werden, ihre Mobilität wird größer und der Widerstand nimmt ab. Nach **Mott** erklärt dies das Absinken des spezifischen Widerstands eines ferromagnetischen Übergangsmetalls unter den Wert eines nicht-magnetischen Übergangsmetalls. Das heißt, der spezifische Widerstand eines ferromagnetischen Metalls ist unterhalb von  $T_C$  anomal klein und nimmt zu, wenn die Austauschspaltung mit zunehmender Spinunordnung (wachsender Temperatur) abnimmt. Äußere Felder können zu einer Erhöhung der Spinordnung und damit zu einer Abnahme des elektrischen Widerstands führen. Dieser negative Magnetowiderstandseffekt ist isotrop, d.h. unabhängig von der Richtung des Stromes relativ zur Magnetisierungs- und Feldrichtung bzw. zur Orientierung der Kristallachsen.

Das Modell von **Mott** für den Widerstandsbeitrag durch Spinunordnung in ferromagnetischen

<sup>4</sup>N. F. Mott, *Advances in Physics* **13**, 325 (1964).

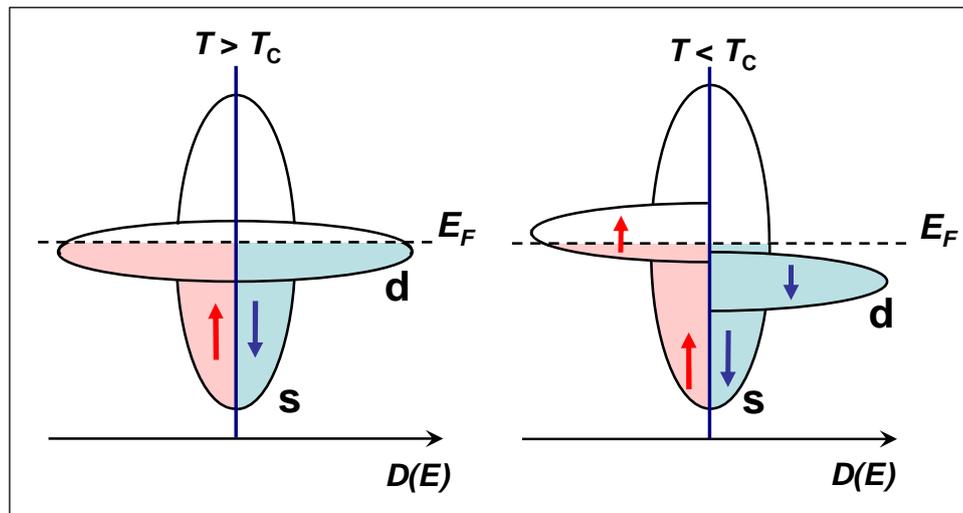


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Aufspaltung der  $d$ -Bänder in einem Übergangsmetall durch die endliche Austauschkopplung.

Metallen ist allerdings nicht ausreichend, um inelastische Streuprozesse durch Spinfluktuationen zu berücksichtigen. **I. A. Campbell** und **A. Fert** haben ein Zwei-Strom-Modell für ferromagnetische Metalle vorgeschlagen, in dem der spezifische Widerstand durch eine Parallelschaltung von Leitungskanälen für die Minoritäts- und Majoritätsspinladungsträger beschrieben wird, wobei für beide Kanäle der Effekt von inelastischer Streuung an Magnonen und Austausch zwischen den beiden Kanälen (Spin-Mischung) berücksichtigt wird.<sup>5</sup> Die Theorie des in Abschnitt 2.1.4 diskutierten GMR-Effekts basiert ebenfalls auf einem Zwei-Strom-Modell.

### 2.1.3 Der anisotrope Magnetwiderstand – AMR

Abbildung 2.3 zeigt typische magneto-resistive Effekte eines ferromagnetischen Metalls in einem longitudinalen (parallel zum Strom) und transversalen (senkrecht zum Strom) Magnetfeld. Wird das Magnetfeld von Null erhöht, so dominiert zunächst der Beitrag des anisotropen Magnetwiderstands (AMR). Er resultiert aus der spontanen Anisotropie des spezifischen Widerstands in einem ferromagnetischen Metall, d.h. aus der Abhängigkeit des Widerstands vom Winkel zwischen Magnetfeld und Strom. Eine genaue Diskussion der physikalischen Ursache für diese spontane Anisotropie, nämlich der *Spin-Bahn-Wechselwirkung*, folgt in Abschnitt 3. Der AMR folgt der zunehmenden Orientierung der magnetischen Domänen parallel zum angelegten Magnetfeld und sättigt, wenn eine vollkommene Ausrichtung erreicht ist. Der Sättigungswert hängt dabei vom Winkel zwischen Strom und Magnetfeld ab, wie in Abb. 2.3 für longitudinale und transversale Felder gezeigt ist.

Nachdem Sättigung erreicht ist, variiert der Widerstand üblicherweise nur noch wenig mit dem angelegten Feld und zwar entweder durch (i) den positiven Magnetwiderstand oder (ii) den negativen Magnetwiderstand durch reduzierte Spin-Unordnung. Der zweite Effekt ist insbesondere nahe der Curie-Temperatur wichtig, wie bereits oben diskutiert wurde. Um den reinen AMR-Effekt bei kleinen Feldern zu erhalten, muss der Beitrag des positiven oder negativen Magnetwiderstands abgezogen werden. Dies kann durch eine Rückextrapolation geschehen, wie dies in Abb. 2.3 gezeigt ist. Dabei ist wichtig, dass bis zum negativen Koerzitivfeld zurückextrapoliert wird, da erst hier das Feld im Innern der Probe verschwindet.

<sup>5</sup>I. A. Campbell, A. Fert, in *Ferromagnetic Materials*, Vol. 3, 747 (1982), E. P. Wohlfarth editor, North Holland (1982).

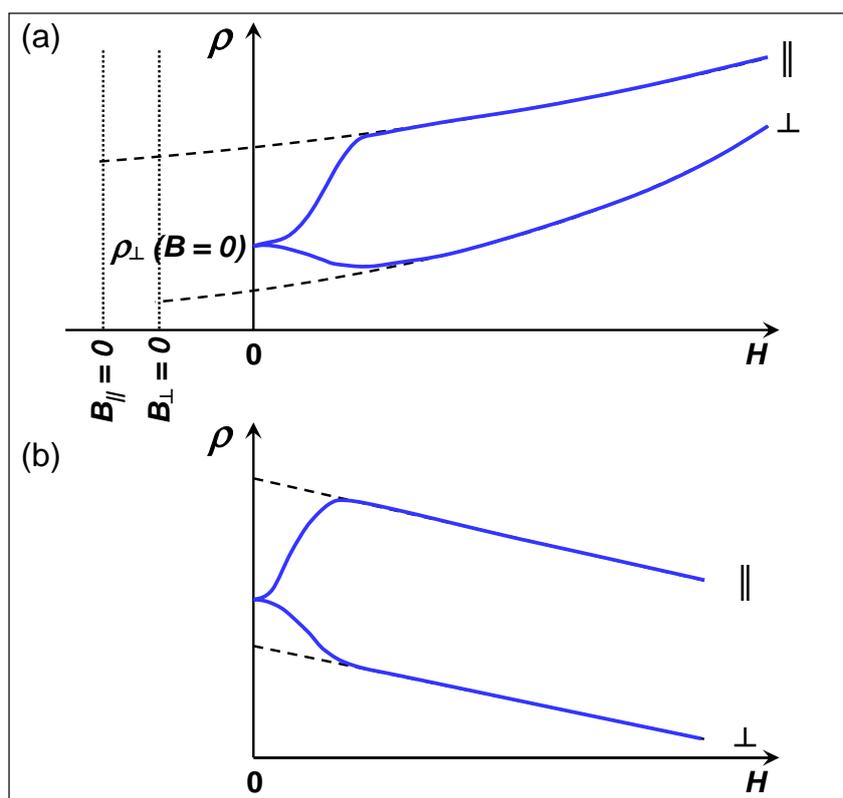


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der Magnetfeldabhängigkeit des spezifischen Widerstands in einem ferromagnetischen Metall. Im Niederfeldbereich dominiert der AMR, wogegen oberhalb des Sättigungsmagnetfeldes der positive Magnetwiderstand (a) oder der negative Magnetwiderstand durch Reduzierung der Spinunordnung (b) dominiert. Die gestrichelten Linien deuten an, wie man durch Rückextrapolation den positiven oder negativen Magnetwiderstandsbeitrag bei kleinen Feldern eliminieren kann, um den reinen AMR-Effekt zu erhalten.

In einigen magnetischen Metallen wie Permalloy ( $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$ ) wird bei Raumtemperatur ein Unterschied zwischen dem Widerstand  $\rho_{\parallel}$  für longitudinales und dem Widerstand  $\rho_{\perp}$  für transversales Magnetfeld von etwa 5% erreicht. Da Permalloy sehr weichmagnetisch ist mit einem Sättigungsfeld  $H_s$  von nur wenigen mT, können hohe Magnetfeldempfindlichkeiten  $(\rho_{\parallel} - \rho_{\perp})/H_s$  erreicht werden, was für Sensoranwendungen wichtig ist.

#### 2.1.4 Der Riesenmagnetwiderstand – GMR

**Peter Grünberg** entdeckte im Jahr 1986 am Forschungszentrum Jülich, dass in mehrlagigen Fe/Cr-Schichten ein ungewöhnliches magnetisches Verhalten auftritt. Bei Cr-Schichtdicken um 1 nm richtet sich die Magnetisierung benachbarter Fe-Schichten antiparallel aus.<sup>6</sup> Diese antiferromagnetische Kopplung über die Leitungselektronen einer nicht-magnetischen, metallischen Zwischenschicht hat seither zu einer Vielzahl von Forschungsarbeiten geführt. Anschaulich kann diese antiferromagnetische Kopplung mit der alternierenden Spinpolarisation der Leitungselektronen um magnetische Verunreinigungen (siehe Kondo-Effekt, Abschnitt 2.3.5) oder der in Kapitel 5 beschriebenen Zwischenschichtkopplung verstanden werden.

Auf die Entdeckung des besonderen magnetischen Verhaltens magnetischer Schichtsysteme

<sup>6</sup>P. Grünberg et al., Phys. Rev. Lett. 57, 2442 (1986).

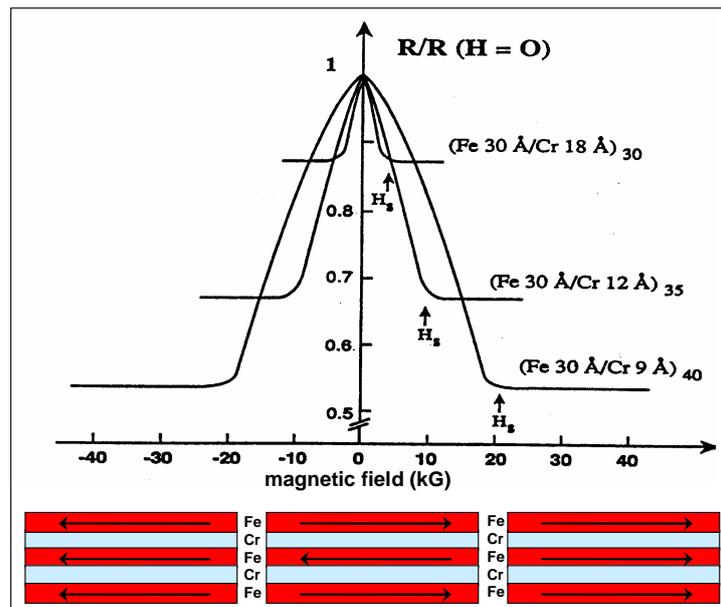


Abbildung 2.4: Magnetwiderstand von Fe/Cr-Schichtstrukturen bei 4.2 K. Es wird ein maximaler Magnetwiderstand bei einer Cr-Schichtdicke von 0.9 nm beobachtet. Für diese Schichtdicke liegt im feldfreien Fall eine antiparallele Kopplung der Magnetisierungen vor (aus M. N. Baibich et al., Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988)).

folgte eine weitere wichtige Entdeckung.<sup>7</sup> Richtet man bei einer antiferromagnetisch gekoppelten Schichtstruktur die Magnetisierung durch ein äußeres Feld parallel aus, dann sinkt der elektrische Widerstand (siehe Abb. 2.4). Dabei ist die Widerstandsänderung  $\Delta R/R(0)$  sehr groß und unabhängig von der relativen Orientierung zwischen Magnetfeld und Strom. Bereits bei Raumtemperatur erhält man Werte von bis zu 80%, Rekordwerte liegen bei 4.2 K über 200%. Damit war klar, dass der so genannte **Riesenmagnetowiderstand** (**Giant Magneto Resistance: GMR**) nicht auf dem bis dahin bekannten AMR beruhen kann, der nur Änderungen von wenigen Prozent aufweist und stark von der relativen Orientierung zwischen Magnetfeld- und Stromrichtung abhängt. Den GMR-Effekt definiert man als den Unterschied des Widerstands bei paralleler und antiparalleler Magnetisierungsrichtung normiert auf den Widerstand bei paralleler Ausrichtung, d.h.

$$\text{GMR} \equiv -\frac{R_p - R_{ap}}{R_p} = \frac{R_{ap} - R_p}{R_p} \quad (2.1.5)$$

Es war einige Zeit unklar, inwieweit die besondere magnetische Kopplung der ferromagnetischen Schichten eine Voraussetzung für den GMR ist. Es hat sich dann aber herausgestellt, dass auch Kombinationen aus magnetischen Schichten mit unterschiedlichen Koerzitivfeldern (siehe Abb. 2.5) wie z.B. Co/Au/Ni<sub>80</sub>Fe<sub>20</sub> ebenfalls einen Riesenmagnetowiderstand zeigen<sup>8</sup>, obwohl keine antiferromagnetische Kopplung der einzelnen ferromagnetischen Schichten vorliegt. Zur Unterscheidung von den gekoppelten Mehrlagen hat man derartige Strukturen als **Spin-Valve-Systeme** bezeichnet.

<sup>7</sup>M. N. Baibich et al., Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).

<sup>8</sup>B. Dieny et al., Phys. Rev. **B 43**, 1297 (1991). Dieny et al. verwendeten ein Phänomen, das unter dem Begriff **Austausch-Anisotropie** lange zuvor diskutiert wurde, um die Magnetisierungsrichtung einer ferromagnetischen Schicht durch Austauschkopplung an einen Antiferromagneten zu koppeln. Die Autoren führten damals den Begriff "Spin-Valve-Effekt" ein.

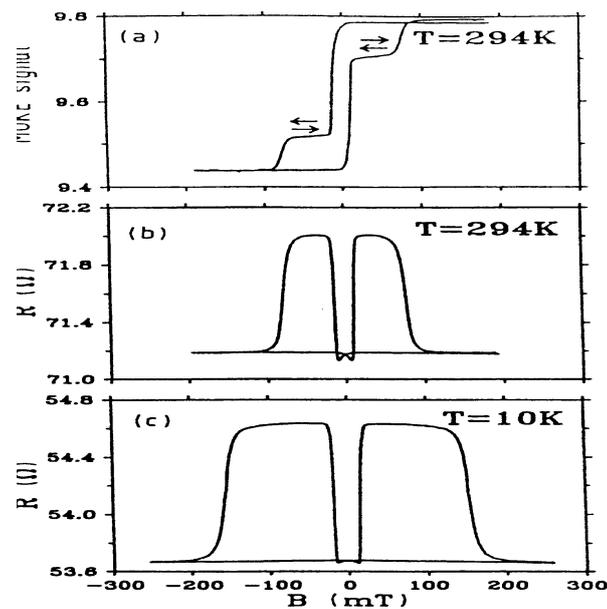


Abbildung 2.5: MOKE-Signal (magnetooptischer Kerr-Effekt) und Magnetfeldabhängigkeit des Widerstands einer Co/Au/Co-Schichtstruktur mit einer Au-Schichtdicke von 100 Å und 60 Å. Bedingt durch die Herstellung besitzen die beiden Co-Schichten unterschiedliche Koerzitivfelder (aus J. Barnas et al., Phys. Rev. B 42, 8110 (1990)).

In technischen Anwendungen werden heute Spin-Valve Strukturen verwendet, wie sie in Abb. 2.6 gezeigt ist. Eine solche Spin-Valve Struktur besteht im einfachsten Fall aus einer weichen magnetischen Schicht (FM, free), die durch eine nicht-magnetische (NM) Schicht von einer zweiten magnetischen Schicht (FM, pinned) getrennt ist, deren Magnetisierungsrichtung durch die Kopplung an eine antiferromagnetische Schicht mittels der so genannten *Exchange Bias Wechselwirkung* festgehalten wird. Die Funktionsweise der Spin-Valve Struktur kann aus der Magnetisierungs- und  $R(H)$ -Kurve in Abb. 2.6 verstanden werden. Die Magnetisierungsrichtung einer der magnetischen Schichten wird in negativer Richtung festgehalten. Erhöhen wir das äußeren Feld von negativen zu positiven Werten, so schaltet nahe bei  $H = 0$  die zweite, sehr weichmagnetische Schicht um und der Widerstand steigt steil an. Der Widerstand bleibt dann so lange hoch, bis das äußere Feld groß genug ist, um die Austauschkopplung zwischen

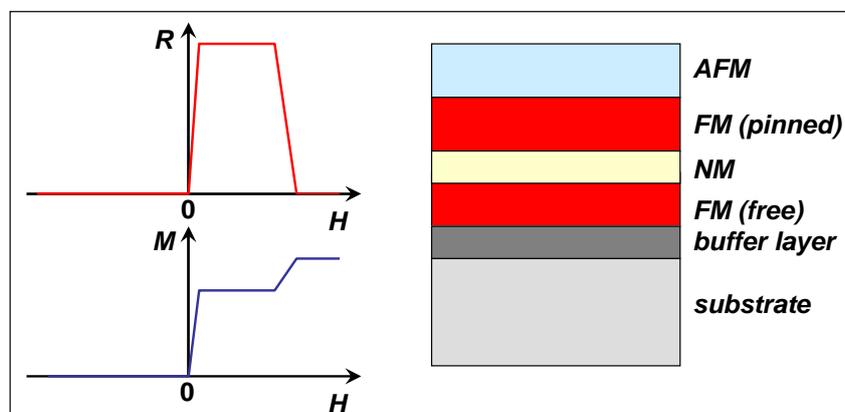


Abbildung 2.6: Schematische Darstellung der Magnetfeldabhängigkeit der Magnetisierung und des Widerstands sowie prinzipieller Schichtaufbau einer Spin-Valve Struktur.

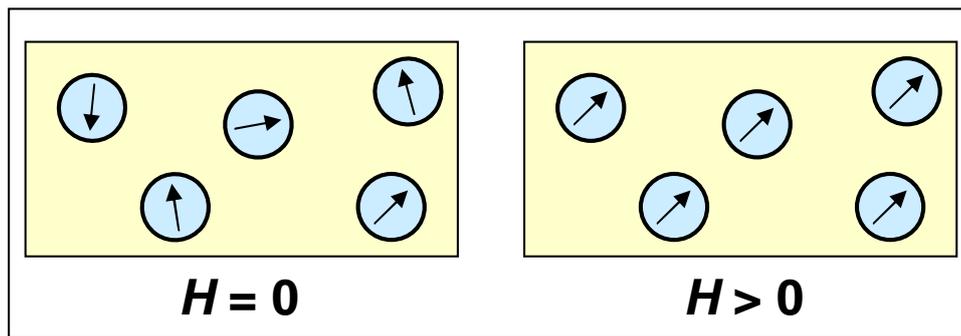


Abbildung 2.7: Zum Riesenmagnetowiderstand in granularen magnetischen Materialien. Ein äußeres Magnetfeld bewirkt eine einheitliche Ausrichtung der Magnetisierungsrichtung.

der ersten FM-Schicht und der AFM-Schicht zu überwinden und auch die zweite magnetische Schicht umzuschalten. Die große Steigung von  $R(H)$  bei kleinen Feldern wird heute in vielen Niederfeldanwendungen benutzt (Magnetfeldsensoren, Leseköpfe für Festplatten, MRAM).

Heute ist klar, dass überhaupt keine mehrlagige Schichtstruktur notwendig ist, um den GMR-Effekt beobachten zu können. Es reichen auch granulare Legierungen, in denen ferromagnetischen Ausscheidungen in eine nicht-magnetische Matrix eingebettet sind.<sup>9</sup> Die nicht-magnetische Matrix übernimmt hierbei die Rolle der nicht-magnetischen Zwischenschichten. Gezielt kann man heute ferromagnetische Bereiche in einer nicht-magnetischen Matrix mit Hilfe von Clusterquellen herstellen. Mit solchen Apparaturen können im Atomstrahl gezielt ferromagnetische Cluster einer wohldefinierten Größe (typische Clustergrößen liegen im Bereich von einigen Nanometern), die zusammen mit einem nicht-magnetischen Material auf ein Substrat aufgebracht und dadurch in eine nicht-magnetischen Matrix eingebettet werden, definiert dargestellt werden. Im Nullfeld ist die Ausrichtung der Magnetisierung der einzelnen Cluster statistisch verteilt, mit einem genügend großen Feld können alle Cluster parallel ausgerichtet werden (siehe Abb. 2.7). Der in granularen Systemen erzielbare Magnetwiderstand ist allerdings üblicherweise nur halb so groß wie der in Schichtsystemen, da man bei ersteren von einer zufälligen in eine parallele und bei letzteren von einer anti-parallelen in eine parallele Konfiguration umschaltet.

Insgesamt zeigten mittlerweile viele Experimente zum Riesenmagnetowiderstand, dass dieser Effekt immer dann auftritt, wenn ferromagnetische Bereiche durch dünne, nicht-ferromagnetische Zwischenbereiche voneinander getrennt werden. Dünn bedeutet in diesem Zusammenhang, dass die Leitungselektronen den Zwischenbereich ohne Streuprozesse durchqueren können. Der Zwischenbereich kann dabei auch ein isolierendes Material sein, z.B. eine oxidische Tunnelbarriere. Wir gelangen dann zum Tunnelmagnetowiderstand, der im nächsten Abschnitt beschrieben wird.

### 2.1.5 Der Tunnelmagnetwiderstand – TMR

Der Tunnelmagnetowiderstand (TMR) wird in Tunnelkontakten erhalten, bei denen zwei ferromagnetische Elektroden durch eine dünne isolierende Tunnelbarriere entkoppelt werden. Elektronen können durch diese dünne Barriere zwischen den beiden Elektroden tunneln. Der Tunnelmagnetowiderstand beruht darauf, dass der Tunnelstrom von der relativen Orientierung der Magnetisierungsrichtung in den ferromagnetischen Elektroden abhängt.

<sup>9</sup>A. E. Berkowitz et al., Phys. Rev. Lett. **68**, 3745 (1992).

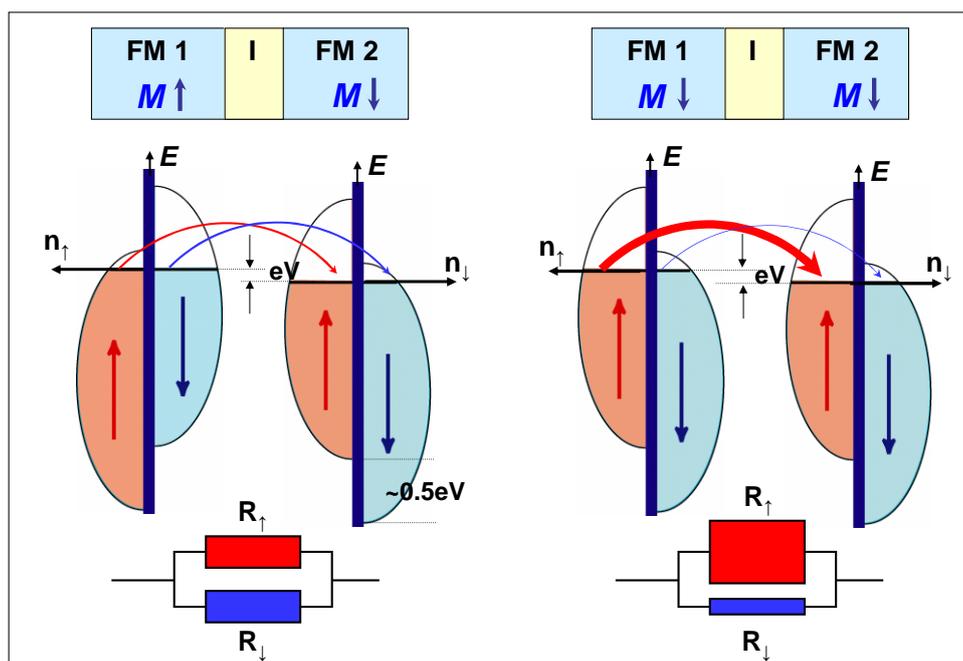


Abbildung 2.8: Schematische Darstellung der Zustandsdichten der Majoritäts- und Minoritätsspinzustände und der daraus resultierenden Tunnelwiderstände in einem ferromagnetischen Tunnelkontakt.

Unter der Annahme, dass die Spinrichtung beim Tunnelprozess erhalten bleibt, ist bei ferromagnetischen Elektroden die Tunnelwahrscheinlichkeit für die Majoritäts- und Minoritätsspinzustände nicht gleich. Dies kann anschaulich anhand von Abb. 2.8 verstanden werden. Bei paralleler (P) Magnetisierungsrichtung (rechtes Bild) erfolgt das Tunneln von Majoritäts- zu Majoritätsspinzuständen und von Minoritäts- zu Minoritätsspinzuständen. Bei antiparalleler (AP) Magnetisierungsrichtung (linkes Bild) erfolgt dagegen das Tunneln zwischen Majoritäts- und Minoritätsspinzuständen und umgekehrt. Da die Tunnelrate proportional zur Zustandsdichte der jeweiligen Anfangs- und Endzustände ist, führt dies zu unterschiedlichen Tunnelwiderständen in der AP- und P-Konfiguration. In der AP-Konfiguration erhalten wir eine Parallelschaltung von zwei gleichen Widerständen, während sich in der P-Konfiguration eine Parallelschaltung eines großen und eines kleinen Widerstands und damit ein insgesamt kleinerer Gesamtwiderstand ergibt. Wir definieren dann den so genannten TMR-Effekt oder *Tunnel Magnetoresistance* – TMR als

$$\text{TMR} \equiv -\frac{R_p - R_{ap}}{R_p} = \frac{R_{ap} - R_p}{R_p} \quad (2.1.7)$$

In der Literatur wird häufig auch der so genannte *Junction Magnetoresistance* – JMR verwendet, der durch

$$\text{JMR} \equiv -\frac{R_p - R_{ap}}{R_{ap}} = \frac{R_{ap} - R_p}{R_{ap}} \quad (2.1.9)$$

definiert ist. Für einen Tunnelkontakt, dessen ferromagnetische Elektroden unterschiedliche Koerzitivfelder besitzen, ergibt sich das in Abb. 2.9 gezeigte Verhalten. Starten wir z.B. bei

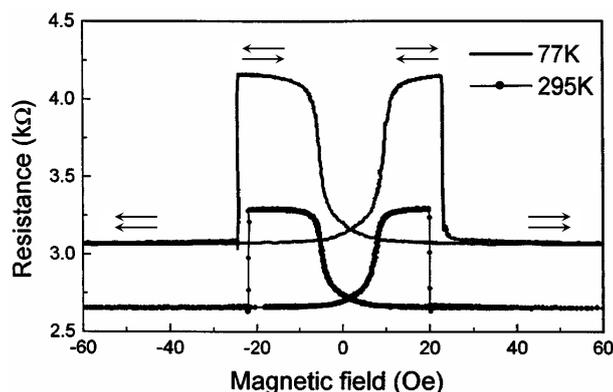


Abbildung 2.9: Magnetfeldabhängigkeit des Widerstands für einen  $\text{Co}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Permalloy}(\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20})$  Tunnelkontakt. Es wird ein TMR-Effekt von 20.2% bei Raumtemperatur und von 27.1% bei 77 K erreicht. Die Pfeile geben die Magnetisierungsrichtung der Elektroden in den jeweiligen Bereichen an (aus J. S. Moodera et al., Phys. Rev. Lett. 80, 2941 (1998)).

einem großen negativen Magnetfeld, so ist die Magnetisierung beider Elektroden parallel zu dieser Feldrichtung ausgerichtet. Es liegt eine P-Konfiguration mit niedrigem Widerstand vor. Erhöhen wir nun das angelegte Magnetfeld von negativen zu positiven Werten, so schaltet bei dem Koerzitivfeld der einen Elektrode zunächst nur dessen Magnetisierungsrichtung um. Es liegt dann eine AP-Konfiguration mit hohem Widerstand vor. Erhöhen wir das angelegte Feld weiter, so erreichen wir das Koerzitivfeld der zweiten Elektrode, diese schaltet ebenfalls um und es liegt wieder eine P-Konfiguration mit kleinem Widerstand vor. Wir können nun das Magnetfeld von großen positiven Werten zu negativen Werten fahren und erhalten das spiegelbildliche Verhalten.

Eine genaue Analyse des TMR wird zeigen, dass die Größe des TMR-Effekts vom Unterschied der Zustandsdichte der Majoritäts- (Spin  $\uparrow$ ) und Minoritätsspinzustände (Spin  $\downarrow$ ) an der Fermi-Kante abhängt. Für Übergangsmetalle und -legierungen (z.B. Co, Ni, Permalloy) erhält man TMR-Werte bis zu 50% (siehe auch Abb. 2.9). Bei einigen Übergangsmetalloxiden ist der Unterschied in der Zustandsdichte besonders groß, so dass hier sehr große TMR-Effekte von bis zu einigen 100% erhalten werden. Ein typisches Beispiel ist in Abb. 2.10 gezeigt.

### 2.1.6 Der kolossale Magnetwiderstand – CMR

Der kolossale<sup>10</sup> Magnetwiderstand in gemischtvalenten Manganoxiden wurde im Prinzip bereits in den 50er Jahren von **Jonker** und **van Santen**<sup>11</sup> in den Philips-Forschungslabors entdeckt. Allerdings standen damals noch keine großen Magnetfelder zur Verfügung, so dass der Effekt in seiner ganzen Tragweite damals noch nicht erkannt wurde. Erst durch die Arbeiten von **Kusters** et al.<sup>12</sup> (1989) und von **von Helmholt** et al.<sup>13</sup> (1993), die einen sehr großen negativen Magnetwiderstandseffekt in epitaktischen Schichten bei Raumtemperatur fanden (siehe Abb. 2.11), wurde eine starke Forschungsaktivität zum CMR-Effekt ausgelöst.

Im Prinzip kann der CMR-Effekt in die Kategorie der negativen MR-Effekte aufgrund von Spinunordnung eingereiht werden. Da der CMR-Effekt später ausführlich diskutiert wird, soll hier

<sup>10</sup>Bei der Entdeckung des CMR war der Begriff "riesig" bereits für den sehr großen negativen MR in metallischen Übergittern aufgebraucht. Man hat deshalb das Wort "kolossal" verwendet.

<sup>11</sup>J. H. van Santen, G. H. Jonker, Physica XVI, 599 (1950).

<sup>12</sup>R. M. Kusters, J. Singleton, D. A. Keen, R. McGreevy, W. Hayes, Physica B 155, 362 (1989)

<sup>13</sup>R. von Helmholt, J. Wecker, B. Holzapfel, L. Schultz, and K. Samwer, Phys. Rev. Lett. 71, 2331 (1993).

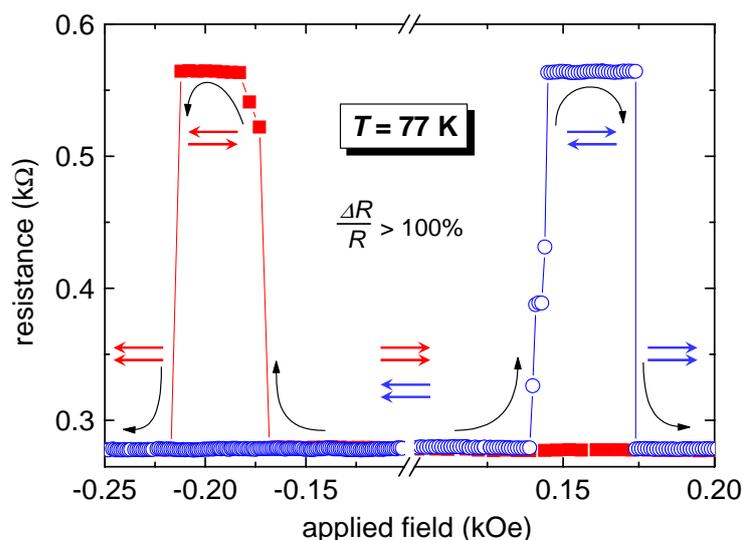


Abbildung 2.10: Magnetfeldabhängigkeit des Widerstands für einen  $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$  Korngrenzen-tunnelkontakt bei 77 K. Die Pfeile geben die Magnetisierungsrichtung der Elektroden in den jeweiligen Bereichen an (aus J. B. Philipp, C. Höfener, S. Thienhaus, J. Klein, L. Alff, and R. Gross, Phys. Rev. B **62**, Rapid. Com., R9248 (2000)).

nur eine Plausibilitätsbetrachtung gemacht werden. Wichtig für das Verständnis des Effekts ist die gemischte Valenz der Mn-Ionen und das Vorhandensein lokalisierter magnetischer Momente in dotierten Manganaten. In Abb. 2.12 ist die kubische Perowskit-Struktur von  $\text{LaMnO}_3$  gezeigt. In der undotierten Substanz  $\text{La}^{3+}\text{Mn}^{3+}\text{O}_3^{2-}$  liegen nur  $\text{Mn}^{3+}$ -Ionen vor.  $\text{Mn}^{3+}$  hat 4 Elektronen in der  $3d$ -Schale, die aufgrund der starken Hund'schen Austauschkopplung (etwa 1.5 eV) alle mit parallelem Spin in die  $3d$ -Orbitale eingebaut werden. Es resultiert daraus ein Gesamtspin von  $S = 2$ . Diese Substanz ist isolierend und ordnet unterhalb von etwa 140 K antiferromagnetisch.

Das  $\text{La}^{3+}$  wird teilweise durch  $\text{Sr}^{2+}$  ersetzt, wodurch Mischkristalle der Form  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Mn}^{3+}\text{Mn}^{4+}\text{O}_3^{2-}$  erhalten werden, in denen sowohl  $\text{Mn}^{3+}$  als auch  $\text{Mn}^{4+}$ -Ionen, d.h. eine gemischte Valenz der Mn-Ionen vorliegt. Diese dotierten Manganate sind kristallographisch stabil und besitzen für Dotierungen  $0.15 < x < 0.5$  einen Übergang von einer paramagnetisch-halbleitenden zu einer ferromagnetisch-metallischen Phase. Die Curie-Temperatur liegt abhängig von der Sr-Dotierung zwischen etwa 100 und 380 K, wobei das maximale  $T_C$  für  $x \simeq 1/3$  erhalten wird (siehe hierzu das in Abb. 2.13 gezeigte vereinfachte Phasendiagramm von  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ).

Der Transportmechanismus in den gemischtvalenten Manganaten beruht darauf, dass das Überschusselektron des  $\text{Mn}^{3+}$ -Ions beweglich (itinerant) ist. Die restlichen 3 Elektronen des  $\text{Mn}^{3+}$ - bzw. die 3 Elektronen des  $\text{Mn}^{4+}$ -Ions sind lokalisiert und resultieren in lokalisierten Spinmomenten mit  $S = 3/2$ . Das bewegliche Überschusselektron kann von einem  $\text{Mn}^{3+}$ -Ion über das dazwischenliegende Sauerstoffion zu einem benachbarten  $\text{Mn}^{4+}$ -Ion hüpfen, wodurch die Valenz der beteiligten Ionen sich gerade umdreht. Diesen Hüpfprozess können wir uns beliebig fortgesetzt denken, so dass sich die itineranten Überschusselektronen prinzipiell einfach in dem gemischtvalenten System bewegen können. Entscheidend ist nun aber dabei, dass die Hüpfwahrscheinlichkeit sehr stark von der relativen Orientierung der Spinmomente der lokalisierten Elektronen abhängt. Aufgrund der sehr starken Hund'schen Kopplung (etwa 1.5 eV) ist der Spin des beweglichen Elektrons immer parallel zu dem der lokalisierten Elektronen ausgerichtet. Ein Hüpfprozess zum Nachbarplatz kommt deshalb nur dann zustande, wenn die Spinmomente der lokalisierten Elektronen auf den Nachbarplätzen parallel stehen.

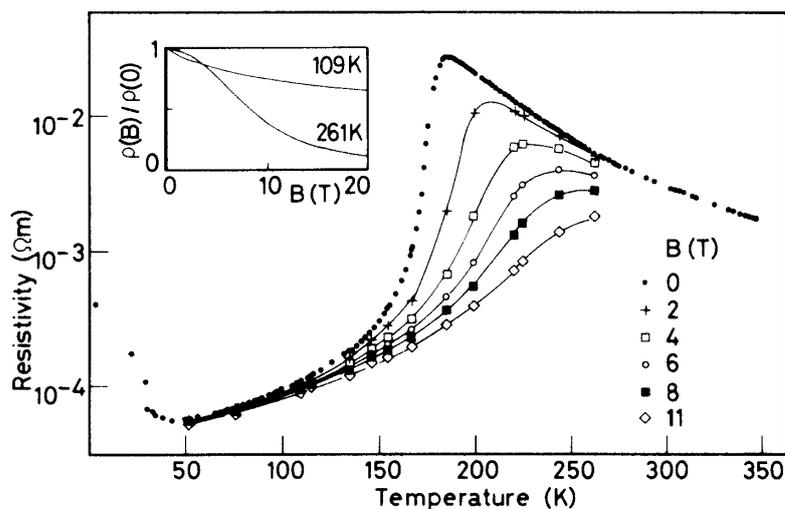


Abbildung 2.11: Elektrischer Widerstand von  $\text{Nd}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{MnO}_3$  als Funktion der Temperatur für verschiedene Magnetfelder (aus R. M. Kusters et al., *Physica B* 155, 362 (1989)).

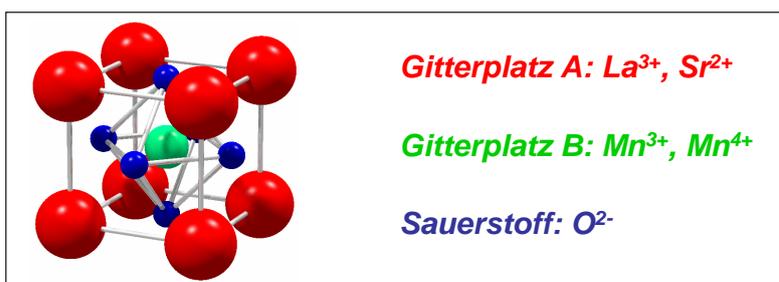


Abbildung 2.12:  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ : Schematische Darstellung der Perowskitstruktur. Die La- und Sr-Ionen werden statistisch verteilt auf den A-Platz eingebaut.

Das heißt, hohe Beweglichkeit der Elektronen (oder gute metallische Leitfähigkeit) und ferromagnetische Ausrichtung der Spinmomente sind stark aneinander gekoppelt. Theoretisch wird dieser Sachverhalt durch das *Doppelaustausch-Modell* von Zener<sup>14</sup> beschrieben, das unten eingehend diskutiert wird.

Aufgrund der Kopplung von guter Leitfähigkeit und ferromagnetischer Spin-Ausrichtung können wir leicht verstehen, wieso der Übergang vom paramagnetischen in den ferromagnetischen Zustand auch mit einem Isolator/Metall-Übergang verbunden ist. In Abb. 2.14 ist der Hüpfprozess der itineranten Elektronen zwischen einem  $\text{Mn}^{3+}$ - und einem  $\text{Mn}^{4+}$ -Ion über das  $\text{O}^{2-}$ -Ion im ferromagnetischen und paramagnetischen Zustand schematisch gezeigt. Im paramagnetischen Bereich unterdrückt die Unordnung der Spinmomente der lokalisierten Elektronen das Hüpfen der itineranten Elektronen sehr stark. Da die Hund'sche Kopplung sehr groß ist, müßte hier für ein Hüpfen zwischen Nachbarplätzen eine Energie in der Größenordnung von 1 eV aufgebracht werden.

Der kolossale Magnetwiderstand, der in der Nähe der Curie-Temperatur auftritt (siehe Abb. 2.11), kann in obigem Bild dadurch verstanden werden, dass ein von außen angelegtes Magnetfeld die Unordnung im Spinsystem reduziert und dadurch den elektrischen Wider-

<sup>14</sup>C. Zener, *Phys. Rev.* **82**, 403 (1951); P. W. Anderson, H. Hasegawa, *Phys. Rev.* **100**, 675 (1955); P. G. deGennes, *Phys. Rev.* **118**, 141 (1960).

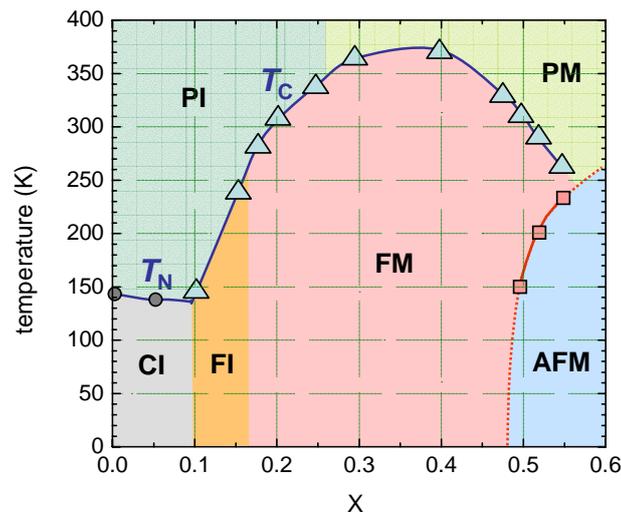


Abbildung 2.13: Vereinfachtes Phasendiagramm von  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  als Funktion der Dotierung  $x$  (nach Y. Tokura und Y. Tomioka, J. Magn. Magn. Mater. **200**, 1 (1999)). FM: ferromagnetisches Metall, FI: ferromagnetischer Isolator, PM: paramagnetisches Metall, PI: paramagnetischer Isolator, AFM: Antiferromagnet, CI: Isolator mit gekanteter Spinstruktur,  $T_N$ : Néel-Temperatur,  $T_C$ : Curie-Temperatur.

stand stark erniedrigt. Weit unterhalb von  $T_C$  liegt bereits ein geordnetes Spinsystem vor, so dass der Effekt des angelegten Magnetfeldes klein ist. Weit oberhalb von  $T_C$  reicht die Wirkung des Magnetfeldes nicht mehr aus, um die thermisch induzierte Unordnung genügend zu reduzieren.

### 2.1.7 Der außergewöhnliche Magnetwiderstand – EMR

Der außergewöhnliche Magnetwiderstand ist ein positiver, quadratischer Magnetwiderstandseffekt. Er tritt auf in Halbleiter/Metall-Hybridstrukturen und wird verursacht durch eine Umverteilung der Strompfade beim Anlegen eines magnetischen Feldes aufgrund des Hall-Effekts. Er wurde bereits 1963 von Weiß und Wilhelm im Halbleiter InSb mit metallischen Einschlüssen aus NiSb beschrieben<sup>15</sup>. Zwei Jahre später schlug einer der Autoren ein auf diesem Effekt beruhendes Bauteil (das er *Feldplatte* nannte) zur Messung magnetischer Felder vor. Es zeigte einen MR-Effekt von 1800% bei einem Feld von 1 Tesla<sup>16</sup>. Erst knapp vierzig Jahre später wurde der Effekt von Stuart Solin wiederentdeckt<sup>17</sup> und zur Unterscheidung von anderen Magnetwiderstandseffekten *extraordinary magneto resistance* (EMR) genannt. Heute erreicht man im System InSb/Au bis zu 115.000% EMR-Effekt bei 1 Tesla und tiefen Temperaturen<sup>18</sup>.

Die Ursache des EMR-Effekts illustriert Abb. 2.15. (a) In einem Halbleiter fließe ohne Magnetfeld ein elektrischer Strom (blau) von links nach rechts. Schaltet man nun ein äußeres Magnetfeld (grün) an, das aus der Zeichenebene heraus zeigt (b), so werden die Elektronen nach oben abgelenkt. Dadurch baut sich ein elektrisches Feld (rot) auf, das von unten nach oben gerichtet ist. Dieses ist das bekannte Hall-Feld, das auf die fließenden Elektronen nun eine Kraft nach unten ausübt. Im Gleichgewichtsfall kompensieren sich die Kraftwirkungen dieses Hall-Feldes

<sup>15</sup>H. Weiß und M. Wilhelm, Z. Phys. **176**, 399 (1963)

<sup>16</sup>Herbert Weiß, IEEE Transactions on Magnetism **Mag.-2**, 540 (1966)

<sup>17</sup>S.A. Solin, Tineke Thio, D.R. Hines, J.J. Heremans, Science **289**, 1530 (2000)

<sup>18</sup>C.H. Möller, O. Kronenwerth, D. Grundler, W. Hansen, Ch. Heyn und D. Heitmann, Appl. Phys. Lett. **80**, 3988 (2002)

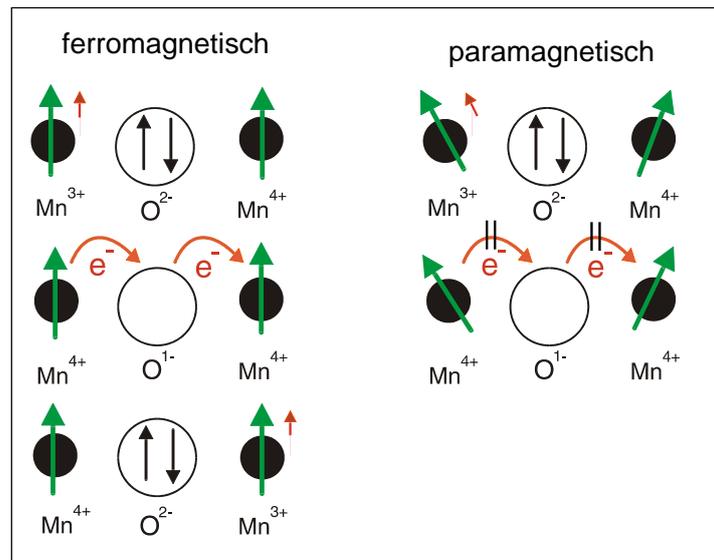


Abbildung 2.14: Schematische Darstellung des Ladungstransfers zwischen benachbarten  $\text{Mn}^{3+}$ - und  $\text{Mn}^{4+}$ -Ionen über das diamagnetische  $\text{O}^{2-}$ -Ion im Doppelaustauschbild.

und des Magnetfeldes, so dass die Elektronen sich wieder auf geraden Bahnen nach rechts bewegen. Die geschilderte Situation ändert sich grundlegend, wenn der Halbleiter einen (sagen wir kugelförmigen) metallischen, gut leitenden Einschluss aufweist. Ohne äußeres Magnetfeld (c) *schließt* der Metallkörper Teile des Halbleiters *kurz*, so dass der elektrische Strom einen geringeren Widerstand spürt als ohne Einschluss. Schaltet man nun ein äußeres Magnetfeld an (d), so wird das entstehende Hall-Feld durch den metallischen Einschluss *verbogen*, denn die Oberfläche des Einschlusses stellt eine Äquipotentialfläche dar, auf der die elektrischen Feldlinien des Hall-Feldes senkrecht stehen müssen. Die Kraftwirkung dieses verbogenen Hall-Feldes führt zu einer Umverteilung der elektrischen Strompfade gegenüber (c), wobei im Idealfall der elektrische Strom ganz aus dem gut leitenden, metallischen Einschluss in den schlechter leitenden Halbleiter *hinausgedrängt* wird. Deswegen spürt der elektrische Strom einen höheren Widerstand als ohne Magnetfeld. Der erreichbare magnetoresistive Effekt hängt von den spezifischen Widerständen der verwendeten Materialien und der Probengeometrie ab.

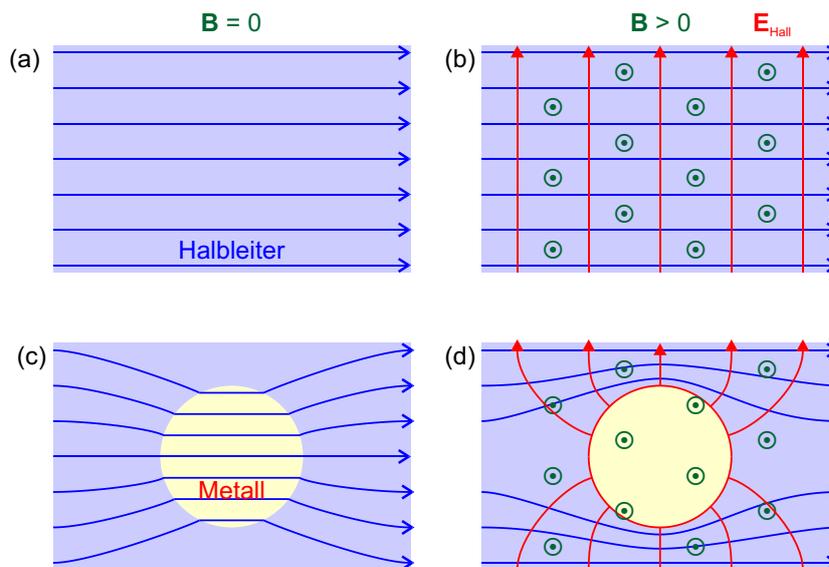


Abbildung 2.15: Illustration zum EMR-Effekt. Für Einzelheiten siehe Text.

## 2.2 Elektrischer Transport in unmagnetischen Metallen

Elektronen, die sich in einem Festkörper unter der Wirkung einer äußeren Kraft bewegen, werden durch Abweichungen von der strengen Periodizität gestreut, wodurch ihre Bewegung eingeschränkt wird. Ohne Streuprozesse würden sich Elektronen, die einmal beschleunigt worden sind, für immer in eine Vorzugsrichtung weiterbewegen. Die Erfahrung zeigt aber, dass ein endlicher Widerstand vorhanden ist, der durch Streuprozesse verursacht wird. In der Drude- und Sommerfeld-Theorie des freien Elektronengases wird das Vorhandensein von Streuprozessen durch die Einführung einer mittleren freien Weglänge  $\ell$  berücksichtigt. Anschaulich können wir uns das Zustandekommen von Streuung wie folgt klar machen: In einem perfekten Kristall stellen die Bloch-Wellen  $\Psi$  stationäre Lösungen der Schrödinger-Gleichung dar. Da in diesem Fall  $\Psi^*\Psi$  zeitunabhängig ist, beschreiben diese Lösungen die ungestörte Ausbreitung von Elektronenwellen.<sup>19</sup> Störungen der stationären Bloch-Zustände kommen nun durch (i) Abweichungen von der strengen Periodizität eines Festkörpers (Defekte, Gitterschwingungen) und durch (ii) die Elektron-Elektron-Wechselwirkung zustande, wobei letztere natürlich nicht in der Ein-Elektron-Näherung enthalten ist. Eine Übersicht zu den in Festkörpern auftretenden Streuprozessen wird in Abschnitt 2.2.5 gegeben.

### 2.2.1 Boltzmann-Gleichung und Relaxationszeit

Zur Berechnung der elektrischen und thermischen Transporteigenschaften eines Festkörpers benötigt man neben der Kenntnis der Fermi-Fläche vor allem Informationen darüber, wie sich die Besetzungswahrscheinlichkeit von Zuständen zeitlich ändert. Für diese Änderungen sind drei charakteristische Mechanismen verantwortlich:

- **treibende externe Kräfte:**  
(z.B aufgrund externer elektrischer und magnetischer Felder oder Temperaturgradienten)

<sup>19</sup>Dieses Ergebnis gilt auch für Wellenpakete, die lokalisierte Elektronen beschreiben.

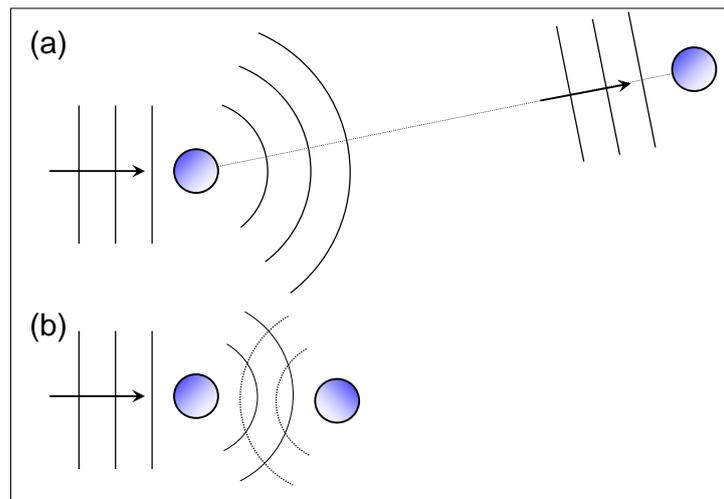


Abbildung 2.16: Schematische Darstellung von Elektronenwellen, die durch Verunreinigungen gestreut werden. Der Abstand der Streuer entspricht der mittleren freien Weglänge, der Abstand der Wellenfronten der Fermi-Wellenlänge  $\lambda_F = 2\pi/k_F$ . (a)  $k_F\ell \gg 1$  und (b)  $k_F\ell \sim 1$ .

- Diffusion aufgrund von Schwankungen der räumlichen Elektronendichte
- dissipative Effekte durch Streuprozesse

Das Wechselspiel dieser Mechanismen wird durch die so genannte *Boltzmann-Gleichung* beschrieben. Die Boltzmann-Gleichung beschreibt die Änderung der Gleichgewichtsverteilungsfunktion der Ladungsträger in einem Festkörper (Abweichungen von einer symmetrischen Gleichverteilung der Zustände im  $k$ -Raum) durch äußere Kräfte und Streuprozesse. Sie resultiert aus einer halbklassischen Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit. Dabei wird angenommen, dass der Impuls  $\mathbf{k}$  der Elektronen wohldefiniert ist, so dass  $\mathbf{k}$  eine gute Quantenzahl ist. Diese Näherung ist gut, solange die Fermi-Wellenlänge  $\lambda_F = 2\pi/k_F$  der Elektronen klein gegenüber der mittleren freien Weglänge  $\ell$ , d.h. dem mittleren Abstand zwischen zwei Streuern ist. In Abb. 2.16 sind die beiden Fälle  $k_F\ell \gg 1$  und  $k_F\ell \sim 1$  veranschaulicht. Für  $k_F\ell \gg 1$  ist der Abstand zwischen zwei Streuern groß, so dass die Elektronenwelle beim zweiten Streuer wiederum als ebene Welle betrachtet werden kann. Wir werden in diesem Abschnitt nur diesen Fall betrachten.

Die Gleichgewichtsverteilung ist eine *Fermi-Dirac-Verteilung*

$$f_0(E(\mathbf{k})) = \frac{1}{e^{[E(\mathbf{k})-\mu]/k_B T} + 1} \quad (2.2.1)$$

wobei  $\mu$  das chemische Potential ist. Für einen homogenen Festkörper ist  $f_0$  unabhängig vom Ort. Unter der Wirkung von äußeren Kräften und durch Streuprozesse geht diese Gleichgewichtsverteilung in eine Nichtgleichgewichtsverteilung über:  $f_0 \rightarrow f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ . Um die Verteilungsfunktion zu bestimmen, vernachlässigen wir zunächst Streuprozesse und betrachten die Verteilung  $f$  von Ladungsträgern in einem Testvolumen zur Zeit  $t - dt$  und zur Zeit  $t$ , d.h. wir betrachten die Änderung von  $f$  im Zeitintervall  $[t - dt, t]$  (siehe Abb. 2.17):

$$\begin{array}{lll} \text{Zeit } t: & \mathbf{r} & \mathbf{k} \\ \text{Zeit } t - dt : & \mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k})dt & \mathbf{k} - \frac{\mathbf{F}}{\hbar} dt \end{array}$$

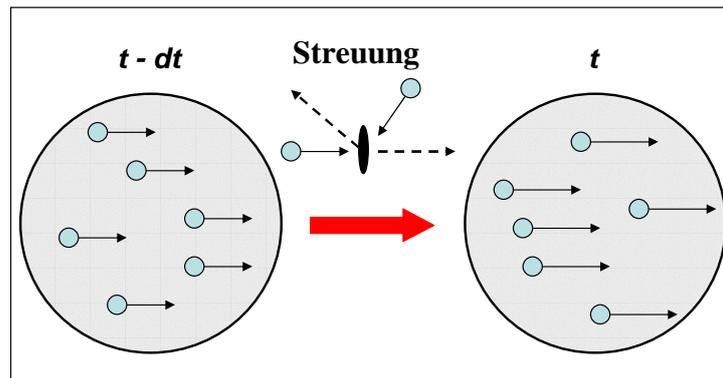


Abbildung 2.17: Die Dichte der Ladungsträger mit Impuls  $\mathbf{k}$  in einem Testvolumen am Ort  $\mathbf{r}$  zur Zeit  $t$  (rechts) ergibt sich aus der Vorgeschichte, d.h. aus der Dichte der Ladungsträger am Ort  $\mathbf{r} - \mathbf{v}(\mathbf{k})dt$  mit Impuls  $\mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt$  zur Zeit  $t - dt$  (links).

Hierbei ist  $\mathbf{F}$  die äußere Kraft, die z.B. durch elektrische ( $\mathbf{E}$ ) und magnetische Felder ( $\mathbf{B}$ ) verursacht werden kann:

$$\mathbf{F} = e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) . \quad (2.2.2)$$

In Abwesenheit von Stößen muss jedes Elektron, das sich zur Zeit  $t - dt$  am Ort  $\mathbf{r} - \mathbf{v}dt$  befindet und den Impuls  $\mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt$  besitzt, zur Zeit  $t$  am Ort  $\mathbf{r}$  ankommen und den Impuls  $\mathbf{k}$  besitzen.<sup>20</sup> Wir erhalten somit

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{r} - \mathbf{v}dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt, t - dt) . \quad (2.2.3)$$

Berücksichtigen wir jetzt zusätzlich Streuprozesse, so muss ein Korrekturterm hinzugefügt werden und wir erhalten

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{r} - \mathbf{v}dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt, t - dt) + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Streu}} dt . \quad (2.2.4)$$

Da  $[f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) - f(\mathbf{r} - \mathbf{v}dt, \mathbf{k} - \mathbf{F}/\hbar dt, t - dt)]/dt$  gerade der zeitlichen Ableitung  $\left( \frac{df}{dt} \right)$  entspricht, erhalten wir durch Entwickeln

$$\left( \frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{dt} \right) = \left( \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{r}} \right) \left( \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \right) + \left( \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{k}} \right) \left( \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \right) + \dots , \quad (2.2.5)$$

wobei wir nur Terme 1. Ordnung berücksichtigt haben. Berücksichtigen wir noch den Streuterm, erhalten wir eine Differentialgleichung 1. Ordnung, die man als **Boltzmann-Gleichung** bezeichnet:

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{total}} = -\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Streu}} . \quad (2.2.7)$$

Der Term  $\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f$  stellt hierbei den Diffusionsterm dar, der Term  $\frac{e}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f$  resultiert aus der äußeren Kraft.

<sup>20</sup>Nach dem Liouville'schen Satz der klassischen Mechanik bleibt die Dichte im Phasenraum, d.h. die Verteilungsfunktion, in Abwesenheit von Stößen erhalten.

Im stationären Zustand ändert sich die Konzentration der Elektronen im betrachteten Testvolumen nicht ( $\partial f/\partial t = 0$ ). Aus der Boltzmann-Gleichung sehen wir sofort, dass sich die Driftterme und die Streuterme hier die Waage halten müssen. Wir können dann vereinfacht schreiben:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{total}} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Diff}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Kraft}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Streu}} = 0 . \quad (2.2.8)$$

Wenn kein Magnetfeld anliegt und außerdem  $f$  nicht von  $\mathbf{r}$  abhängt (homogene Probe, keine Temperaturgradienten), vereinfacht sich Gl.(2.2.6) zu

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Streu}} = \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = e\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \left(\frac{\partial f}{\partial E}\right) , \quad (2.2.9)$$

wobei die Beziehung  $E = \hbar^2 k^2/2m$  benutzt wurde, mit deren Hilfe wir  $dK = dE/\hbar v$  erhalten.

Ein Problem bei der Lösung der Boltzmann-Gleichung stellt die Behandlung der Streuprozesse dar. Da der Streuterm im Allgemeinen eine Integralgleichung darstellt,<sup>21</sup> resultiert eine mehr oder weniger komplexe Integro-Differentialgleichung.

Zur weiteren Vereinfachung werden häufig zwei Näherungen benutzt, nämlich

- die Näherung kleiner Abweichungen vom Gleichgewicht (linearisierte Boltzmann-Gleichung) und
- die Relaxationszeit-Näherung,

die im Folgenden kurz erläutert werden sollen.

### Linearisierte Boltzmann-Gleichung

Wir nehmen an, dass die Verteilung im stationären Zustand nicht stark von der Gleichgewichtsverteilung  $f_0(\mathbf{k})$  abweicht, und schreiben<sup>22</sup>

$$g(\mathbf{k}) = f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k}) . \quad (2.2.10)$$

Durch Einsetzen von (2.2.10) in (2.2.6) erhalten wir für den stationären Zustand

$$-\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f - \frac{e}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Streu}} \quad (2.2.11)$$

bzw.<sup>23</sup>

$$-\frac{e}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_0(\mathbf{k}) = - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Streu}} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} g(\mathbf{k}) + \frac{e}{\hbar} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) . \quad (2.2.12)$$

<sup>21</sup>  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Streu}} \propto \int dk' ([1 - f(k)]w_{kk'}f(k') - [1 - f(k')]w_{k'k}f(k))$ , wobei  $w_{kk'}$  die Wahrscheinlichkeit für eine Streuung von Zustand  $\Psi_k(\mathbf{r})$  in den Zustand  $\Psi_{k'}(\mathbf{r})$  darstellt.

<sup>22</sup> Falls die Temperatur räumlich variiert, nimmt man an, dass an jedem Punkt lokal die Temperatur  $T(\mathbf{r})$  definiert ist und schreibt  $g(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = f(\mathbf{k}, \mathbf{r}) - f_0(\mathbf{k}, T(\mathbf{r}))$

<sup>23</sup> Hierbei wird  $\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_0(\mathbf{k}) = 0$  gesetzt. Bei Vorhandensein eines Temperaturgradienten muss auf der linken Seite der Gleichung noch der Term  $-\mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial T} \nabla T$  hinzugefügt werden.

Mit Hilfe von (2.2.1) und des kinematischen Prinzips,  $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$ , erhält man dann die *linearisierte Boltzmann-Gleichung*<sup>24</sup>

$$\left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot (e\mathbf{E}) = - \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Streu}} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} g(\mathbf{k}) + \frac{e}{\hbar} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) . \quad (2.2.15)$$

Hierbei wurde der Term  $(\mathbf{E} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}))$  weggelassen, da er von zweiter Ordnung in  $\mathbf{E}$  ist und somit Abweichungen vom Ohm'schen Gesetz entspricht. Der Term  $\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{B})$  verschwindet identisch, wodurch das Magnetfeld nur auf der rechten Seite von (2.2.13) erscheint.

### Relaxationszeit-Ansatz:

Für die Beschreibung des Streutermes setzen wir die Relaxationszeit-Näherung

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Streu}} = - \frac{f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} = - \frac{g(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} \quad (2.2.16)$$

an, wobei in räumlich inhomogenen Systemen  $\tau(\mathbf{k})$  durch  $\tau(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  ersetzt werden muss. Das heisst, wir führen eine *Relaxationszeit*  $\tau$  ein.

### Relaxationszeit-Ansatz:

Schalten wir eine äußere Kraft zum Zeitpunkt  $t = 0$  ab, so erhalten wir aus Gl.(2.2.6) für  $t \geq 0$

$$\begin{aligned} \frac{dg(\mathbf{k})}{dt} &= - \frac{g(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} \\ g(\mathbf{k}, t) &= g(\mathbf{k}, 0) e^{-t/\tau(\mathbf{k})} . \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

D.h.,  $g$  relaxiert mit der Zeitkonstante  $\tau$  auf Null. Wichtig ist hierbei, dass eine konstante Relaxationszeit, die nicht von der Energie abhängt, angenommen wird.

### Stationärer, homogener Fall

Für den stationären ( $df/dt = 0$ ) homogenen ( $\nabla_{\mathbf{r}} f = 0$ ) Fall ergibt sich mit der Relaxationszeitnäherung für  $\mathbf{B} = 0$  aus (2.2.13)<sup>25</sup>

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot e\mathbf{E} = \frac{g(\mathbf{k})}{\tau(\mathbf{k})} . \quad (2.2.18)$$

<sup>24</sup>Bei Vorhandensein eines Temperaturgradienten muss auf der linken Seite der Gleichung der Term  $\left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \left\{ -\frac{E(\mathbf{k}) - \mu}{T} \nabla T \right\}$  eingefügt werden.

<sup>25</sup>Ohne Linearisierung müsste auf der linken Seite  $-\frac{\partial f_0}{\partial E}$  durch  $-\frac{\partial f}{\partial E}$  ersetzt werden. Gl.(2.2.18) kann dann nur iterativ gelöst werden, indem man als Anfangsverteilung die Gleichgewichtsverteilung  $f_0$  einsetzt. Einsetzen von  $f_0$  ergibt eine Lösung, die linear in  $E$  ist. Einsetzen dieser Lösung ergibt dann eine Lösung, die quadratisch in  $E$  ist, usw..

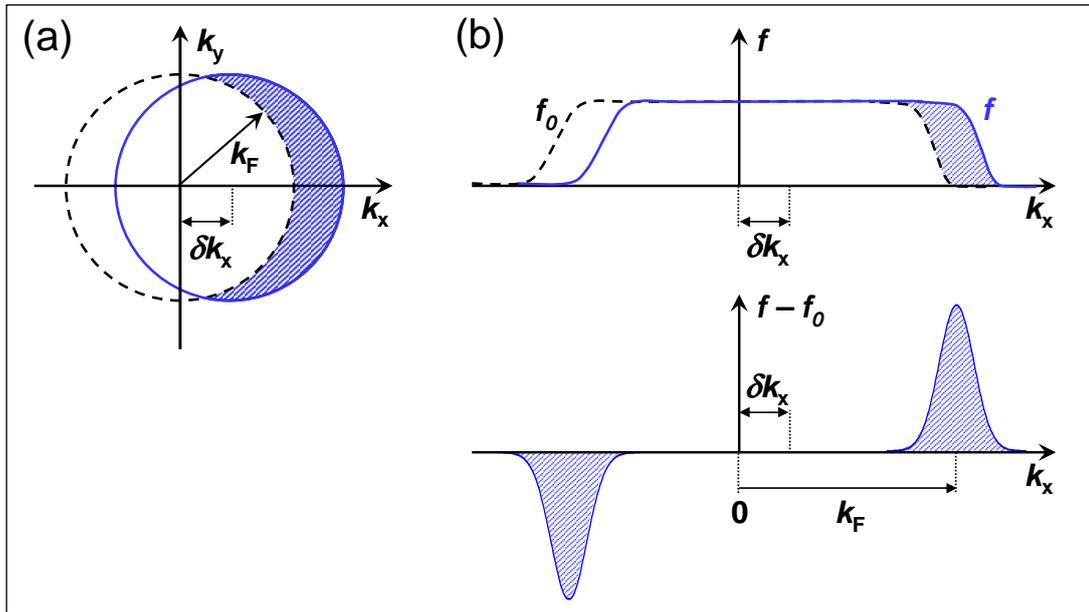


Abbildung 2.18: Auswirkung eines konstanten elektrischen Feldes  $E_x$  auf die  $k$ -Raumverteilung von quasi-freien Elektronen: (a) Die Fermi-Kugel der Gleichgewichtsverteilung ist um den Betrag  $\delta k_x = e\tau E_x/\hbar$  verschoben. (b) Die neue Verteilungsfunktion weicht von der Gleichgewichtsverteilung nur in der Nähe der Fermi-Energie signifikant ab.

Schreiben wir (2.2.18) als  $f(\mathbf{k}) - f_0(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k}) = -\frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{e\mathbf{E}\tau}{\hbar}$ , so sehen wir, dass  $f(\mathbf{k})$  als Entwicklung von  $f_0(\mathbf{k})$  aufgefasst werden kann und wir können schreiben<sup>26</sup>

$$f(\mathbf{k}) = f_0\left(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar}\tau(\mathbf{k})\mathbf{E}\right). \quad (2.2.19)$$

Dies entspricht einer Fermi-Verteilungsfunktion, die um den Betrag  $e\tau\mathbf{E}/\hbar$  gegenüber der Gleichgewichtsverteilungsfunktion im  $k$ -Raum verschoben ist (siehe hierzu Abb. 2.18).

Es ist wichtig, sich klar zu machen, was mit der verschobenen Fermi-Kugel in Abb. 2.18 nach Abschalten der äußeren Kraft passiert. Es ist anschaulich klar, dass eine Relaxation in den Gleichgewichtszustand erfolgt. Hierzu sind aber inelastische Streuprozesse notwendig. Falls nur elastische Streuprozesse vorliegen würden, würde sich die Fermi-Kugel, wie in Abb. 2.19 gezeigt ist, aufblähen.

## 2.2.2 Elektrische Leitfähigkeit

Um die elektrische Leitfähigkeit zu berechnen, betrachten wir zunächst die Stromdichte

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \overbrace{\frac{1}{2}}^{\text{Spin}} \overbrace{\left(\frac{1}{2\pi}\right)^3}^{\text{Zustandsdichte}} \int e\mathbf{v}(\mathbf{k})f(\mathbf{k})d\mathbf{k} \\ &= \frac{1}{4\pi^3} \int e\mathbf{v}(\mathbf{k})g(\mathbf{k})d\mathbf{k} \quad \text{da} \quad \int e\mathbf{v}(\mathbf{k})f_0(\mathbf{k})d\mathbf{k} \equiv 0 \\ &= \frac{1}{4\pi^3} \int \int e^2\tau\mathbf{v}(\mathbf{k})(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right) \frac{dS_E}{\hbar v(k)} dE. \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

<sup>26</sup>Tatsächlich gilt mit dem Taylor'schen Theorem  $f(\mathbf{k}) = f_0(\mathbf{k}) - \frac{\partial f_0(\mathbf{k})}{\partial E(\mathbf{k})} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{e\tau(\mathbf{k})}{\hbar} \mathbf{E} = f_0\left(\mathbf{k} - \frac{e\tau(\mathbf{k})}{\hbar} \mathbf{E}\right)$

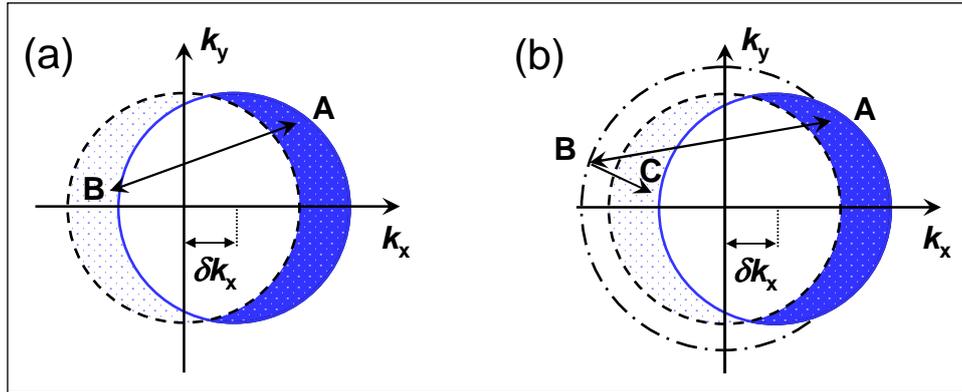


Abbildung 2.19: Elektronstreuungsprozesse im  $k$ -Raum. Die gestrichelte Linie stellt die Fermi-Fläche im Gleichgewichtszustand für  $E = 0$  dar. Bei Abschalten des elektrischen Feldes relaxiert die Fermi-Fläche in den Gleichgewichtszustand zurück und zwar durch Streuprozesse von besetzten in unbesetzte Zustände. (a) Da die Zustände  $A$  und  $B$  unterschiedliche Energien (unterschiedliche Abstände von  $k = 0$  haben), sind dazu inelastische Streuprozesse notwendig. (b) Für rein elastische Streuung würde die Fermi-Fläche aufgeweitet.

Dabei wurde das Volumenintegral im  $k$ -Raum ( $dk$ ) in Integrale über Flächen konstanter Energie ( $dS_E dE$ ) überführt, wobei die Beziehung  $dk = dS_E dk_{\perp} = dS_E \frac{dE}{\nabla_k E} = dS_E \frac{dE}{\hbar v(k)}$  benutzt wurde.

Aufgrund der geringen Temperaturverschmierung der Fermi-Verteilung ( $k_B T \ll E_F$ ) lässt sich  $\left(-\frac{\partial f_0}{\partial E}\right)$  durch eine  $\delta$ -Funktion  $\delta(E - E_F)$  ersetzen und wir erhalten ein Integral über die Fermi-Fläche  $S_F$ .

$$\mathbf{J} = \frac{1}{4\pi^3} \frac{e^2 \tau}{\hbar} \int \frac{\mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) dS_F}{v(k)} \cdot \mathbf{E} \quad (2.2.21)$$

Vergleichen wir diesen Ausdruck mit der üblichen makroskopischen Gleichung  $\mathbf{J} = \hat{\sigma} \cdot \mathbf{E}$ , in der  $\hat{\sigma}$  ein Tensor ist, so gilt

$$\hat{\sigma} = \frac{1}{4\pi^3} \frac{e^2 \tau}{\hbar} \int \frac{\mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) dS_F}{v(k)} \quad (2.2.23)$$

In Kristallen mit kubischer Symmetrie reduziert sich der *Leitfähigkeitstensor*  $\hat{\sigma}$  zu einem Skalar. Nehmen wir an, dass  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{J}$  beide in  $x$ -Richtung zeigen, so erhalten wir im Integranden  $(\mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E})_x = v_x^2 E$ , was ein Drittel des Betrages vom Quadrat der Gesamtgeschwindigkeit  $v^2 E$  ausmacht. Somit erhalten wir<sup>27</sup>

$$\sigma = \frac{1}{4\pi^3} \frac{e^2 \tau}{\hbar} \frac{1}{3} \int v dS_F \quad (2.2.24)$$

$$= \frac{1}{4\pi^3} \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{3} \int \ell dS_F \quad (2.2.25)$$

<sup>27</sup>Der Ausdruck für die Leitfähigkeit zeigt anschaulich, was in Metallen geschieht, wenn die Fläche bei der Integration durch Zonengrenzen reduziert wird. Er zeigt auch, wie Gittereffekte, die die effektive Geschwindigkeit der Elektronen auf der Fermi-Fläche verringern, sich auf die Leitfähigkeit auswirken.

wobei die mittlere freie Weglänge  $\ell = \tau v$  eingeführt wurde.

Es ist bemerkenswert, dass Gl.(2.2.19) in der Form

$$f(\mathbf{k}) = f_0 [E(\mathbf{k}) - e\tau\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}] \quad (2.2.26)$$

geschrieben werden kann, d.h. als hätte ein Elektron im Zustand  $\mathbf{k}$  den Energiebetrag  $\delta E(\mathbf{k}) = e\tau\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}$  gewonnen. Klassisch hätte ein Elektron das genau dann getan, wenn es sich für die mittlere Zeit  $\tau$  mit der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}(\mathbf{k})$  im Feld  $\mathbf{E}$  bewegt hätte. Auf diesem Sachverhalt basiert die kinetische Methode zur Behandlung von Transporteigenschaften. Die zwischen zwei Streuprozessen zusätzlich gewonnene Energie ist einer mittleren *Driftgeschwindigkeit*  $\delta\mathbf{v}$  in Richtung des Feldes äquivalent und es gilt

$$\delta\mathbf{v} \cdot \frac{\partial E}{\partial \mathbf{v}} = e\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \tau \quad (2.2.27)$$

oder

$$\delta\mathbf{v} = \frac{e\tau v}{m} \mathbf{E} \quad (2.2.28)$$

für ein klassisches Teilchen mit Masse  $m$ . Wenn  $n$  Teilchen pro Einheitsvolumen vorhanden sind, erhalten wir die Stromdichte

$$\mathbf{J} = ne\delta\mathbf{v} = ne \frac{e\tau}{m} \mathbf{E} \quad (2.2.29)$$

und damit

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (2.2.31)$$

Für ein Gas freier Elektronen kann leicht gezeigt werden, dass (2.2.30) dasselbe aussagt wie (2.2.25). Allerdings treten in Metallen, in denen die Integration in (2.2.25) durch Zonengrenzen reduziert wird oder in denen Gittereffekte die effektive Geschwindigkeit der Elektronen auf der Fermi-Fläche verringern (z.B. in Wismut) Abweichungen auf. Für Halbleiter eignet sich dagegen die kinetische Formel (2.2.30) gut. Gewöhnlich schreibt man hier

$$\sigma = n|e|\mu \quad (2.2.32)$$

mit der *Beweglichkeit*

$$\mu = \frac{|e|\tau}{m} \quad (2.2.34)$$

der Ladungsträger.

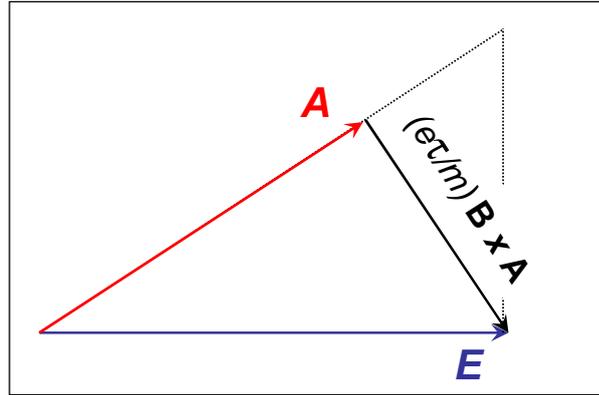


Abbildung 2.20: Zur geometrischen Lösung der Vektorgleichung (2.2.38).

### 2.2.3 Magnetwiderstand und Hall-Effekt im Einbandmodell

Wir wollen nun die linearisierte Boltzmann-Gleichung für ein homogenes System ( $\nabla_r g = 0$ ) bei Anwesenheit eines elektrischen und magnetischen Feldes betrachten. Das angelegte Magnetfeld soll immer senkrecht zur Stromrichtung stehen, wir betrachten also den *transversalen Magnetwiderstand*. Aus (2.2.13) ergibt sich

$$e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) = \frac{g(\mathbf{k})}{\tau} + \frac{e}{\hbar} (\mathbf{v}(\mathbf{k}) \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) . \quad (2.2.35)$$

Wenn wir freie Elektronen mit  $\hbar\mathbf{k} = m\mathbf{v}$  annehmen, kann jeder Zustand statt durch  $\mathbf{k}$  durch seine Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  gekennzeichnet werden. In Analogie zu (2.2.18) machen wir den Ansatz

$$g(\mathbf{k}) = \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \tau \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot e\mathbf{A} , \quad (2.2.36)$$

wobei  $\mathbf{A}$  ein noch zu bestimmender Vektor ist.<sup>28</sup>

Durch Einsetzen von (2.2.36) in (2.2.35) erhalten wir

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} + \left( \frac{e\tau}{m} \right) (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{A} , \quad (2.2.37)$$

was für alle Werte von  $\mathbf{v}$  offenbar durch

$$\mathbf{E} = \mathbf{A} + \frac{e\tau}{m} (\mathbf{B} \times \mathbf{A}) , \quad (2.2.38)$$

erfüllt ist. Dies ist eine Vektorgleichung. Wie Abb. 2.20 zeigt, ist eine Lösung von (2.2.38) durch

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{E} - \frac{e\tau}{m} \mathbf{B} \times \mathbf{E}}{1 + \frac{e^2\tau^2}{m^2} B^2} \quad (2.2.39)$$

gegeben.

Mit Hilfe von (2.2.36) und (2.2.37) erkennen wir andererseits auch direkt, dass der elektrische Strom gleich

$$\mathbf{J} = \sigma_0 \mathbf{A} \quad (2.2.40)$$

<sup>28</sup>In Abwesenheit eines Magnetfeldes gilt natürlich  $\mathbf{A} = \mathbf{E}$ .

ist, wobei  $\sigma_0$  die gewöhnliche Leitfähigkeit eines Metalls in Abwesenheit eines Magnetfeldes ist. Dies folgt aus (2.2.20) bis (2.2.25), wenn wir  $\mathbf{E}$  durch  $\mathbf{A}$  ersetzen. Aus (2.2.38) und (2.2.40) folgt daher

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{1}{\sigma_0} \mathbf{J} + \frac{e\tau}{m} (\mathbf{B} \times \frac{1}{\sigma_0} \mathbf{J}) \\ &= \rho_0 \mathbf{J} + \frac{e\tau}{m} \rho_0 (\mathbf{B} \times \mathbf{J}) \end{aligned} \quad (2.2.41)$$

wobei  $\rho_0$  der spezifische Widerstand in Abwesenheit eines Magnetfeldes ist.

Gl.(2.2.41) zeigt, dass das zur Erzeugung des Stromes notwendige elektrische Feld zwei Komponenten besitzt. In Richtung von  $\mathbf{J}$  gilt

$$E_{\parallel} = \rho_0 J . \quad (2.2.43)$$

Das heisst, dass der beobachtete Widerstand der Probe durch ein Magnetfeld nicht geändert wird, d.h. in dem betrachteten Einbandmodell existiert *kein Magnetwiderstand* !!!

Wird  $\mathbf{B}$  senkrecht zu  $\mathbf{J}$  angelegt, so entsteht ein transversales Feld der Stärke

$$E_H = \frac{e\tau}{m} \rho_0 B J , \quad (2.2.45)$$

das als *Hall-Feld* bezeichnet wird. Für freie Elektronen ist der *Hall-Koeffizient* durch

$$R_H = \frac{E_H}{BJ} = \frac{e\tau}{m} \rho_0 = \frac{1}{ne} , \quad (2.2.47)$$

gegeben, wenn (2.2.30) zur Elimination der Streuzzeit verwendet wird. Häufig wird auch der *spezifische Hallwiderstand*

$$\rho_{xy} = \frac{E_H}{J} = R_H B = \frac{B}{ne} \quad (2.2.48)$$

verwendet. Mit  $\sigma = n|e|\mu$  erhalten wir die *Hall-Beweglichkeit*

$$\mu_H = \frac{\sigma}{n|e|} = \sigma |R_H| . \quad (2.2.49)$$

Eine Größe, die direkt proportional zur Beweglichkeit ist, ist der *Hall-Winkel*

$$\tan \theta_H = \frac{E_H}{E_{\parallel}} = \mu_H B . \quad (2.2.50)$$

Das Ergebnis, dass der Hall-Koeffizient proportional zu  $1/ne$  ist, kann mit kinetischen Vorstellungen verstanden werden, wenn wir annehmen, dass die Ladungsträger mit der Geschwindigkeit  $\delta\mathbf{v}$  driften und dabei die Lorentz-Kraft  $e\delta\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  senkrecht zum Magnetfeld erfahren. Das transversale elektrische Feld  $\mathbf{E}_H = \mathbf{B} \times \delta\mathbf{v} = \mathbf{B} \times \frac{1}{ne} \mathbf{J}$  wird gerade zur Kompensation dieser Ablenkkraft benötigt. Die Proportionalität zu  $1/n$  ergibt sich dabei gerade deshalb, da sich bei einer gegebenen Stromstärke die Ladungsträger umso schneller bewegen müssen, je kleiner die Ladungsdichte ist und daher umso stärker im Magnetfeld abgelenkt werden.

### Messung des Hall-Effekts:

Für die Messung des Hall-Effekts verwendet man üblicherweise die in Abb. 2.21 gezeigte Probengeometrie. Man erhält mit obigen Gleichungen sofort, dass die gemessene Hall-Spannung durch

$$U_H = R_H B J b = \rho_{xy} J b = \frac{\rho_{xy} I}{d} \quad (2.2.51)$$

gegeben ist. Das heißt,  $U_H$  steigt mit zunehmender Stromdichte  $J$  und zunehmendem Magnetfeld  $B$  sowie mit zunehmender Probenbreite  $b$  an. Da man im Experiment  $B$  und  $J$  (z.B. wegen Heizeffekten) nicht beliebig erhöhen kann, kann man die Probenbreite erhöhen, um eine genügend große Hall-Spannung zu erzielen. Dabei muss allerdings beachtet werden, dass man nicht durch eine gegenseitige Verschiebung der Spannungsabgriffe für  $U_H$  einen longitudinalen Spannungsanteil mitmisst.

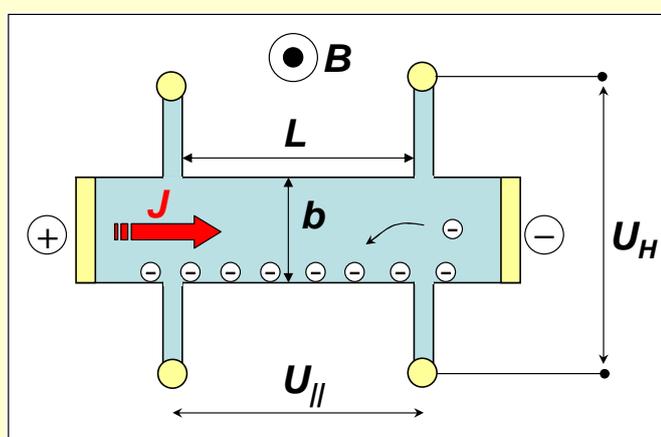


Abbildung 2.21: Typische Probengeometrie zur Messung des Hall-Effekts: Hall-Barren mit Länge  $L$ , Breite  $b$  und Dicke  $d$ , das Magnetfeld steht senkrecht auf der Probenebene.

### 2.2.4 Vertiefungsthema:

#### Magnetwiderstand und Hall-Effekt im Zweibandmodell

Die Leitfähigkeit bestimmter Materialien kann auf gemischten elektron- und lochartigen Beiträgen beruhen. So besitzen z.B. intrinsische Halbleiter bei  $T > 0$  ein schwach gefülltes, elektronenartiges Leitungsband, während im Valenzband Lochzustände mit viel geringerer Mobilität zurückbleiben. Auch verschiedene Übergangsmetalloxide, wie die bereits oben erwähnten perowskitischen Manganate haben eine komplexe Fermi-Fläche mit Regionen positiver (Elektronen) und negativer (Löcher) Bandkrümmung.

Das Vorhandensein von zwei Sorten von Ladungsträgern gibt Anlass zu dem in Abb. 2.22 gezeigten *Kompensationseffekten*, bei denen sich die Hall-Beiträge des elektronen- und lochartigen Teilbandes teilweise aufheben, da Elektronen und Löcher zur gleichen Probenseite abgelenkt werden. Bei einer Interpretation der gemessenen, zu niedrigen Hall-Spannung im Einbandmodell finden wir dann eine physikalisch nicht sinnvolle, zu hohe Ladungsträgerdichte.

Wir nehmen nun an, dass zwei verschiedene Sorten von Ladungsträgern vorliegen. Für jede Sorte ( $i = 1, 2$ ) gelten dieselben Gleichungen (2.2.41)

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\sigma_i} \mathbf{J}_i + \frac{e\tau_i}{m_i} (\mathbf{B} \times \frac{1}{\sigma_i} \mathbf{J}_i) . \quad (2.2.52)$$

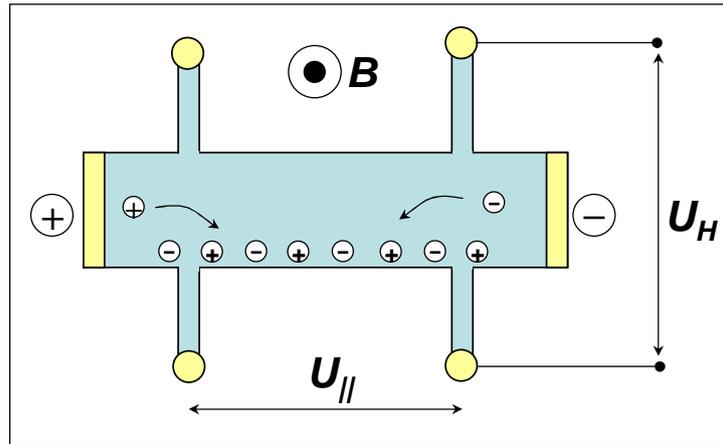


Abbildung 2.22: Kompensationseffekte beim Hall-Effekt durch das Vorhandensein von zwei Ladungsträgersorten.

Der Gesamtstrom ist durch (siehe Abb. 2.23)

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2 \quad (2.2.53)$$

gegeben.

Mit einer Lösung vom Typ (2.2.39) für die beiden Teilgleichungen von (2.2.52) finden wir den komplizierten Ausdruck

$$\begin{aligned} \mathbf{J} = & \left( \frac{\sigma_1}{1 + \left(\frac{e\tau_1}{m_1}\right)^2 B^2} + \frac{\sigma_2}{1 + \left(\frac{e\tau_2}{m_2}\right)^2 B^2} \right) \mathbf{E} \\ & - \left( \frac{\sigma_1 \frac{e\tau_1}{m_1}}{1 + \left(\frac{e\tau_1}{m_1}\right)^2 B^2} + \frac{\sigma_2 \frac{e\tau_2}{m_2}}{1 + \left(\frac{e\tau_2}{m_2}\right)^2 B^2} \right) \mathbf{B} \times \mathbf{E} , \end{aligned} \quad (2.2.54)$$

dessen geometrische Ableitung in Abb. 2.23 dargestellt ist.

Um den Hall-Koeffizienten zu berechnen, müssen wir (2.2.54) umkehren und  $\mathbf{E}$  durch  $\mathbf{J}$  und  $\mathbf{B} \times \mathbf{J}$  ausdrücken. Für kleine Magnetfelder erhalten wir

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{\sigma_1 \frac{e\tau_1}{m_1} + \sigma_2 \frac{e\tau_2}{m_2}}{(\sigma_1 + \sigma_2)^2} \\ &= \frac{\sigma_1^2 R_1 + \sigma_2^2 R_2}{(\sigma_1 + \sigma_2)^2} . \end{aligned} \quad (2.2.57)$$

Hierbei sind  $R_1$  und  $R_2$  die Hall-Konstanten für die entsprechenden Ladungsträgerarten. Wir sehen, dass man einen Differenzwert erhält, falls  $R_1$  und  $R_2$  entgegengesetztes Vorzeichen besitzen.

Die Diskussion des Magnetwiderstands ist etwas komplizierter. Hier müssen wir  $\mathbf{J}$  mit der

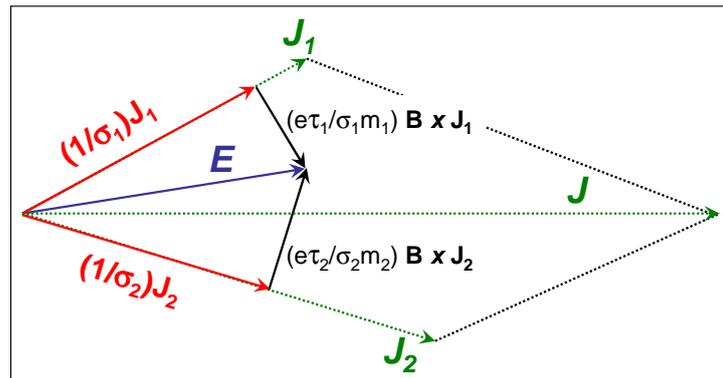


Abbildung 2.23: Zur geometrischen Ableitung von (2.2.54).

Komponente von  $\mathbf{E}$  in  $\mathbf{J}$ -Richtung verbinden und erhalten

$$\begin{aligned} \rho &= (\mathbf{J} \cdot \mathbf{E})/J^2 \\ &= \frac{\frac{\sigma_1}{1+(\frac{e\tau_1}{m_1})^2 B^2} + \frac{\sigma_2}{1+(\frac{e\tau_2}{m_2})^2 B^2}}{\left(\frac{\sigma_1}{1+(\frac{e\tau_1}{m_1})^2 B^2} + \frac{\sigma_2}{1+(\frac{e\tau_2}{m_2})^2 B^2}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_1 \frac{e\tau_1}{m_1} B}{1+(\frac{e\tau_1}{m_1})^2 B^2} + \frac{\sigma_2 \frac{e\tau_2}{m_2} B}{1+(\frac{e\tau_2}{m_2})^2 B^2}\right)^2} \cdot \end{aligned} \quad (2.2.58)$$

Vergleichen wir diese Größe mit dem spezifischen Widerstand  $\rho_0 = \frac{1}{\sigma_1 + \sigma_2}$  bei Abwesenheit eines Magnetfeldes, so erhalten wir nach einigen Umformungsschritten den Ausdruck

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\rho}{\rho_0} &= \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \\ &= \frac{\sigma_1 \sigma_2 \left(\frac{e\tau_1}{m_1} - \frac{e\tau_2}{m_2}\right)^2 B^2}{(\sigma_1 + \sigma_2)^2 + B^2 \left(\frac{e\tau_1}{m_1} \sigma_1 + \frac{e\tau_2}{m_2} \sigma_2\right)^2} \cdot \end{aligned} \quad (2.2.61)$$

Diese Formel findet allerdings nur begrenzt Anwendung, da meist die Ladungsträger nicht so einfach in zwei unabhängige Gruppen eingeteilt werden können. Sie zeigt aber die Hauptmerkmale des Phänomens Magnetwiderstand auf:

- $\Delta\rho$  ist immer positiv.
- $\Delta\rho$  verschwindet für  $\frac{e\tau_1}{m_1} = \frac{e\tau_2}{m_2}$ . Wenn die zwei Gruppen von Ladungsträgern im Magnetfeld um unterschiedliche Beträge abgelenkt werden, da sie unterschiedliche Massen, Ladungen oder Streuzeiten besitzen, so kann man kein elektrisches Feld finden, das beide Komponenten des elektrischen Stromes in die gleiche Richtung fließen lässt.
- $\Delta\rho$  ist für kleine Magnetfelder immer proportional zu  $B^2$ . Ein typisches experimentelles Ergebnis hierzu ist in Abb. 2.24 gezeigt.
- $\Delta\rho$  neigt bei großen Magnetfeldern zur Sättigung.<sup>29</sup>

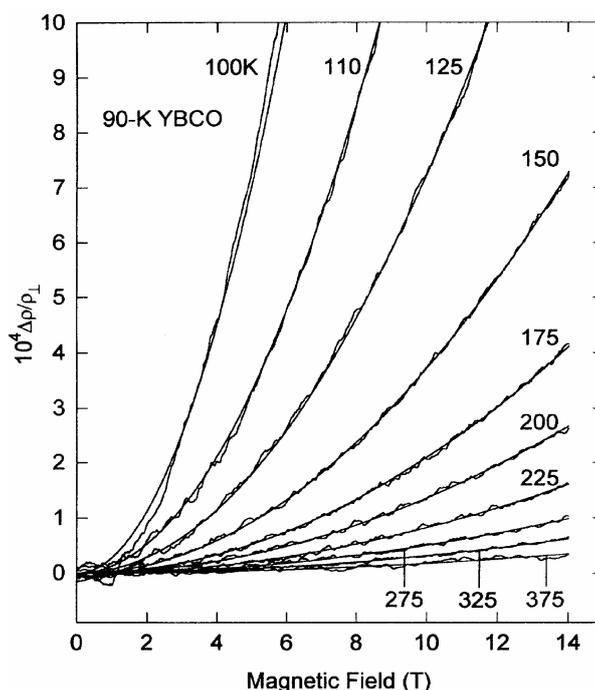


Abbildung 2.24: Magnetowiderstandseffekt eines  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\text{ff}}$ -Einkristalls (aus J.M. Harris et al., Phys. Rev. Lett. 75, 1391 (1995)).

Der obige Ausdruck für  $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}$  kann auf den Fall vieler Ladungsträgertypen erweitert werden, die alle getrennt zum Strom beitragen. Dadurch lassen sich auch komplizierte Fermi-Flächen behandeln, deren Teile unterschiedliche Werte für  $\frac{e\tau}{m}$  besitzen. Die Existenz eines endlichen Magnetwiderstands in Metallen kann als Beweis für die Änderung von  $\frac{e\tau}{m}$  auf der Fermi-Fläche gewertet werden.

Die bisherige Rechnung gilt für den *transversalen Magnetwiderstand*, d.h. für den Fall, dass das Magnetfeld senkrecht zur Stromrichtung anliegt. Man beobachtet aber auch einen *longitudinalen Magnetwiderstand*, d.h. für  $\mathbf{B} \parallel \mathbf{J}$ . Das einfache Zweibandmodell liefert keinen longitudinalen Magnetwiderstand, da es in jedem Band Kugelsymmetrie annimmt. Die Ausdrücke für den longitudinalen Magnetwiderstand sind komplizierter, da wir hier nicht-kugelsymmetrische Fermi-Flächen verwenden müssen.

Wir erkennen aus (2.2.59) einen weiteren wichtigen Sachverhalt. Nehmen wir an, dass beide Ladungsträgertypen durch die gleiche Streuzzeit charakterisiert sind, so ist  $\frac{\Delta\rho}{\rho_0}$  nur eine Funktion von  $\tau B$ . Da  $\tau$  selbst wiederum umgekehrt proportional zu  $\rho_0$  ist, können wir

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = F\left(\frac{B}{\rho_0}\right) \quad (2.2.66)$$

schreiben.  $F$  ist dabei eine Funktion, die durch die genauen Eigenschaften des jeweiligen Metalls bestimmt ist. Gl.(2.2.65) ist als *Kohler-Regel*<sup>30</sup> bekannt, die bereits in Abschnitt 2.1.1 eingeführt wurde.

<sup>29</sup>Dieser Effekt ist aber mit der Wahl geschlossener Fermi-Flächen verbunden. Im allgemeinen lassen sich kristallographische Richtungen finden, in denen der Magnetwiderstand nicht sättigt.

<sup>30</sup>Kohler, Annalen der Physik **32**, 211 (1938).

### Plausibilitätserklärung für den Magnetwiderstand:

Wir gehen davon aus, dass die Ladungsträger nach der mittleren Zeit  $\tau$  elastisch gestreut werden. Die Leitfähigkeit ist proportional zur mittleren freien Weglänge  $\ell = v_F \tau$ . Die Ladungsträger bewegen sich zwischen den Streuprozessen auf *Landau-Bahnen* mit Radius  $r = v m / e B$ , wobei die Umlauffrequenz durch die *Zyklotron-Frequenz*  $\omega_c = e B / m$  gegeben ist (siehe Abb. 2.25) Mit den Bezeichnungen  $\ell_0 = \tau v$ ,  $\ell_0 / r = \varphi$  und  $r = v / \omega_c$  ergibt sich aus Abb. 2.25c

$$\frac{\ell/2}{r} = \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \simeq \frac{\varphi}{2} - \frac{1}{6} \left(\frac{\varphi}{2}\right)^3 \quad (2.2.62)$$

und damit

$$\ell = \ell_0 \left(1 - \frac{1}{24} \tau^2 \omega_c^2\right) . \quad (2.2.63)$$

Der spezifische Widerstand  $\rho$  ist reziprok zur effektiven mittleren freien Weglänge  $\ell$  und damit ergibt sich

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{\ell_0^{-1} \left(1 - \frac{1}{24} \tau^2 \omega_c^2\right)^{-1} - \ell_0^{-1}}{\ell_0^{-1}} . \quad (2.2.64)$$

Mit  $\sigma = n e^2 \tau / m$  und  $\omega_c = e B / m$  folgt dann  $\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \frac{1}{24 n^2 e} \left(\frac{B}{\rho_0}\right)^2$ , was der Kohler-Regel entspricht.

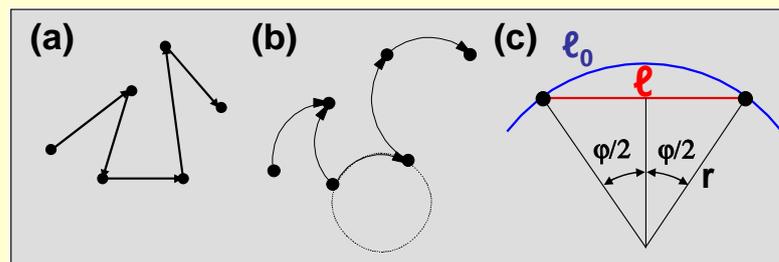


Abbildung 2.25: Driftbewegung von Elektronen ohne (a) und mit (b) Magnetfeld. Vollständige Umläufe auf Landau-Bahnen sind nur bei sehr niedrigen Temperaturen, sehr reinen Proben und hohen Magnetfeldern zu erwarten.

## 2.2.5 Streuprozesse

Metalle mit perfekt periodischer Gitterstruktur sind theoretisch bei  $T = 0$  widerstandslos. Die Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung für wechselwirkungsfreie Elektronen sind *Bloch-zustände*  $\Psi(\mathbf{k}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ , d.h. ebene Wellen, die mit einer gitterperiodischen Funktion moduliert sind. Für die inkohärente Streuung der Blochwellen und damit den elektrischen Widerstand sind Abweichungen von der strengen Periodizität (Defekte, Gitterschwingungen) oder die Elektron-Elektron Streuung verantwortlich. Verschiedene Typen von Streuzentren werden durch ihre Dichte  $n_s$  und ihren Streuquerschnitt  $S$  charakterisiert. Entsprechend der Optik gilt für die mittlere freie Weglänge  $1/\ell = n_s S$ . Die genaue Berechnung des elektrischen Widerstands aufgrund der verschiedenen Streuprozesse ist schwierig und soll hier nicht diskutiert werden. Es soll hier nur eine phänomenologische Übersicht über die verschiedenen Streuprozesse gegeben werden.

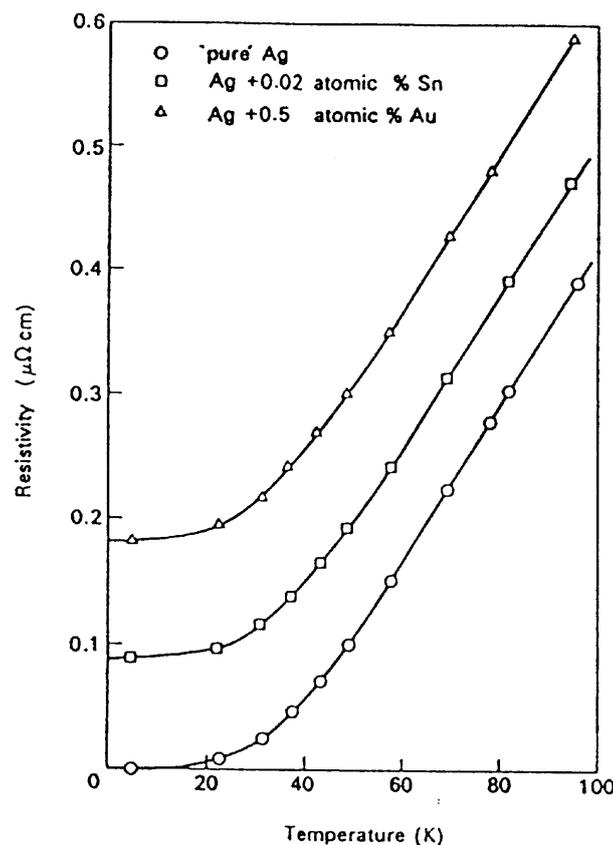


Abbildung 2.26: Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstands von reinem und mit Sn bzw. Au verunreinigtem Silber (aus Dugdale, *Electronic Properties of Metals and Alloys*, Edward Arnold Publishers, London (1982)).

### a) Matthiessen-Regel

Falls unterschiedliche Streuprozesse vorliegen, die durch eine Dichte  $n_{si}$  und einen Streuquerschnitt  $S_i$  der Streuzentren gekennzeichnet sind, und diese Streuprozesse voneinander unabhängig sind, so addieren sich die mit der Dichte gewichteten Streuquerschnitte und wir erhalten  $\ell^{-1} = \sum n_{si} S_i$ . Die inverse mittlere freie Weglänge ist proportional zum Widerstand, so dass wir den Gesamtwiderstand  $\rho$  als Summe der von den unabhängigen Mechanismen verursachten Einzelwiderstände  $\rho_i$  erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\ell} &= \frac{1}{\ell_1} + \frac{1}{\ell_2} + \frac{1}{\ell_3} + \dots \\ \rho &= \rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \dots \end{aligned} \quad (2.2.67)$$

Diesen Sachverhalt nennt man die *Matthiessen-Regel*, die bereits seit 1864 bekannt ist. In Abb. 2.26 ist gezeigt, wie der Widerstand von Ag durch Verunreinigung mit Sn oder Au um einen temperaturunabhängigen Beitrag (Verunreinigungsstreuung) erhöht wird.

Die Streuquerschnitte der einzelnen Streumechanismen können mit Hilfe der Streutheorie in erster oder zweiter Born'scher Näherung berechnet werden. Es ist wichtig darauf hinzuweisen, dass sowohl die Streuquerschnitte als auch die Dichte der Streuzentren von der Temperatur und der Energie abhängen können. Im Folgenden werden einzelne Streumechanismen näher diskutiert.

### b) Neutrale Störstellen

Für eine Berechnung des Streuquerschnitts müssen meist komplizierte Integralgleichungen für die Bestimmung der Streuterme gelöst werden.<sup>31</sup> Die allgemeinste Lösung dafür ist

$$g(\mathbf{k}) = \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) e\mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k}) \quad , \quad (2.2.68)$$

wobei der Vektor  $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k})$  an jedem Punkt der Fermi-Fläche definiert ist. Die elementare Lösung (Relaxationszeitansatz) ist mit  $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k}) = \tau(k)\mathbf{v}(\mathbf{k})$  äquivalent. D.h.  $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k})$  ist der Vektor der mittleren freien Weglänge. Im allgemeinsten Fall kann  $\boldsymbol{\Lambda}(\mathbf{k})$  sich in seiner Größe über die Fermi-Fläche ändern und muss auch nicht parallel zu  $\mathbf{v}(\mathbf{k})$  sein.

Wir wollen hier nicht im Detail auf die Berechnung des Streuquerschnitts eingehen. Ausführliche Darstellungen findet man z.B. in den Lehrbüchern von Dugdale oder Ziman (siehe Literaturliste im Anhang). Es sollen vielmehr die wesentlichen Ergebnisse der quantenmechanischen Berechnung des Streuquerschnitts vorgestellt und diskutiert werden.

Neutrale Fremdatome (z.B. Au oder Ag in einer Cu-Gitter) können durch ein kastenförmiges Potential der Höhe  $V_0$  und mit Radius  $r_0$  charakterisiert werden (wir sprechen hier von Potentialstreuung). Der totale Wirkungsquerschnitt für Elektronen an der Fermi-Kante ist dann

$$S = \pi r_0^2 \left( \frac{V_0}{E_F} \right)^2 = \pi r_0^2 \left( \frac{k_V^2}{k_F^2} \right)^2 \quad (2.2.69)$$

mit  $k_V^2 = 2mV_0/\hbar^2$ . Der Streuquerschnitt ist also proportional zu der von den Elektronen gesehenen Querschnittsfläche  $\pi r_0^2$ . Die Streuung an ungeladenen Fremdatomen liefert einen temperaturunabhängigen Beitrag zum spezifischen Widerstand. Dieser Beitrag ist verantwortlich für den so genannten *Restwiderstand*, der bei sehr tiefen Temperaturen (wenn die Streuung an Phononen vernachlässigbar klein wird, siehe unten) "übrig" bleibt. Er ist auch verantwortlich für den fast temperaturunabhängigen Widerstand von Legierungen.

### c) Geladene Störstellen

Die Streuung an geladenen Fremdatomen nennt man auch *Conwell-Weisskopf-Streuung*. Geladene Fremdatome sind z.B. Zn (2 Elektronen pro Zn-Platz) in einem Gitter von einfach ionisierten Cu-Ionen oder auch  $\text{Ga}^{3+}$ ,  $\text{Ge}^{4+}$  oder  $\text{As}^{5+}$ -Ionen, die sich vom umgebenden Cu um die effektive Ladung  $Z = 2, 3$ , bzw. 4 unterscheiden. Wir nennen  $Z$  hier Valenzdifferenz. Für die geladenen Streuer liegt ein Rutherford-artiges Streuproblem vor mit dem Unterschied, dass in einem Festkörper das Coulomb-Potential durch die Leitungselektronen abgeschirmt wird. Diesem Sachverhalt tragen wir durch einen Faktor  $\exp(-k_s r)$  Rechnung, wobei die Abschirmlänge  $1/k_s$  mit dem **Thomas-Fermi** Modell (Metalle) oder dem **Debye-Hückel** Modell (Halbleiter) berechnet werden kann. Für den totalen Wirkungsquerschnitt erhalten wir

$$S = \pi \left( \frac{2mZe^2}{\hbar^2 k_s^2} \right)^2 \frac{4k_s^2}{k_s^2 + 4k_F^2} \quad , \quad (2.2.70)$$

<sup>31</sup>Wie bereits weiter oben angemerkt, erhält man Ausdrücke der Form  $\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Streu}} \propto \int dk' \{ [1 - f(k)] w_{kk'} f(k') - [1 - f(k')] w_{k'k} f(k) \}$ , wobei  $w_{kk'}$  die Wahrscheinlichkeit für eine Streuung von Zustand  $\Psi_k(\mathbf{r})$  in den Zustand  $\Psi_{k'}(\mathbf{r})$  darstellt.

wobei  $Z$  die Valenzdifferenz ist. Wir sehen, dass das geladene Fremdatom ein Hindernis mit Radius  $r \sim \left(\frac{2mZe^2}{\hbar^2 k_s^2}\right)$  darstellt. Es sei hier noch angemerkt, dass der Beitrag der geladenen Streuer und damit der Widerstand aufgrund dieser Streuer unabhängig von der Temperatur und proportional zum Quadrat der Valenzdifferenz ist. Dieser Sachverhalt wird als *Linde'sche Regel* bezeichnet.

#### d) Streuung an Phononen

Die Berechnung des Widerstandes infolge von Streuung an thermischen Schwingungen des Gitters ist ein kompliziertes Problem. Wir wollen hier nur die Hauptgedankengänge zu seiner Lösung skizzieren.

##### Plausibilitätserklärung zur Phononenstreuung:

(i)  $T \gg \Theta$ :

Alle Phononenzustände sind bis zur Debye-Frequenz  $\omega_D$  besetzt. Die Anzahl pro Zustand ist proportional  $k_B T$  (Entwicklung der Bose-Einstein Verteilung). Die Zahl der Streuer nimmt deshalb linear mit  $T$  zu und man erwartet  $\rho \propto T$

(ii)  $T \ll \Theta$ :

Die Zahl der besetzten Zustände steigt mit  $T$  an. Innerhalb eines Debye-Modells (Zustandsdichte  $D(\omega_q) \propto \omega_q^2$ ) erhalten wir für die Zahl der Phononen  $\int_0^{\omega^*} D(\omega_q) d\omega_q \propto \omega^{*3}$ . Mit  $\hbar\omega^* \simeq k_B T$  folgt damit  $\rho \propto T^3$ .

Es muss aber zusätzlich noch ein Gewichtungsfaktor zur Bewertung der Streuprozesse berücksichtigt werden. Betrachten wir die Streuung um einen Winkel  $\vartheta$  zwischen den Wellenvektoren  $k$  und  $k'$  vor und nach der Streuung, so sehen wir aus Abb. 2.27, dass die Geschwindigkeitskomponente in der ursprünglichen Richtung  $v - \delta v = v \cos \vartheta$  ist. Die verlorene relative Driftgeschwindigkeit ist also  $\delta v/v = 1 - \cos \vartheta$ . Da die Streuung um kleine Winkel nur kleine relative Impulsüberträge liefert, muss der zusätzliche Gewichtungsfaktor  $(1 - \cos \vartheta)$  berücksichtigt werden. Für kleine  $\vartheta$  (tiefe Temperaturen) gilt  $(1 - \cos \vartheta) \simeq \vartheta^2 \propto q^2 = \omega_q^2/v_s^2$ , wobei  $v_s$  die Schallgeschwindigkeit ist. Wegen  $\omega_q = k_B T/\hbar$  ist  $(1 - \cos \vartheta) \propto T^2$  und wir erhalten insgesamt  $\rho \propto T^5$ .

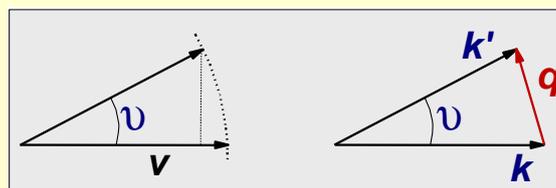


Abbildung 2.27: Zur Veranschaulichung des Gewichtungsfaktors zur Bewertung von Streuprozessen.

Bei hohen Temperaturen ( $T \gg \Theta$ ) weit oberhalb der *Debye-Temperatur*  $\Theta$  können wir annehmen, dass der Widerstand proportional zum quadratischen Mittelwert der Dichtefluktuationen ist, der durch ein bekanntes Prinzip (Äquipartitionsprinzip:  $M\omega_q^2 \Delta^2 = k_B T$ ) der klassischen

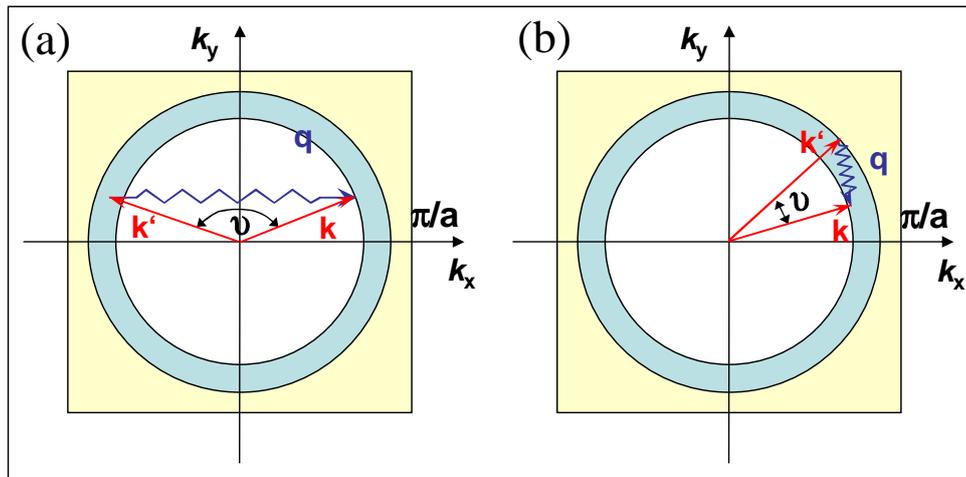


Abbildung 2.28: Schematische Darstellung der Elektron-Phonon-Streuung für ein freies Elektronengas für (a) hohe Temperaturen und (b) tiefe Temperaturen. Die getönte Fläche entspricht der thermischen Aufweichung der Fermi-Kugel. Neben der Fermi-Kugel ist auch der Brillouin-Zone eines kubisch primitiven Gitters eingezeichnet.

statistischen Mechanik durch<sup>32</sup>

$$\overline{\Delta^2} \propto \frac{k_B T}{M \omega_q^2} \quad (T \gg \Theta) , \quad (2.2.71)$$

gegeben ist, wobei  $M$  die Ionenmasse und  $\omega_q$  die Phononenfrequenz ist. Die Phononenfrequenz enthält dabei Information über die elastischen Eigenschaften des Materials. Eine grobe Abschätzung erhalten wir, indem wir  $\omega_q$  durch die Abschneidefrequenz  $\omega_D = k_B \Theta / \hbar$  ersetzen. Wir erhalten dann die allgemeine Form

$$\rho_{\text{ph}} \propto \overline{\Delta^2} \propto \frac{T}{M \Theta^2} \quad (T \gg \Theta) . \quad (2.2.73)$$

Der Widerstand steigt also für hohe Temperaturen proportional zu  $T$  an. Die Abhängigkeit von der Ionenmasse und der Debye-Temperatur stimmt im Allgemeinen ebenfalls mit dem Experiment überein.

Bei tiefen Temperaturen ist die Situation komplizierter, da hier die Besetzung der Moden entsprechend der *Bose-Einstein Statistik*

$$f(\omega_q) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_q}{k_B T}\right) - 1} \quad (2.2.74)$$

berücksichtigt werden muss. Durch die Bose-Einstein-Statistik fällt die Streuwahrscheinlichkeit schnell ab, wenn ein Phonon mit Energie  $\hbar \omega_q > k_B T$  absorbiert oder emittiert werden

<sup>32</sup>Man ordnet jedem Oszillator eine mittlere Energie zu, die über die Oszillatormasse  $M$  und die Federkonstante mit einer typischen Oszillationsamplitude verknüpft ist. Das Quadrat dieser Amplitude entspricht der temperaturbedingten räumlichen Verschmierung des jeweiligen Gitterplatzes und somit einem endlichen Streuquerschnitt. Bei hohen Temperaturen kann man annehmen, dass jede Mode besetzt ist, während bei tiefen Temperaturen die Besetzung entsprechend der Bose-Einstein Statistik berücksichtigt werden muss.

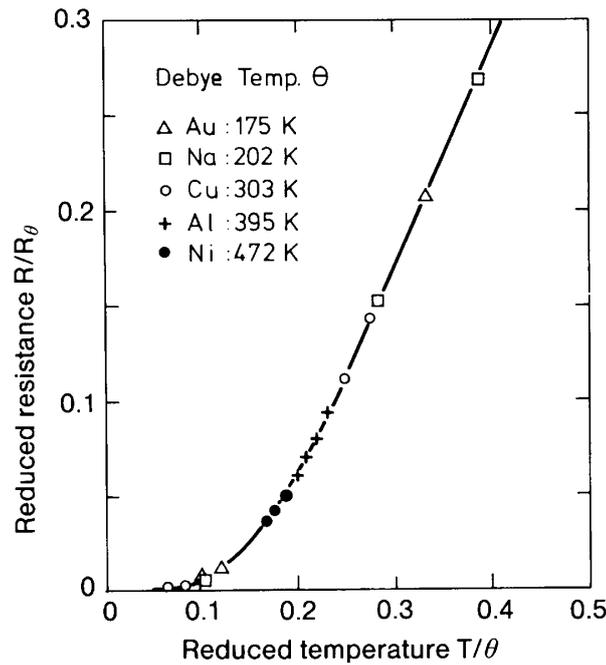


Abbildung 2.29: Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstands unterschiedlicher Metalle. Durch Normierung der Widerstands- und der Temperaturachse erhält man eine universelle Widerstandskurve für Phononenstreuung (aus W. Meissner, B. Voigt, Annalen der Physik 7, 761 und 892 (1930)).

muss. Außerdem muss berücksichtigt werden, dass der Streuwinkel  $\vartheta$  von der Temperatur abhängt, wie die in Abb. 2.28 gezeigt ist. Bei hohen Temperaturen ist die Streuung von Elektronen um hohe Winkel möglich. Da hier große effektive Impulsänderungen parallel zur Stromrichtung erhalten werden können, ist dieser Streuprozess in bezug auf den elektrischen Widerstand sehr effektiv. Bei tiefen Temperaturen sind dagegen aufgrund des kleinen Phononenimpulses nur kleine Streuwinkel möglich, wodurch sich der elektrische Widerstand reduziert.

Für ein Debye-Modell (Zustandsdichte der Phononen proportional zu  $\omega_q^2$ ) und für Normalprozesse auf einer Fermi-Kugel führt dies insgesamt dazu, dass Streuprozesse mit großen Streuwinkeln  $\vartheta$  praktisch ausgeschlossen werden und zwar für

$$\sin \frac{\vartheta}{2} > \frac{q_D T}{2k_F \Theta} \quad (2.2.75)$$

Hierbei ist  $q_D$  der zu  $\omega_D$  gehörende Wellenvektor. Unter Berücksichtigung diesen Sachverhalts erhalten wir das **Bloch-Grüneisen Gesetz**<sup>33</sup>

$$\rho_{\text{ph}} \propto \left( \frac{T}{\Theta} \right)^5 \int_0^{\Theta/T} \frac{4x^5}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})} dx \quad (2.2.76)$$

mit  $x = \hbar\omega_q/k_B T$ . Bei hohen Temperaturen, wo  $\Theta/T$  klein ist, geht das Integral gegen  $(\Theta/T)^4$  und wir erhalten das oben abgeleitete Ergebnis.

Für kleine Temperaturen wird das Integral konstant und man erhält

$$\rho_{\text{ph}} \propto \left( \frac{T}{\Theta} \right)^5 \quad (T \ll \Theta) \quad (2.2.78)$$

<sup>33</sup>E. Grüneisen, Annalen der Physik 16, 530 (1933).

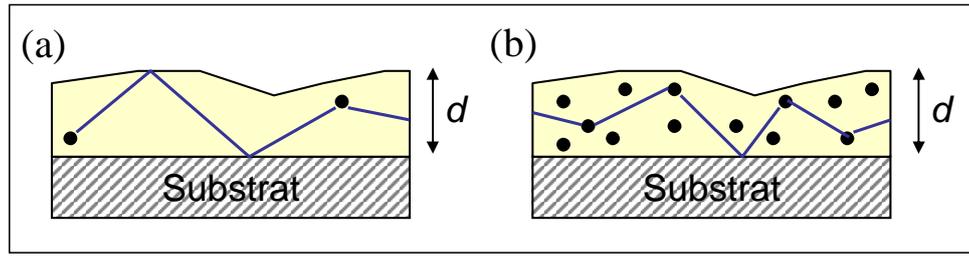


Abbildung 2.30: Schematische Darstellung der Streuprozesse in einem dünnen metallischen Film für (a)  $d/\ell_\infty \ll 1$  und (b)  $d/\ell_\infty \gg 1$ .

Das  $T^5$  Verhalten bei tiefen und die lineare  $T$ -Abhängigkeit bei hohen Temperaturen stimmt gut mit dem experimentell beobachteten Verhalten überein, wie z.B. in Abb. 2.29 gezeigt ist.

### 2.2.6 Streuprozesse in dünnen metallischen Schichten

In sehr dünnen Schichten werden Streuprozesse an Oberflächen bzw. Grenzflächen wichtig. Diese Streuprozesse werden dominierend, sobald die mittlere freie Weglänge aufgrund aller anderen Streuprozesse gross gegenüber der Schichtdicke wird. Da wir später intensiv den elektrischen Transport in metallischen Mehrschichten diskutieren werden (z.B. Riesenmagnetwiderstand in Abschnitt 5.2), die aus sehr dünnen Einzelschichten bestehen, wollen wir hier kurz auf die Elektronenstreuung in dünnen metallischen Schichten eingehen.

Bei dünnen Schichten der Dicke  $d$  tritt zusätzlich zu den oben diskutierten Streuprozessen die Streuung an der Oberfläche und den inneren Grenzflächen auf, die zu einer Schichtdickenabhängigkeit der Leitfähigkeit führt. Nehmen wir an, dass die mittlere Streuzeit und mittlere freie Weglänge durch alle Streuprozesse außer der Oberflächenstreuung durch  $\tau_\infty$  und  $\ell_\infty$  gegeben sind, so können wir den Anteil der Elektronen, der an der Oberfläche gestreut wird, aus dem Verhältnis  $d/\ell_\infty$  abschätzen. Dies ist in Abb. 2.30 veranschaulicht. Die Schichtdickenabhängigkeit der Leitfähigkeit wird dann eine Funktion von  $d/\ell_\infty$  sein. Ist die Schichtdicke groß gegen  $\ell_\infty$ , verursacht die endliche Schichtdicke nur kleine Korrekturen zum Drude-Ausdruck  $\sigma = ne^2\ell/m^*v_F$ . Ist dagegen  $d/\ell_\infty \ll 1$ , so wird der spezifische Widerstand hauptsächlich durch die Oberflächenstreuung bestimmt.

Da wir es mit einem dünnen Film zu tun haben, können wir nicht mehr von einem räumlich homogenen System ausgehen und müssen die Ortsabhängigkeit von  $g$  in der linearisierten Boltzmann-Gleichung (2.2.13) berücksichtigen. Im Rahmen des Relaxationszeitansatzes erhalten wir dann

$$\frac{g}{\tau} = -\frac{\partial f_0}{\partial E} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot e\mathbf{E} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} g(\mathbf{k}) . \quad (2.2.79)$$

Nehmen wir an, dass sich der Film in der  $xy$ -Ebene erstreckt und das elektrische Feld in  $x$ -Richtung anliegt, so können wir schreiben

$$\frac{g}{\tau} = -\frac{\partial f_0}{\partial E} v_x e E_x + \frac{\hbar k_z}{m} \frac{\partial g}{\partial z} . \quad (2.2.80)$$

Diese Differentialgleichung hat die Lösung

$$g(z, k) = e\tau E_x v_x \frac{\partial f_0}{\partial E} \left[ 1 + \exp\left(-\frac{mz}{\hbar\tau k_z}\right) \right] . \quad (2.2.81)$$

Mit dieser Lösung können wir mit Hilfe von (2.2.20) die elektrische Leitfähigkeit berechnen:

$$\sigma = \frac{e^2}{4\pi^3\hbar} \oint v(k)\tau(k) \frac{\partial f_0}{\partial E} \left[ 1 + \exp\left(-\frac{mz}{\hbar\tau k_z}\right) \right] dz d^3\mathbf{k} . \quad (2.2.82)$$

Die Auswertung dieses Integrals soll hier nicht im Detail diskutiert werden.<sup>34</sup> Für einen dünnen Film liegen die Randbedingungen  $g(z=0) = g(z=d) = 0$  vor, wobei  $d$  die Filmdicke ist, und wir erhalten für eine Film, dessen Dicke größer als die mittlere freie Weglänge ist, die sehr einfache so genannte *Sondheimer-Näherung*<sup>35</sup>

$$\rho(d) = \rho_\infty \left( 1 + \frac{3}{8} \frac{\ell_\infty}{d} \right) . \quad (2.2.83)$$

Die Dickenabhängigkeit des spezifischen Widerstands wurde erstmals im Jahr 1938 von **K. Fuchs** berechnet. Durch die Lösung der Boltzmann-Gleichung erhielt er das Resultat

$$\frac{\rho_\infty}{\rho(d)} = 1 - \frac{3}{2}(1-p) \frac{\ell_\infty}{d} \int_1^\infty \left( \frac{1}{t^3} - \frac{1}{t^5} \right) \frac{1 - \exp\left(-\frac{d}{\ell_\infty} t\right)}{1 - p \exp\left(\frac{d}{\ell_\infty} t\right)} dt . \quad (2.2.84)$$

Hierbei wurde die Größe  $p$  eingeführt, die die Wahrscheinlichkeit dafür beschreibt, mit der ein Elektron an der Filmoberfläche ohne den Verlust seines Impulses in Feldrichtung spiegelnd reflektiert wird ( $p$  wird auch als Spiegelungsparameter bezeichnet). Der Spiegelungsparameter hängt von der mikroskopischen Struktur der Oberfläche ab.

Auf dieser Analyse basierten bis vor wenigen Jahren die meisten Arbeiten zum elektrischen Widerstand dünner Schichten, wobei in einigen Arbeiten Erweiterungen durch Einführung winkelabhängiger Spiegelungsparameter vorgenommen wurden. Im Grenzfall großer Dicken lässt sich das Integral in (2.2.84) einfach berechnen und wir erhalten wieder die Sondheimer-Näherung

$$\rho(d) = \rho_\infty \left( 1 + \frac{3}{8} \frac{\ell_\infty(1-p)}{d} \right) . \quad (2.2.85)$$

Der Ausdruck (2.2.84) erscheint zunächst sinnvoll zu sein, da für große Schichtdicken der spezifische Widerstand mit einem  $1/d$ -Verhalten gegen den Wert  $\rho_\infty$  des Massivmaterials konvergiert. Allerdings werden auch zwei Schwächen des theoretischen Modells sichtbar:

1. Der Spiegelungsparameter ist nur eine phänomenologische Größe. Eine mikroskopische Beschreibung des Streuvorgangs an der Oberfläche wäre wünschenswert.
2. Für sehr kleine Schichtdicken ergibt sich eine physikalische Inkonsistenz. Der nach (2.2.84) beschriebene Widerstand geht gegen Null, wenn die mittlere freie Weglänge gegen unendlich geht und zwar unabhängig von der Stärke der Oberflächenstreuung, d.h. von  $p$ . Dies würde bedeuten, dass man den Widerstand einer dünnen Schicht durch Reduzierung der Streuprozesse in der Schicht beliebig verkleinern könnte. Der Grund für

<sup>34</sup>sieh hierzu E. H. Sondheimer, Adv. Phys. 1, 1 (1952).

<sup>35</sup>E. H. Sondheimer, Adv. Phys. 1, 1 (1952).

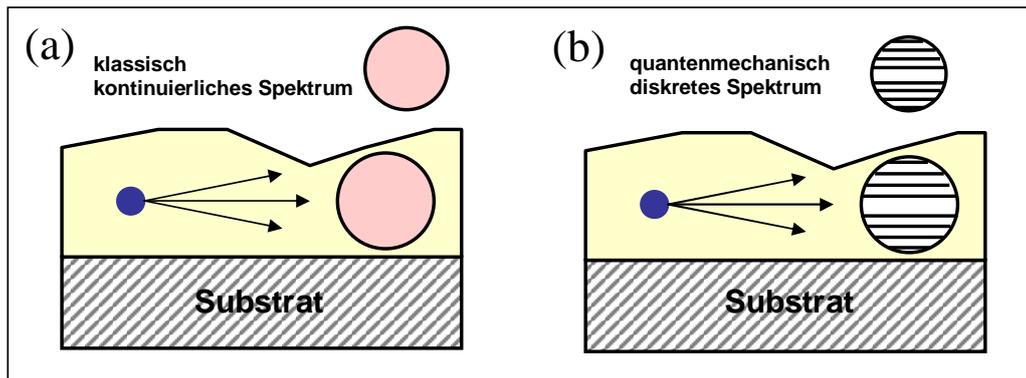


Abbildung 2.31: Schematische Darstellung zum klassischen (a) und quantenmechanischen (b) Transport in einer dünnen metallischen Schicht.

diese Inkonsistenz resultiert auf der Annahme eines freien Elektronengases. In der semi-klassischen Näherung liegt innerhalb der Fermi-Kugel eine kontinuierlich Zustandsdichte vor, die auch Bewegungsrichtungen der Elektronen parallel zur Schichtebene erlaubt. Diese Elektronen tragen dann aber den größten Teil zur Leitfähigkeit bei, da sie an der Oberfläche nicht gestreut werden. Der Widerstand wird dadurch beliebig klein, wenn die Streuung im Schichtinnern quasi verschwindet.

Die unter 2. diskutierte Inkonsistenz verschwindet bei einer quantenmechanischen Betrachtung des Problems. Wegen der geringen Schichtdicke erhalten wir senkrecht zur Schicht ( $x$ -Richtung) eine Quantisierungsbedingung. Für  $k_x$  sind jetzt nur noch die diskreten Werte  $k_x = n_x \pi / d$  zulässig mit  $n_x = \text{ganze Zahl}$ . Anschaulich folgt dies aus der Heisenberg'schen Unschärferelation. Da senkrecht zur Schicht  $\Delta x \leq d$  gilt, folgt aus  $\delta x \delta p \geq \hbar$  sofort ein Mindestimpuls der Elektronen senkrecht zur Schicht von etwa  $1/d$ . Eine Bewegung parallel zur Schicht ist deshalb verboten (eine genauere Diskussion der Quantisierung folgt in Abschnitt 5.1). Aufgrund der Quantisierungsbedingung für  $k_x$  erhalten wir keine kontinuierliche Zustandsdichte mehr, die Fermi-Kugel erhält vielmehr eine geschichtete Struktur (vergleiche Abb. 5.6). Eine schematische Darstellung der klassischen und quantenmechanischen Bewegung von Elektronen in dünnen Schichten ist in Abb. 2.31 gegeben. Wir können sofort abschätzen, in welchem Schichtdickenbereich quantenmechanische Effekte eine Rolle spielen. Aus  $k_x \sim 1/d$  folgt sofort, dass  $k_x \sim k_F$ , falls die Schichtdicke in der Größenordnung der Fermi-Wellenlänge  $\lambda_F = 2\pi/k_F$  liegt. D. h., quantenmechanische Effekte werden wichtig, sobald die Schichtdicke in die Größenordnung der Fermi-Wellenlänge kommt, die für Metalle typischerweise bei 1 nm liegt.

In quantenmechanischen Berechnungen des dickenabhängigen Widerstands summiert man die Leitfähigkeiten  $\sigma_\nu$  der einzelnen Subbänder mit Index  $\nu$  auf, die durch die  $k_x$ -Quantisierung entstehen, und wir erhalten

$$\rho(d) = \left( \sum_{\nu=1}^{\nu_F} \sigma_\nu \right)^{-1} \quad (2.2.86)$$

mit

$$\sigma_\nu = \frac{n_\nu e^2}{m^* v_F} \left( \frac{1}{\ell_\infty} + \frac{1}{v_F \sum_{\nu=1}^{\nu_F} (T^S)_{\nu, \nu'}} \right)^{-1} \quad (2.2.87)$$

Hierbei ist  $v_F$  die Fermi-Geschwindigkeit,  $n_\nu$  die Dichte der Elektronen im Unterband mit dem Index  $\nu$  und  $\nu_F$  ist der höchste vorkommende Index, der natürlich von der Schichtdicke abhängt. Die Matrix  $(T^S)_{\nu,\nu'}$  beschreibt die durch die Oberflächenstreuung verursachten Übergänge der Elektronenzustände in den Subbändern  $\nu$  und  $\nu'$ . Im Gegensatz zum klassischen Ergebnis bleibt  $\rho(d)$  jetzt endlich auch wenn  $\ell_\infty$  divergiert, da quantenmechanisch keine Elektronen mit Bewegungsrichtung parallel zur Schichtebene erlaubt sind.

## 2.3 Elektrischer Transport in magnetischen Metallen

Im vorangegangenen Abschnitt hat der Spin der Ladungsträger beim Transport keine Rolle gespielt. Wir wollen Systeme betrachten, in denen der Spin beim Transport eine mehr oder weniger wichtige Rolle spielt. Dies können einerseits nicht-magnetische Systeme mit magnetischen Verunreinigungen, in denen die Wechselwirkung zwischen dem Spin der Ladungsträger und lokalisierten magnetischen Momenten über die so genannte *Austauschwechselwirkung* eine wichtige Rolle spielt. Andererseits können dies auch ferromagnetische Systeme sein.

Der elektrische Transport in Metallen spiegelt den Charakter der Leitungselektronen in diesen Materialien wieder. Die Leitungselektronen in Metallen mit guter elektrischer Leitfähigkeit haben üblicherweise *s*- oder *p*-Charakter, während *f*-Elektronen kaum zum elektrischen Transport beitragen. Die *d*-Elektronen liegen irgendwo dazwischen und tragen zum elektrischen Transport mehr oder weniger bei.

In Übergangsmetallen spielen die *d*-Elektronen eine wichtige Rolle und führen zu einer Verknüpfung von Magnetismus und elektrischen Transporteigenschaften. Einerseits führt die Hybridisierung von *s*- und *d*-Zuständen dazu, dass das Bahnmoment bei Transportprozessen eine gewisse Rolle spielt. Dies wird uns bei der Diskussion des anisotropen Magnetwiderstandes beschäftigen. Andererseits können leere *d*-Zustände zeitweise von Leitungselektronen besetzt werden und führen so zu Spin- und Bahnmoment-abhängigen Streuprozessen.

In den Selten-Erd-Metallen sind für den elektrischen Transport die *5d*- und *6s*-Elektronen verantwortlich, während der Magnetismus von den stark lokalisierten *4f*-Elektronen verursacht wird, die nicht zum Transport beitragen. Die Leitungselektronen werden aber durch Austausch mit den *f*-Elektronen polarisiert, wodurch es auch hier zu einer Wechselbeziehung zwischen Magnetismus und elektrischem Transport kommt.

### 2.3.1 Experimentelle Beobachtungen

#### Spezifischer Widerstand von Metallen

Nicht-magnetische Metalle zeigen bei Temperaturen oberhalb der Debye-Temperatur  $\Theta$  folgende Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstands:

$$\rho(T) = \rho_0 + \alpha T \quad (T > \Theta) , \quad (2.3.1)$$

wobei der konstante Anteil durch Streuung an Verunreinigungen und der temperaturabhängige Anteil durch Streuung an Phononen zustande kommt (vergleiche Abschnitt 2.2.5). Ferromagnetische Metalle können eine Anomalie in  $\rho(T)$  bei der Curie-Temperatur  $T_C$  zeigen (siehe Abb. 2.1). Nähert man sich  $T_C$  durch Erhöhen der Temperatur, so beobachtet man eine anomale Zunahme von  $\rho$ . Diese Zunahme haben wir bereits in Abschnitt 2.1.2 qualitativ mit der Streuung an Spinunordnung erklärt.

#### Spezifischer Widerstand in Metallen mit verdünnten magnetischen Verunreinigungen

Verunreinigen wir ein nicht-magnetisches Metall (z.B. Ag, Au) mit Übergangsmetallen, so führt dies zu einer Erhöhung des spezifischen Widerstandes, die linear zur Konzentration  $x$  der Verunreinigungen ist:

$$\rho(x) = \rho(0) + \frac{d\rho}{dx} x . \quad (2.3.2)$$

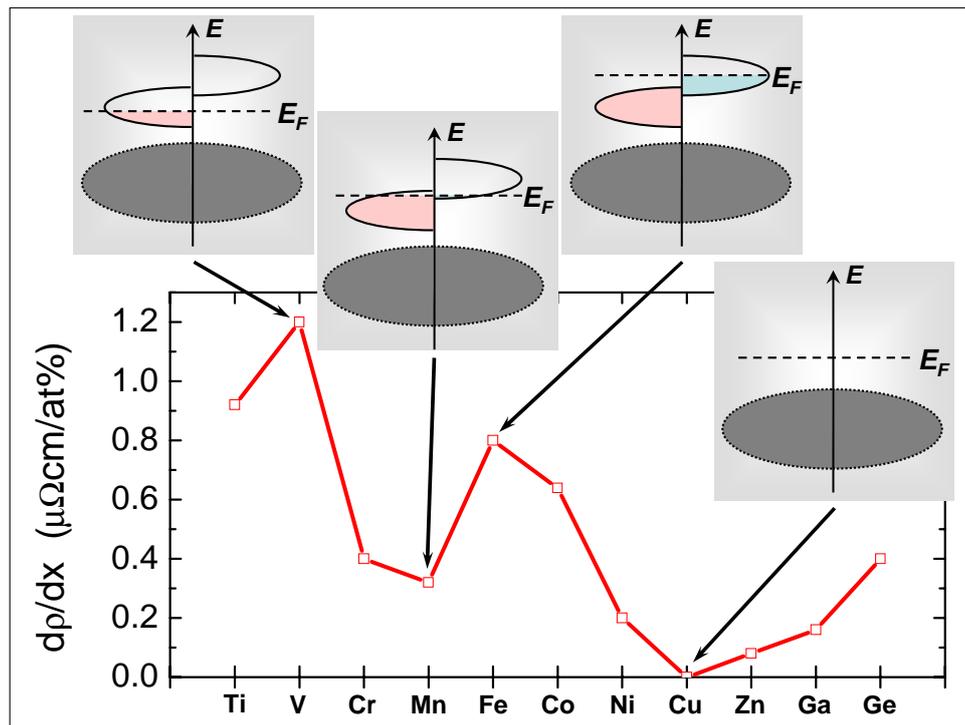


Abbildung 2.32: Variation der Steigung  $d\rho/dx$  des spezifischen Widerstandes von Kupfer mit der Konzentration  $x$  von verschiedenen metallischen Verunreinigungen. Die Zustandsdichten der Verunreinigungszustände sind gegenüber derjenigen von Kupfer (gestrichelt) übertrieben dargestellt. Die 4s-Zustände sind nicht gezeigt.

Hierbei ist  $\rho(0)$  der spezifische Widerstand des reinen nicht-magnetischen Metalls.

Abb. 2.32 zeigt die Steigung  $d\rho/dx$  für verschiedene Übergangsmetall-Verunreinigungen in Kupfer. Wir sehen, dass die Steigung zwei Maxima für V und Fe besitzt. Dies können wir mit einer energetischen Aufspaltung der  $d$ -Niveaus der Verunreinigungen erklären. Falls die  $3d \uparrow$ - und  $3d \downarrow$ -Zustände mit dem Fermi-Niveau des Leitungsbandes zusammenfallen, erwarten wir eine verstärkte Streuung der Leitungselektronen aufgrund der großen Zustandsdichte von freien  $d$ -Zuständen. Diese verstärkte Streuung führt zu einem Anstieg des spezifischen Widerstandes. Die Streuung der Leitungselektronen durch die lokalisierten  $d$ -Zustände hängt von zwei Faktoren ab: (i) die relative Orientierung der Spins der beteiligten elektronischen Zustände und (ii) die verfügbaren Anfangs- und Endzustände, insbesondere die Zustandsdichte der  $3d \uparrow$  und  $3d \downarrow$  Zustände.

### Spezifischer Widerstand von magnetischen Oxiden

In Abschnitt 2.1.6 haben wir kurz die Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstandes der dotierten Manganate beschrieben. Auch hier haben wir gesehen, dass der spezifische Widerstand stark durch Spinunordnung beeinflusst wird. Das Hüpfen von itineranten Elektronen zwischen benachbarten  $\text{Mn}^{3+}$ - und  $\text{Mn}^{4+}$ -Ionen in den gemischtvalenten dotierten Manganaten ist nur dann möglich, wenn die Spins der lokalisierten  $3d$ -Elektronen dieser Ionen parallel ausgerichtet sind. Eine parallele Ausrichtung dieser Spins durch ein angelegtes Magnetfeld führt somit zu einer starken Reduktion des spezifischen Widerstandes und somit zu einem "kolossalen" negativen Magnetowiderstandseffekt. Das Verhalten der dotierten Manganate resultiert insgesamt aus einem relativ komplexen Zusammenspiel von magnetischen Eigenschaften.

ten und elektronischer Struktur und wird im Detail erst in Abschnitt 4 im Zusammenhang mit der Erklärung des kolossalen Magnetwiderstandes diskutiert.

Zusammenfassend können wir festhalten, dass Spinunordnung und die Dichte von magnetischen Zuständen beim Fermi-Niveau wichtige Faktoren hinsichtlich des Transports in magnetischen Metallen sind. Die magnetischen Effekte sind natürlich den gewöhnlichen Phänomenen aufgrund von Streuung an Phononen oder nicht-magnetischen Verunreinigungen überlagert.

### 2.3.2 Das Zwei-Spinkanal-Modell

Bereits um 1935 postulierte Mott,<sup>36</sup> dass gewisse Anomalien beim elektrischen Transport in ferromagnetischen Metallen dadurch erklärt werden können, dass man die Spin- $\uparrow$  und die Spin- $\downarrow$  Elektronen als zwei unabhängige Sorten von Ladungsträgern betrachtet, wobei jede seine eigenen Transporteigenschaften besitzt. Wir sprechen dann von einem *Zwei-Spinkanal-Modell*. Mott's Hypothese basiert prinzipiell darauf, dass die Spin-Flip-Streuung unwahrscheinlich ist auf der Zeitskala der anderen für das Transportverhalten wichtigen Streuprozesse und dadurch Übergänge von einem in den anderen Spinkanal vernachlässigt werden können.<sup>37</sup> Bevor wir den elektrischen Widerstand aufgrund von Spinunordnung diskutieren, wollen wir zunächst die Grundlagen des Zwei-Spinkanal-Modells vorstellen.

#### a) Spin-Asymmetrie

Ein wichtiger Bestandteil des Zwei-Spinkanal-Modells ist die Tatsache, dass die beiden Spinarten unterschiedlich zum elektrischen Transport beitragen. Dies kann sowohl durch unterschiedliche Zustandsdichten als auch durch unterschiedliche Beweglichkeiten bzw. Streuzeiten verursacht werden. Die Tatsache, dass Streuprozesse, die dieselbe Impuls- oder Energieänderung bewirken, für beide Spinrichtungen unterschiedlich wirken, wird im Detail in Abschnitt 2.3.3 diskutiert. In jedem Fall beruht die Asymmetrie darauf, dass die ferromagnetische Austauschkopplung die Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Leitungsbänder aufspaltet, wodurch eine unterschiedliche Bandstruktur am Fermi-Niveau verursacht wird. Falls die Zustandsdichte am Fermi-Niveau unterschiedlich ist, trägt eine unterschiedliche Zahl von Elektronen in jedem Spinkanal zum Transport bei. Außerdem resultieren unterschiedliche Zustandsdichten in unterschiedlichen Streuraten für die beiden Spinsorten, was wiederum zu unterschiedlichen Beweglichkeiten führt.

#### b) Spin-Akkumulation

Wir betrachten nun kurz zwei Spinkanäle mit unterschiedlichen Beweglichkeiten. Wird ein elektrisches Feld an das ferromagnetische Metall angelegt, so resultiert dies in einer Verschiebung  $\Delta\mathbf{k}$  der Spin- $\uparrow$  und der Spin- $\downarrow$  Fermi-Kugeln entsprechend (vergleiche (2.2.19) und Abb. 2.19)

$$f(\mathbf{k}) = f_0\left(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar}\tau(\mathbf{k})\mathbf{E}\right) = f_0(\mathbf{k} - \delta\mathbf{k}) \quad . \quad (2.3.3)$$

Hierbei ist  $\tau$  die Streuzzeit der Ladungsträger, die mit der Beweglichkeit über  $\mu = e\tau/m^*$  verknüpft ist, wobei  $m^*$  die effektive Elektronenmasse ist. Da die beiden Spinkanäle unterschiedliche Beweglichkeiten besitzen, ist die Verschiebung  $\delta k = \frac{e}{\hbar}\tau E$  für beide Spinsorten unterschiedlich, wie dies in Abb. 2.33 schematisch dargestellt ist.

<sup>36</sup>N. F. Mott, Proc. Roy. Soc. **153**, 699 (1936).

<sup>37</sup>A. Fert, I. A. Campbell, Phys. Rev. Lett. **21**, 1190 (1968).

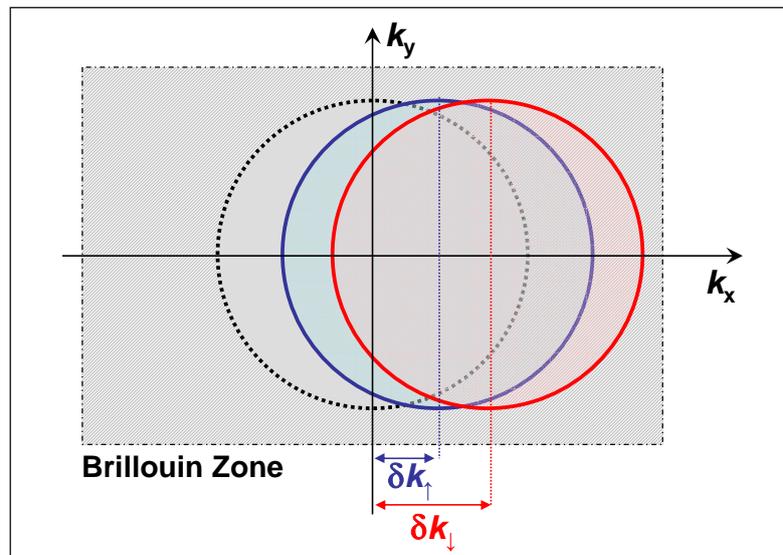


Abbildung 2.33: Schematische Darstellung der Verschiebung der Fermi-Kugel der Spin- $\uparrow$  und der Spin- $\downarrow$  Elektronen in einem Ferromagneten bei Anlegen eines elektrischen Feldes.

Aus Abb. 2.33 wird sofort ersichtlich, dass die Spin- $\downarrow$  Elektronen in dem betreffenden Ferromagneten den Hauptteil zur elektrischen Leitfähigkeit beitragen. Schicken wir einen Strom aus einem solchen Ferromagneten (z.B. Co, Ni, Fe) in ein paramagnetisches Metall (z.B. Ag, Au, Cu), in dem keine Asymmetrie zwischen den beiden Spinkanälen existiert, so erhalten wir in diesem paramagnetischen Metall einen Überschuss an Spin- $\downarrow$  Elektronen. Mit diesem Überschuss ist wiederum ein kleines magnetisches Moment pro Volumeneinheit verbunden. Dieser Überschuss an einer Spinsorte wird als Spin-Akkumulation bezeichnet. Es ist klar, dass ein konstanter Strom über die Grenzfläche zwischen Ferro- und Paramagnet nicht zu einem stetigen Anstieg der Spin-Akkumulation führen kann. Dies liegt daran, dass die Spin- $\downarrow$  Elektronen, sobald sie im Paramagneten angekommen sind, durch Spin-Flip-Streuung in Spin- $\uparrow$  Elektronen konvertiert werden. Wir erhalten dadurch ein dynamisches Gleichgewicht zwischen Spin-Injektion und Spin-Relaxation durch Spin-Flip-Streuung und damit eine mittlere Überschussdichte an Spin- $\downarrow$  Elektronen.

Das gleiche Ergebnis würden wir erhalten, wenn wir nicht unterschiedliche Beweglichkeiten der Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen annehmen würden, sondern unterschiedliche Zustandsdichten beim Fermi-Niveau. Zum Beispiel ist in einem halbmetallischen Ferromagneten die Zustandsdichte bei der Fermi-Energie für eine Spinrichtung gleich Null und man injiziert nur eine Spinsorte in das paramagnetische Metall. In diesem Fall ist keine Annahme über unterschiedliche Mobilitäten der beiden Spinsorten notwendig. Wir können also eine Spin-Akkumulation als direkte Konsequenz einer Asymmetrie der Zustandsdichten beim Fermi-Niveau oder als indirekte Konsequenz über eine Asymmetrie der Beweglichkeiten erhalten.

### c) Spin-Diffusionslänge

Wir können nun auch eine charakteristische Längenskala definieren, über die die Spinakkumulation in einem paramagnetischen Metall abklingt. Nehmen wir eine Generationsrate an der Grenzfläche zum Ferromagneten und eine räumlich homogene Spin-Flip-Rate im Paramagneten an, so erhalten wir ein exponentielles Abklingen der Spinakkumulation. Die charakteristische Längenskala wird auch *Spin-Diffusionslänge*  $\lambda_{\text{diff}}$  genannt. Es ist intuitiv, ei-

ne grobe Abschätzung der Spin-Diffusionslänge vorzunehmen und zu diskutieren, von welchen Parametern diese Länge abhängt. Dazu betrachten wir ein Spin- $\downarrow$  Elektron, das an der Ferromagnet/Paramagnet-Grenzfläche in den Paramagneten injiziert wurde. Das Elektron führt eine Reihe von  $N$  Stößen aus, bevor es nach der Zeit  $\tau_{\text{spin-flip}}$  eine Spin-Flip-Streuung erfährt. Die mittlere Strecke, die das Elektron zwischen elastischen Streuprozessen zurücklegt, ist die mittlere freie Weglänge  $\ell$ . Wir können nun zwei Beziehungen herstellen. Zum einen können wir sagen, dass die mittlere Strecke, die das Elektron in den Paramagneten eindringt durch  $\ell\sqrt{N/3}$  gegeben ist (random walk in drei Dimensionen). Diese Strecke ist gleich der Spin-Diffusionslänge. Andererseits ist die Länge des insgesamt vom Elektron zurückgelegten Weges durch  $N\ell$  gegeben. Diese Strecke kann aber  $v_F\tau_{\text{spin-flip}}$  gleichgesetzt werden, wobei  $v_F$  die Fermi-Geschwindigkeit, also die Geschwindigkeit, mit der sich das Elektron bewegt, ist. Eliminieren wir  $N$ , so erhalten wir

$$\lambda_{\text{sdiff}} = \sqrt{\frac{\ell v_F \tau_{\text{spin-flip}}}{3}}. \quad (2.3.5)$$

Wir erkennen, dass die Spin-Diffusionslänge von der mittleren freien Weglänge (und dadurch von der Konzentration von Verunreinigungen) sowie von der Spin-Flip-Streuzeit abhängt. Hierbei ist anzumerken, dass eine Vergrößerung der Verunreinigungskonzentration meist mit einer Verkürzung der Spin-Flip-Streuzeit über eine Vergrößerung der Spin-Bahn-Kopplung einhergeht.<sup>38</sup> Wir können mit obiger Beziehung für viele Metalle die Größenordnung der Spin-Diffusionslänge abschätzen. Für Silber variiert  $\lambda_{\text{sdiff}}$  z.B. zwischen einigen  $\mu\text{m}$  und einigen  $\text{nm}$ , je nach Verunreinigungskonzentration.

Es ist ferner interessant, die Spin-Akkumulation und die damit verbundene magnetische Flussdichte abzuschätzen. Hierzu setzen wir an der Grenzfläche zwischen Ferromagnet und Paramagnet die Netto-**Spininjektionsrate**

$$\frac{dn}{dt} = \frac{APJ}{e} \quad (2.3.6)$$

der **Zerfallsrate** aufgrund von Spin-Flip-Prozessen im gesamten durch die Spin-Akkumulation beeinflussten Volumen

$$\int_0^\infty dx A \frac{n}{\tau_{\text{spin-flip}}} = \frac{n_0 A}{\tau_{\text{sf}}} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{x}{\lambda_{\text{sdiff}}}\right) dx = \frac{An_0\lambda_{\text{sdiff}}}{\tau_{\text{sf}}}. \quad (2.3.7)$$

gleich. Hierbei ist  $A$  die Kontaktfläche,  $J$  die Stromdichte,  $n$  die Dichte der Überschusspins,  $x$  der Abstand zur Grenzfläche und  $P$  die Spinpolarisation im Ferromagneten. Wir erhalten damit die Spin-Akkumulation an der Grenzfläche zu

$$n_0 = \frac{PJ\tau_{\text{sf}}}{e\lambda_{\text{sdiff}}} = \frac{3PJ\lambda_{\text{sdiff}}}{ev_F\ell}. \quad (2.3.9)$$

Setzen wir typische Werte wie  $J = 1000\text{A}/\text{cm}^2$ ,  $P = 1$ ,  $v_F = 10^6\text{m}/\text{s}$ ,  $\ell = 10\text{nm}$ ,  $\lambda_{\text{sdiff}} = 100\text{nm}$  ein, so ergibt sich  $n_0 \simeq 8 \times 10^{22}\text{m}^{-3}$ . Bei einer typischen Elektronendichte von  $10^{28}\text{m}^{-3}$  beträgt die erzeugte Spinakkumulation also nur  $10^{-6}$ . Die damit verbundene magnetische Flussdichte beträgt  $B = \mu_0 M = \mu_0 \mu_B n_0 \simeq 10\text{nT}$ , wobei  $\mu_B$  das Bohr'sche Magneton ist. Diese sehr kleine Flussdichte kann experimentell nicht detektiert werden, da sie durch das mit dem Injektionsstrom verbundene, um ein Vielfaches größere Magnetfeld überdeckt wird.

<sup>38</sup>A. Fert et al., Phys. Rev. **B 52**, 6513 (1995).



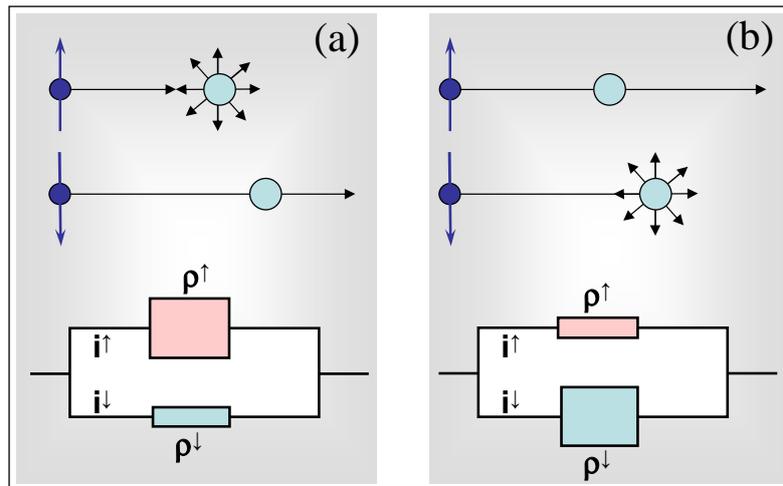


Abbildung 2.35: Spinabhängigkeit der Streuung. In (a) werden die Majoritätsladungsträger stärker gestreut ( $\beta < 1$ ), in (b) werden die Minoritätsladungsträger stärker gestreut ( $\beta > 1$ ). Bei Abwesenheit von Spinflip-Streuung können beide Streukanäle voneinander unabhängig betrachtet werden.

Diese Streuzeit ist im Allgemeinen spin- und zustandsabhängig. Zur Vereinfachung wollen wir uns hier nur mit der Spinabhängigkeit beschäftigen und die Zustandsabhängigkeit über die Fermi-Fläche mitteln

$$\langle \tau_k \rangle = \frac{\sum_k \delta(E_k - E_F) \tau_k}{\sum_k \delta(E_k - E_F)} \quad (2.3.14)$$

In Abhängigkeit von der Potentialstörung und der genauen elektronischen Struktur des Systems unterscheiden sich die Relaxationszeiten für beide Spinrichtungen. Der Unterschied der Relaxationszeiten wird durch die *Spinanisotropie*

$$\beta = \frac{\tau^\uparrow}{\tau^\downarrow} \quad (2.3.15)$$

charakterisiert. Ist  $\beta < 1$ , so werden die Majoritätsladungsträger stärker gestreut, ist  $\beta > 1$ , so werden die Minoritätsladungsträger stärker gestreut.

Bei der Betrachtung von Transportprozessen, können wir zwei getrennte Transportkanäle für die Majoritäts- und Minoritätsladungsträger betrachten (siehe Abb. 2.35). Im Kanal mit der stärkeren Streuung ist der Widerstand größer (die Leitfähigkeit geringer). Ein Zweikanal-Modell wird z.B. zur Erklärung des extrinsischen Riesenmagnetwiderstands herangezogen (siehe Abschnitt 5.2.3). Es sei hier nochmals darauf hingewiesen, dass die strikte Trennung der beiden Spinkanäle nur dann gilt, wenn die Spinflip-Streuung, die beide Kanäle mischt, vernachlässigbar klein ist.

### Zwei-Spinkanal-Modell für Übergangsmetalle

Wir können nun das Zwei-Spinkanal-Modell dazu benutzen, um den spezifischen Widerstand von Übergangsmetallen zu diskutieren. Um die Unterschiede zwischen ferromagnetischen und nicht-ferromagnetischen Übergangsmetallen zu verstehen, betrachten wir die schematische Bandstruktur einiger Metalle in Abb. 2.36. Alkalimetalle mit einer  $s^1$  Elektronenkonfiguration und Edelmetalle mit einer  $d^{10}s^1$  Konfiguration haben einen kleinen spezifischen Widerstand. Ihre elektronische Struktur bei der Fermi-Energie ist charakterisiert durch

$s$ -artige Bänder mit fast freien Elektronen. Nicht-magnetische Übergangsmetalle mit einer  $d^n s^1$ -Elektronenkonfiguration haben einen wesentlich höheren spezifischen Widerstand. Sie haben sowohl  $s$ - als auch  $d$ -Zustände bei der Fermi-Energie. Magnetische Übergangsmetalle haben eine  $d^{n\uparrow} d^{m\downarrow} s^1$ -Konfiguration und die Zustandsdichten der Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen bei  $E_F$  sind üblicherweise nicht identisch.

Wir können zunächst das stark vereinfachende Drude-Modell

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{ne^2\tau}{m^*} \quad (2.3.16)$$

benutzen, um den in Abb. 2.36 gezeigten Trend des spezifischen Widerstands zu erklären. Hierbei ist  $n$  die Dichte der freien Ladungsträger,  $\tau$  die Streuzeit und  $m^* \propto [\partial^2 E(k)/\partial k^2]^{-1}$  die effektive Masse der Ladungsträger, die invers proportional zur Bandkrümmung  $\partial^2 E(k)/\partial k^2$  ist. Im Allgemeinen können wir (2.3.16) nur für  $s$ -Elektronen anwenden. Wir können den Drude-Ausdruck aber verwenden, um den Effekt der  $d$ -Elektronen zu diskutieren:

- Der Überlapp von  $s$ - und  $d$ -Elektronen führt zu einer Hybridisierung dieser Zustände. Dadurch werden die freien  $s$ -Elektronen teilweise lokalisiert (die effektive Dichte  $n$  der zum Transport beitragenden Ladungsträger nimmt ab) und die lokalisierten  $d$ -Elektronen delokalisiert ( $n$  nimmt zu). Der Netto-Effekt auf  $n$  ist somit klein.
- Durch die Hybridisierung von  $s$ - und  $d$ -Elektronen erhalten die parabolischen  $s$ -Zustände ( $E(k) \propto k^2$ ) einen Teil der Eigenschaften der viel flacheren  $d$ -Zustände und damit eine höhere effektive Masse. Dies reduziert die Mobilität  $\mu = e\tau/m^*$  der Ladungsträger und führt zu einem höheren spezifischen Widerstand im Vergleich zu Alkali- oder Edelmetallen.
- Der wichtigste Effekt resultiert aus der durch den Überlapp von  $s$ - und  $d$ -Elektronen ermöglichten Streuung der "freien"  $s$ -Elektronen in mehr lokalisierte  $d$ -Zustände. Diese Streuung ist umso stärker, je höher die Zustandsdichte der  $d$ -Elektronen bei  $E_F$  ist. Die Streuung der  $s$ -Elektronen in die  $d$ -Zustände erniedrigt ihre Streuzeit und damit ihre Mobilität. Diese  $s$ - $d$  Streuung wurde erstmals von **Mott** diskutiert.<sup>39</sup> Die Streurate  $\tau^{-1} = n_S S$  ist durch die Dichte  $n_S$  der Streuer und deren Streuquerschnitt gegeben. Da  $n_S$  durch die Zustandsdichte  $D_d(E_F)$  der  $d$ -Zustände bei der Fermi-Energie gegeben ist und der Streuquerschnitt durch das Quadrat  $|V_S|^2$  des Streupotenzials gegeben ist (vergleiche Abschnitt 2.2.5), können wir schreiben:

$$\tau^{-1} = |V_S|^2 D_d(E_F) . \quad (2.3.17)$$

Aus dieser vereinfachten Diskussion sehen wir, dass die starke Reduktion von  $\tau/m^*$  durch die Präsenz von  $d$ -Bändern beim Fermi-Niveau zu einer starken Erhöhung des spezifischen Widerstands führt.

Wir können jetzt auch den Unterschied zwischen ferromagnetischen und nicht-ferromagnetischen Übergangsmetallen verstehen. Falls Spin-Flip-Streuung vernachlässigt werden kann, können wir das Zwei-Spinkanal-Modell verwenden und den spezifischen Widerstand der Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen durch  $\rho^\uparrow$  und  $\rho^\downarrow$  repräsentieren (siehe Abb 2.37a). Der Gesamtwiderstand ist dann durch

$$\rho = \frac{\rho^\uparrow \rho^\downarrow}{\rho^\uparrow + \rho^\downarrow} \quad (2.3.18)$$

<sup>39</sup>N. F. Mott, Proc. Roy. Soc. 153, 699 (1936).

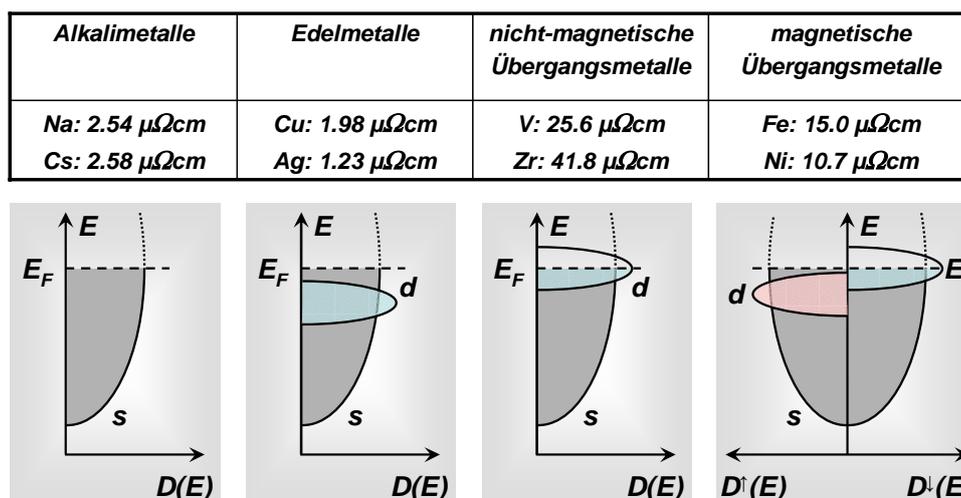


Abbildung 2.36: Spezifischer Widerstand und schematische Zustandsdichte von einigen Metallen bei der Debye-Temperatur in  $\mu\Omega\text{cm}$ . Gezeigt sind vier verschiedene Klassen: (a) Alkalimetalle, (b) Edelmetalle, (c) nicht-ferromagnetische Übergangsmetalle und (d) ferromagnetische Übergangsmetalle.

gegeben. Dabei enthalten  $\rho^\uparrow$  und  $\rho^\downarrow$  sowohl die spinunabhängigen Widerstandsanteile durch Streuung an Phononen und nicht-magnetischen Verunreinigungen als auch den Beitrag durch die  $s$ - $d$  Streuung. Die Beiträge  $\rho^\uparrow$  und  $\rho^\downarrow$  können beide durch (2.3.16) ausgedrückt werden mit unterschiedlichen Werten für  $n$ ,  $m^*$  und  $\tau$ . Sie müssen nicht gleich sein, da die Zustandsdichten für die Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen bei der Fermi-Energie unterschiedlich sein können.

Falls  $s$ - $d$  Streuung für eine Spinrichtung vernachlässigbar ist, so trägt diese Spinrichtung überwiegend zum Stromtransport bei und der gesamte spezifische Widerstand nähert sich dem Wert eines nicht-magnetischen Metalls an. Dies ist z.B. für Nickel der Fall (siehe Abb. 2.36), wo das Majoritätsband gefüllt ist und somit keine "freien" Leitungselektronen einfängt. Der elektrische Transport im Majoritätsband überwiegt somit und schließt den hohen Widerstand im Minoritätsband quasi kurz. Da  $\rho^\uparrow \ll \rho^\downarrow$  folgt aus (2.3.18)  $\rho \simeq \rho^\uparrow$

Genauso wie wir den Unterschied der Relaxationszeiten durch die Spinanisotropie  $\beta$  charakterisiert haben, können wir den Unterschied der spezifischen Widerstände für die beiden Spinrichtungen durch die **Widerstandsanisotropie**

$$\alpha = \frac{\rho^\downarrow}{\rho^\uparrow} \quad (2.3.19)$$

charakterisieren. Für Ni und Co ist  $\alpha \gg 1$ , da die nur  $3d \downarrow$  Elektronen des Minoritätsbandes bei  $E_F$  vorhanden sind und somit die Spin- $\downarrow$  Elektronen viel stärker gestreut werden, was zu  $\rho^\downarrow \gg \rho^\uparrow$  führt.

## Verunreinigungen

Wir wollen nun den Effekt von Verunreinigungs- oder Legierungselementen B in einem Metall A diskutieren, d.h. wir betrachten ein System  $A_{1-x}B_x$ . Falls wenig Spin-Flip-Streuung vorhanden ist, können wir wieder das Zwei-Spinkanal-Modell heranziehen. Der neue Streuprozess aufgrund der Verunreinigungen kann spinabhängig sein und tritt in beiden Spinkanälen auf

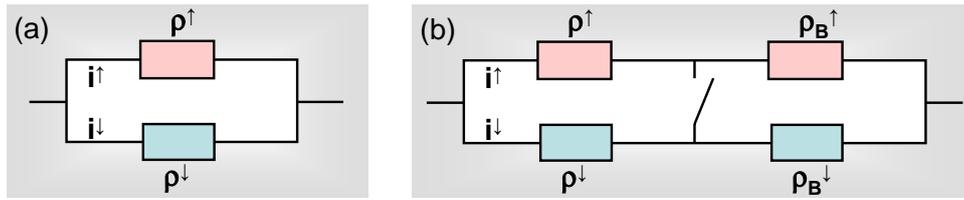


Abbildung 2.37: Ersatzschaltbild für das Zwei-Spinkanäle-Modell. (a) Reines Übergangsmetall: die beiden Spinsorten streuen unabhängig voneinander, die zugehörigen Widerstände sind parallel. (b) Verunreinigtes Übergangsmetall: Die beiden Spinsorten streuen auch hier unabhängig voneinander, die entsprechenden Widerstände sind deshalb auch hier parallel. Für einen Spinkanäle sind die Widerstände aufgrund von Streuung an den Verunreinigungen und der restlichen Streuprozesse in Serie.

als zusätzlicher Widerstand  $\rho_B^{\uparrow,\downarrow}$  auf (siehe Abb. 2.37b). Der spezifische Widerstand ist in diesem Fall gegeben durch

$$\rho = \frac{\{(1-x)\rho^\uparrow + x\rho_B^\uparrow\} \cdot \{(1-x)\rho^\downarrow + x\rho_B^\downarrow\}}{\{(1-x)\rho^\uparrow + x\rho_B^\uparrow\} + \{(1-x)\rho^\downarrow + x\rho_B^\downarrow\}}. \quad (2.3.20)$$

Falls eine Mischung der beiden Spinkanäle erfolgt, so kann dies im Ersatzschaltbild durch Einführen eines Schalter zwischen Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Kanal berücksichtigt werden. Der spezifische Widerstand ist dann durch

$$\rho = (1-x) \frac{\rho^\uparrow \rho^\downarrow}{\rho^\uparrow + \rho^\downarrow} + x \frac{\rho_B^\uparrow \rho_B^\downarrow}{\rho_B^\uparrow + \rho_B^\downarrow} \quad (2.3.21)$$

gegeben. In diesem Fall können die Ladungsträger zwischen beiden Kanälen auswählen und den Weg des geringsten Widerstandes nehmen. Der Gesamtwiderstand ist dadurch immer geringer als im Fall ohne Spinmischung.

Wichtig ist, dass Gleichung (2.3.21) eine Änderung des Widerstands (Zunahme des Widerstandes durch Spinordnung) beschreibt, die entgegengesetzt zu derjenigen aufgrund von Spinordnung in reinen Übergangsmetallen ist (Abnahme des Widerstandes durch Spinordnung). Während im ferromagnetischen Zustand Spin-Flip-Streuung unterdrückt ist und der Widerstand durch (2.3.20) gegeben ist, ist oberhalb von  $T_C$  Spin-Flip-Streuung möglich und der Widerstand ist deshalb durch (2.3.21), also einen kleineren Wert gegeben. Die Ausdrücke (2.3.20) und (2.3.21) beschreiben sehr gut das Verhalten von ferromagnetischen Legierungen.

### 2.3.4 Streuung von Leitungselektronen an lokalisierten magnetischen Momenten

Wir haben in Abschnitt 2.3.3 die spinabhängige Streuung durch eine  $T$ -Matrix beschrieben, die durch ein spinabhängiges Streupotenzial  $V_S$  bestimmt ist. Wir wollen nun diese spinabhängige Streuung für den Fall der Streuung von Leitungselektronen an lokalisierten magnetischen Momenten näher betrachten. Ferromagnetische Systeme besitzen oberhalb der *Curie-Temperatur*  $T_C$ , d.h. im paramagnetischen Zustand, eine ungeordnete Struktur von lokalisierten magnetischen Momenten. Das gleiche gilt für nicht-magnetische Systeme mit magnetischen Verunreinigungen. Die Leitungselektronen treten mit diesen Momenten in Wechselwirkung, wobei die Wechselwirkungsenergie des Spins  $\mathbf{s}$  eines Leitungselektrons mit einem Verunreinigungsspin  $\mathbf{S}_i$  am Ort  $\mathbf{R}_i$  durch die Austauschwechselwirkung

$$V_S = -\frac{J}{n_d} \sum_i \mathbf{s} \cdot \mathbf{S}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = -\frac{J}{n_d} \sum_i (\sigma^x S_i^x + \sigma^y S_i^y + \sigma^z S_i^z) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (2.3.22)$$

charakterisiert wird.<sup>40</sup> Hierbei sind

$$\sigma^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.3.23)$$

die Pauli'schen Spinmatrizen und  $n_d = N_d/V$  ist die Dichte der Verunreinigungen. Die Austauschkonstante  $J$  hängt vom Abstand zwischen dem Leitungselektron und dem lokalisierten Moment ab.<sup>41</sup> Der Ausdruck (2.3.22) entspricht einem Streuprozess, bei dem der Spin des Elektrons geflippt werden kann bei gleichzeitiger Änderung der Spinorientierung des Verunreinigungsatoms. Es sei darauf hingewiesen, dass der Spin eines Elektrons sich bei der Streuung an einer nicht-magnetischen Verunreinigung nicht ändert. Die Größe  $J$  hat die Dimension einer Energie. Sie ist üblicherweise um mehr als eine Größenordnungen kleiner als die kinetische Energie der Elektronen (d.h. als  $E_F$ ), während die spinunabhängige Wechselwirkungsenergie eines Elektrons mit einem Verunreinigungsatom häufig in der gleichen Größenordnung wie die Elektronenenergie ist. Da die spinunabhängige und spinabhängige Wechselwirkung nicht interferieren, können sie in der Streuwahrscheinlichkeit unabhängig voneinander betrachtet werden.

Die Streuamplitude der Wechselwirkung (2.3.22) ist gegeben durch (vergleiche hierzu (2.3.10))

$$T_{kk'}^{\sigma\sigma'} = \frac{1}{V} \int d^3\mathbf{r} \Psi_{k,\sigma}(\mathbf{r}) - \frac{J}{n_d} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{S})(\mathbf{r}) \Psi_{k',\sigma'}(\mathbf{r}) \propto -\frac{J}{n_d} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{S})_{\sigma\sigma'} \quad , \quad (2.3.24)$$

wobei  $\sigma'$  der Spinorientierung des Elektrons im End- und  $\sigma$  derjenigen im Anfangszustand entspricht. Da allerdings nur der Impuls des Elektrons und nicht der Spin für den elektrischen Transport und damit den spezifischen Widerstand wichtig ist, müssen wir die Streuwahrscheinlichkeit über alle möglichen Endorientierungen des Spins aufsummieren und über alle Anfangsorientierungen mitteln. Dies ergibt die Streuwahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} P_{kk'} &\propto \frac{1}{2} \left( \frac{J}{n_d} \right)^2 \sum_{\sigma\sigma'} (\mathbf{s}\mathbf{S})_{\sigma\sigma'} (\mathbf{s}\mathbf{S})_{\sigma'\sigma} \\ &\propto \frac{1}{2} \left( \frac{J}{n_d} \right)^2 \sum_{\sigma} (\mathbf{s}\mathbf{S} \cdot \mathbf{s}\mathbf{S})_{\sigma\sigma} = \left( \frac{J}{n_d} \right)^2 S(S+1) \quad . \end{aligned} \quad (2.3.25)$$

Somit ergibt sich in erster Näherung für den Spinanteil, bezogen auf die spinunabhängige Streuung an der gleichen Verunreinigung, ein Beitrag der Größenordnung  $J^2 S^2 / E_F^2$  zum Widerstand, d.h. wir erhalten einen **temperaturunabhängigen Beitrag** zum spezifischen Widerstand, der sich zur normalen Coulomb-Streuung an an einem elektrostatischen Potenzial hinzuaddiert.

Wir wollen uns nun die Streuung der Leitungselektronen an lokalisierten Momenten kurz veranschaulichen. Dazu unterscheiden wir zwei Fälle:

#### (a) Streuung ohne Spin-Flip:

Betrachten wir die Streuung eines Spin- $\uparrow$ - und Spin- $\downarrow$ -Elektrons an einem lokalisierten Moment (siehe Abb. 2.38), so stellen wir fest, dass die Streuquerschnitte für beide Prozesse nicht

<sup>40</sup>Bahnanteile sollen hier aus Gründen der Einfachheit vernachlässigt werden.

<sup>41</sup>Sie entspricht aber keiner magnetischen Dipol-Dipol-Wechselwirkung (diese wäre viel zu klein), sondern eher einem Energiebeitrag entsprechend den **Hund'schen Regeln** für das spin-abhängige Auffüllen von Orbitalen. In den meisten Fällen kann die Wechselwirkung in guter Näherung als punktförmig angenommen, da die Verunreinigungsspins durch Elektronen der inneren Schalen gebildet werden.

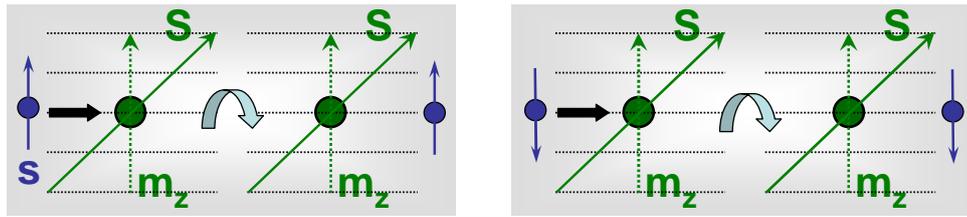


Abbildung 2.38: Schematische Darstellung der Streuung von Spin- $\uparrow$ - (links) und Spin- $\downarrow$ -Elektronen (rechts) an einem lokalisierten Spinmoment  $\mathbf{S}$  mit  $z$ -Komponente  $m_z$ .

gleich sind. Spin- $\uparrow$ -Elektronen werden an Momenten mit positiven  $m_z$ -Werten weniger stark gestreut als Spin- $\downarrow$ -Elektronen. Hierbei ist  $m_z$  die  $z$ -Komponente des Spinmoments  $\mathbf{S}$ . Der entsprechend umgekehrte Fall gilt für negative  $m_z$ -Werte. Im paramagnetischen Fall ist die Wahrscheinlichkeit für positive und negative  $m_z$ -Werte allerdings gleich groß, so dass Spin- $\uparrow$ - und Spin- $\downarrow$ -Elektronen gleich stark gestreut werden, d.h. es existiert keine Asymmetrie bezüglich der Streuquerschnitte für Spin- $\uparrow$ - und Spin- $\downarrow$ -Elektronen. Der effektive Streuquerschnitt  $S_{\text{eff}}$  ist gegeben durch

$$S_{\text{eff}} \propto \langle m_z^2 \rangle J^2 . \quad (2.3.27)$$

Der Erwartungswert  $\langle m_z^2 \rangle$  ergibt sich dabei aus der Mittelung über alle  $m_z$ -Zustände.

### (b) Streuung mit Spin-Flip:

Da der Gesamtspin des Systems bei einem Streuprozess erhalten bleiben muss, muss sich durch einen Spinflip des Elektrons auch die  $m_z$ -Komponente des lokalen Moments ändern. Dadurch ändert sich aber auch die Energie des lokalen Spinmoments  $\mathbf{S}$  im Feld der benachbarten lokalen Momente. Falls zusätzlich ein äußeres Magnetfeld anliegt, ändert sich außerdem auch die Energie des Elektrons beim Spinflip.

Wir können formal zwei Fälle unterscheiden:

- $m_z \rightarrow m_z - 1$  (Abb. 2.39a):

Das Leitungselektron geht dabei vom Spin- $\downarrow$  ( $m_s = -1/2$ ) in den Spin- $\uparrow$ -Zustand ( $m_s = +1/2$ ) über. Die entsprechenden Ausdrücke für das Matrixelement und den Streuquerschnitt lauten:

$$\text{Matrixelement :} \quad \langle S; m_z - 1; +1/2 | -\mathbf{J} \cdot \mathbf{S} | S; m_z; -1/2 \rangle \quad (2.3.28)$$

$$\text{Streuquerschnitt :} \quad S_{\text{eff}} \propto J^2 (S + m_z)(S - m_z + 1) . \quad (2.3.29)$$

- $m_z \rightarrow m_z + 1$  (Abb. 2.39b):

Das Leitungselektron geht dabei vom Spin- $\uparrow$  ( $m_s = 1/2$ ) in den Spin- $\downarrow$ -Zustand ( $m_s = -1/2$ ) über. Die entsprechenden Ausdrücke für das Matrixelement und den Streuquerschnitt lauten:

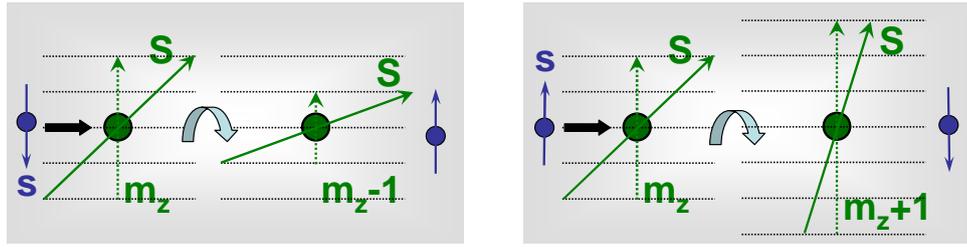


Abbildung 2.39: Spinflip-Streuung von Leitungselektronen: (a) Spinflip in Richtung des lokalen Moments ( $m_z \rightarrow m_z - 1$ ), (b) Spinflip entgegengesetzt zum lokalen Moment ( $m_z \rightarrow m_z + 1$ ).

$$\text{Matrixelement : } \quad \langle S; m_z + 1; -1/2 | -J \mathbf{s} \cdot \mathbf{S} | S; m_z; +1/2 \rangle \quad (2.3.30)$$

$$\text{Streuquerschnitt : } \quad S_{\text{eff}} \propto J^2 (S - m_z)(S + m_z + 1) . \quad (2.3.31)$$

Falls  $J > 0$ , hat die Wechselwirkung (2.3.22) ein ferromagnetisches Vorzeichen und tendiert dazu, die Spins der Leitungselektronen und der lokalen Momente parallel auszurichten. Da der Gesamtspin bei den Streuprozessen allerdings erhalten werden muss, sehen wir sofort, dass für einen Gesamtspin  $S + 1/2$  das Leitungselektron nicht mit einem Spinflip gestreut werden kann. Das heißt, die Spinflip-Streuung wird unterdrückt und wir erhalten eine kleinere Streuwahrscheinlichkeit. Falls  $J < 0$ , existiert eine Tendenz zu einer antiparallelen Ausrichtung der Spins. Mit einer solchen Ausrichtung wird der maximale Spin  $S - 1/2$  sein und Prozesse mit einem Spinflip des Leitungselektrons sind möglich. Dies resultiert in einer erhöhten Spinflip-Streureate für  $J < 0$ . Wir sehen also, dass der Streuquerschnitt für den Übergang aus einer antiparallelen in eine parallele Spinorientierung größer ist als der umgekehrte Fall.

Mit den bis jetzt gemachten Überlegungen können wir eine Abschätzung der Größenordnung für den spezifischen Widerstand aufgrund von Streuung an lokalisierten magnetischen Momenten bzw. an Spinunordnung im paramagnetischen Zustand eines Ferromagneten machen. Dazu machen wir die vereinfachende Annahme, dass der Erwartungswert von  $m_z$  verschwindet. Das mit der spinabhängigen Streuung verbundene Streupotential ist dann für beide Fälle proportional zu  $J^2 S(S + 1)$  und wir erhalten für den effektiven Wirkungsquerschnitt für die magnetischen Streuer<sup>42</sup> (vergleiche (2.2.69))

$$S_{\text{eff}} = \pi r_0^2 \left( \frac{J}{E_F} \right)^2 S(S + 1) . \quad (2.3.33)$$

Der charakteristische Radius  $r_0$  entspricht hierbei dem Ionenradius und die Höhe  $V_S$  des Streupotentials ist durch den Wert des Austauschparameters  $J$  am Rand der Elektronenhülle, d.h. durch  $J(r_0)$  gegeben. Typischerweise ist  $J(r_0)$  etwa 0.1 eV. Nehmen wir weiter an, dass jedes Gitteratom ein Leitungselektron mit effektiver Masse  $m^*$  (für Eisen ist z.B.  $m^* \simeq 8m_e$ ) zur Verfügung stellt (d.h.  $N = n_d$ ), so erhalten wir mit  $S_{\text{total}} = NS_{\text{eff}} = 1/\ell$ ,  $\tau = \ell/v_F$  und  $\rho = m^*/(ne^2\tau)$

$$\rho = \frac{m^* \pi r_0^2}{e^2} v_F \left( \frac{J}{E_F} \right)^2 S(S + 1) . \quad (2.3.34)$$

<sup>42</sup>Man behandelt den magnetischen Streuer mit einem Kastenpotential mit Radius  $r_0$  und Höhe  $V_S$ .

Setzen wir den für Metalle typischen Wert von  $v_F \simeq 10^6$  m/sec ein, so ergibt sich  $\rho \simeq 13 \mu\Omega\text{cm}$ . Hierbei ist anzumerken, dass  $(J/E_F)$  und  $r_0$  quadratisch in den Schätzwert eingeht und deshalb Fehler in diesen Größen sich stark auswirken.

Bemerkenswert ist, dass der Schätzwert für  $\rho$  mit dem gemessenen spezifischen Widerstand von reinem Eisen ( $\rho = 9.8 \mu\Omega\text{cm}$ ) bei Raumtemperatur, d.h. im ferromagnetischen Zustand, gut übereinstimmt. Da der Beitrag durch Spinunordnung eigentlich nur oberhalb der Curie-Temperatur ( $T_C = 1043$  K für Fe) zum Gesamtwiderstand beiträgt und die Streuwahrscheinlichkeiten von der Verfügbarkeit der Endzustände abhängen, die sich unterhalb von  $T_C$  ebenfalls ändert, wurde der Widerstand durch Spinunordnung durch obige Formel überschätzt.<sup>43</sup>

### Streuung im ferromagnetischen Zustand

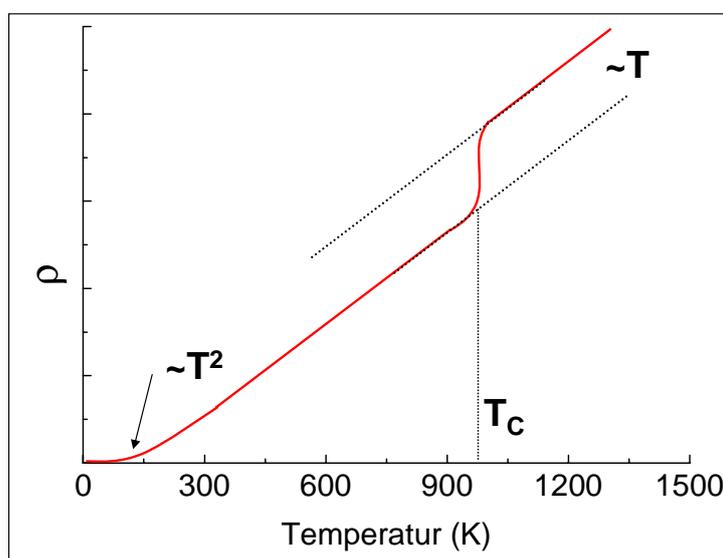


Abbildung 2.40: Typischer Verlauf der Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstands eines ferromagnetischen Metalls. Bei  $T_C$  erhält man eine Abnahme des Widerstands aufgrund der Abnahme der Spinunordnung. Bei tiefen Temperaturen erhält man einen  $T^2$ -Verlauf durch Magnonen-Streuung.

Unterhalb der Curie-Temperatur eines Ferromagneten ordnen sich die lokalen magnetischen Momente parallel an, man geht von einem ungeordneten (paramagnetischen) in einen geordneten (ferromagnetischen) Zustand über. Die oben diskutierte Streuung der Leitungselektronen an ungeordneten magnetischen Momenten sollte folglich ausgefroren werden und wir erwarten, dass der Widerstand bei  $T_C$  stark abnimmt. Allerdings ist die Ordnung der magnetischen Momente nicht perfekt, sondern es gibt durch die endliche thermische Energie Abweichungen von der perfekten Ordnung. Die Abnahme erfolgt also nicht abrupt (siehe Abb. 2.40), sondern eher graduell. Dies liegt daran, dass es auch oberhalb von  $T_C$  eine magnetische Nahordnung durch Fluktuationen gibt. Ebenso ist unterhalb von  $T_C$  die ferromagnetische Ordnung nicht perfekt. Es gibt Störungen der ferromagnetischen Spinordnung durch thermisch angeregte *Spinwellen*, so genannte *Magnonen* (siehe Abb. 2.41). Wäre die Spinordnung unterhalb von  $T_C$  perfekt, so wäre das Streupotential durch die lokalen magnetischen Momente streng periodisch und würde zu keinen Streueffekten für die Bloch-Elektronen führen. Die thermisch angeregten Spinwellen führen zu Abweichungen von der strengen Periodizität des Spingitters

<sup>43</sup>Bei unserer Diskussion wurde natürlich vorausgesetzt, dass der Streuquerschnitt im elastischen Kanal (ohne Spinflip) wesentlich geringer ist.

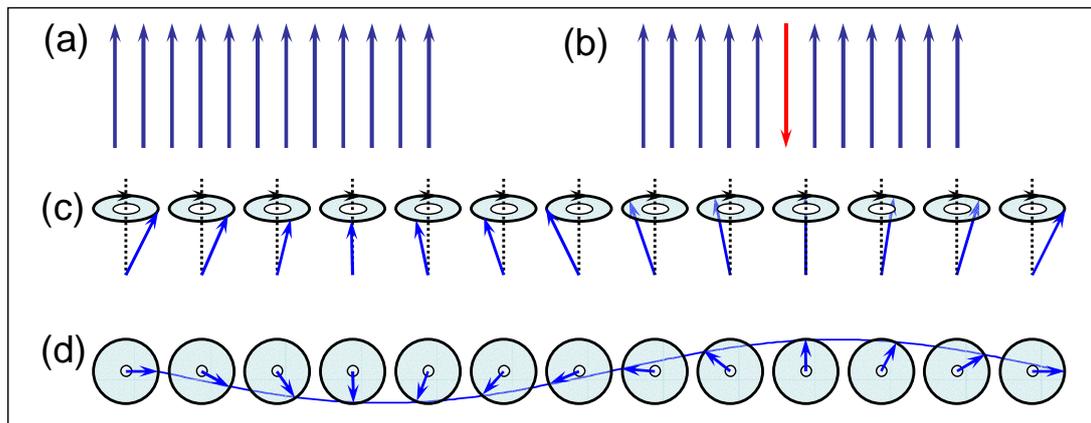


Abbildung 2.41: (a) Grundzustand eines einfachen Ferromagneten. (b) Eine mögliche Anregung aus dem Grundzustand: ein Spin wird umgeklappt. (c) Spinwelle in einer Kette von Spins in perspektivischer Darstellung und (d) von oben betrachtet; die Wellenlinie verläuft durch die Spitze der Spinvektoren.

(genauso wie Gitterschwingungen zu einer Abweichung der strengen Periodizität des Kristallgitters führen) und verursachen deshalb einen endlichen Widerstand.

Im Experiment beobachten wir einen  $T^2$ -Verlauf des spezifischen Widerstands bei tiefen Temperaturen. Die Ursache hierfür soll nun kurz erläutert werden. Wie Abb. 2.41 zeigt, ist die einfachste Anregungsform das Umklappen eines einzelnen Spins. Die Anregungsenergie für diesen Prozess ist allerdings hoch, da z.B. in einem kubischen Gitter die Wechselwirkungsenergie mit den 6 nächsten Nachbarn gestört ist. Wesentlich geringere Energie haben kollektive Anregungen, bei denen eine große Zahl von einzelnen Spins nur wenig aus ihrer ursprünglichen Lage herausgekippt ist. Insgesamt erhalten wir damit aber auch die Änderung des Gesamtspins des Systems um eins. Magnonen besitzen also ganzzahligen Spin und folgen der *Bose-Einstein-Statistik*. Aus dem Kippen der Spins gegenüber dem äußeren Magnetfeld (oder der Magnetisierung der ferromagnetischen Probe) resultiert eine wellenförmige Präzessionsbewegung der Spins, wie sie in Abb. 2.41 gezeigt ist.

Die Anzahl der angeregten Magnonen hängt von der Temperatur ab und folgt für Temperaturen weit unterhalb der Curie-Temperatur einem  $T^{3/2}$ -Gesetz. Magnonen besitzen außerdem eine quadratische Dispersionsrelation  $\hbar\omega_{\text{Magnon}} \propto k_{\text{Magnon}}^2$ , so dass mit  $\hbar\omega_{\text{Magnon}} \simeq k_B T$  die Beziehung  $k_{\text{Magnon}} \propto T^{1/2}$  folgt. Insgesamt erhalten wir damit für den Widerstand durch Magnonen-Streuung<sup>44</sup>

$$\rho_{\text{Magnon}} \propto T^{3/2} T^{1/2} = T^2 . \quad (2.3.35)$$

In ungeordneten ferromagnetischen Legierungen erhalten wir dagegen

$$\rho_{\text{Magnon}} \propto T^{3/2} . \quad (2.3.36)$$

Das heißt, hier ist die reine Anzahl der Magnonen entscheidend.

<sup>44</sup>Wir können hier die gleiche Argumentation wie bei der Ableitung des Widerstand durch Elektron-Phonon-Streuung benutzen.

### 2.3.5 Vertiefungsthema: Der Kondo-Effekt

Wir haben in Abschnitt 2.3.4 gesehen, dass in erster Born'scher Näherung die Streuung von Leitungselektronen zu einem temperaturunabhängigen Beitrag im elektrischen Widerstand führt. Bereits im Jahr 1930 beobachteten **Meissner** und **Voigt**, dass nicht bei allen Metallen ein konstanter elektrischer Restwiderstand aufgrund von Streuung an Verunreinigungen bei tiefen Temperaturen erreicht wird.<sup>45</sup> Bestimmte Legierungen zeigen bei niedrigen Temperaturen eine Widerstandszunahme mit sinkender Temperatur, die mit dem Logarithmus  $\ln \frac{\epsilon}{k_B T}$  skaliert (siehe z.B. Abb. 2.42), wobei  $\epsilon$  eine charakteristische Energie ist. Es handelt sich dabei um unmagnetische Wirtsgitter (z.B. Cu, Ag, Au, Mg, Zn) mit einer geringen Konzentration von magnetischen Dopanden (10ppm bis 10% Fe, Mn, Cr, Co), die atomar gelöst sind. Der spezifische Widerstand solcher Metalle zeigt ein charakteristisches Minimum.

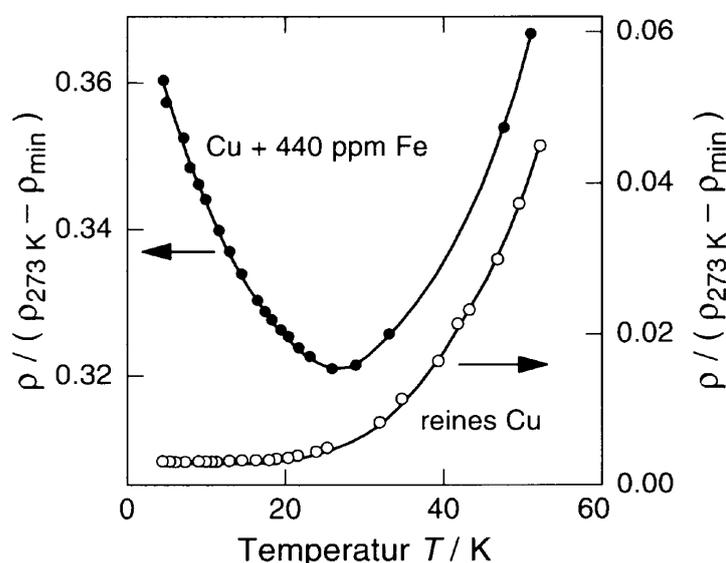


Abbildung 2.42: Temperaturabhängigkeit des reduzierten spezifischen Widerstands von reinem Cu und von Cu mit magnetischen Verunreinigungen (440 ppm Fe). Für tiefe Temperaturen steigt der Widerstand des verunreinigten Kupfers logarithmisch an (aus W. B. Pearson, Phil. Mag. 46, 911 und 920 (1955)).

Wie **Kondo** 1964 zeigte, basiert dieses Phänomen auf einem Streuprozess, bei dem nicht nur die Ladung, sondern auch der Spin der Leitungselektronen eine Rolle spielt. Voraussetzung für den Effekt ist, dass Störstellen mit lokalen magnetischen Momenten vorhanden sind, wie z.B. die  $d$ -Elektronen eines Übergangsmetallions in einem ansonsten nicht-magnetischen Wirtsmetall. Dann kann neben der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Leitungselektronen und den lokalisierten  $d$ -Elektronen auch die Austauschwechselwirkung zwischen den unterschiedlichen Elektronen eine Rolle spielen. Diese Wechselwirkung führt zu einem zusätzlichen Beitrag zum elektrischen Widerstand, der mit abnehmender Temperatur zunimmt. Diesen Effekt nennt man **Kondo-Effekt**.<sup>46</sup>

<sup>45</sup>W. Meissner, B. Voigt, Ann. Phys. 7, 761 und 892 (1930).

<sup>46</sup>J. Kondo, Progress in Theoretical Physics 32, 37 (1964). Kondo hat gezeigt, dass die anomal große Streuamplitude bei tiefen Temperaturen eine Folge der dynamischen Natur der Streuung ist, die durch die Austauschkopplung und die Schärfe der Fermi-Oberfläche zustande kommt. Zur genauen Erklärung des Kondo-Effekts verweisen wir auf einschlägige Lehrbücher: *Fundamentals of the Theory of Metals*, A. A. Abrikosov, North-Holland, Amsterdam (1988) oder *Tieftemperaturphysik*, Ch. Enss und S. Hunklinger, Springer, Berlin (2000).

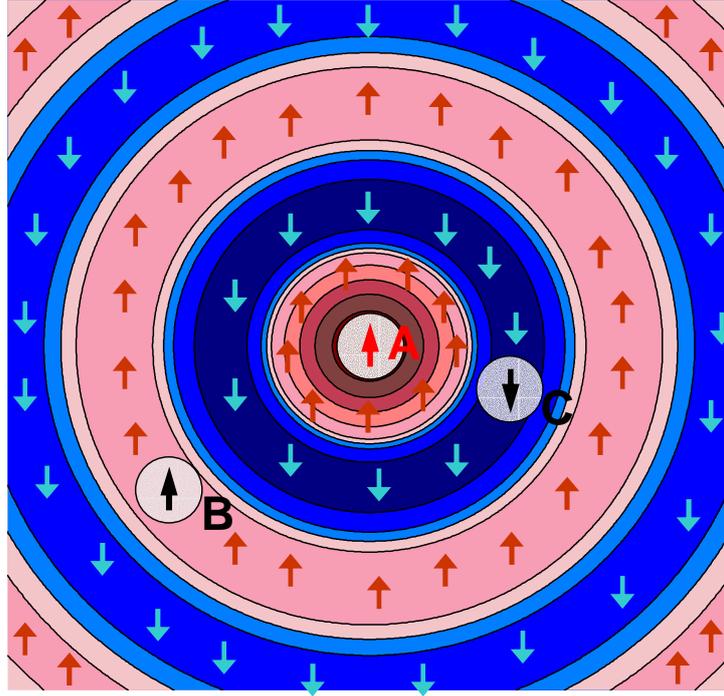


Abbildung 2.43: Friedel-Oszillationen in der Spinpolarisierung der  $s$ -Elektronen in der Umgebung eines Fremdatoms  $A$  (rot: positive Spinpolarisation, blau: negative Spinpolarisation) führen zu einer Wechselwirkung mit den benachbarten Fremdatomen  $B$  und  $C$ , die ferro- bzw. antiferromagnetisch ist. Die Friedel-Oszillationen klingen bei großen Abständen mit  $1/r^3$  ab.

Anschaulich können wir den Effekt damit erklären, dass die lokalen magnetischen Momente (der  $d$ -Elektronen), wie in Abb. 2.43 gezeigt ist, durch eine Polarisationswolke von Leitungselektronen ( $s$ -Elektronen) abgeschirmt werden. Dies führt zu einer Erhöhung des Streuquerschnitts und damit des spezifischen Widerstands. Das zentrale Ergebnis ist, dass der spinabhängige Beitrag zum Widerstand

$$\rho_{\text{Kondo}}(T) = \rho_0^{\text{sd}} \left[ 1 - 2JD(E_F) \ln \left( \frac{\tilde{\epsilon}}{k_B T} \right) \right] \quad (2.3.38)$$

beträgt. Hierbei ist  $D(E_F)$  die Zustandsdichte beim Fermi-Niveau,  $J$  die Austauschkonstante für die spinabhängige Wechselwirkung zwischen den  $s$ -Elektronen des Wirtsmetalls und den  $d$ -Elektronen des magnetischen Streuers und  $\tilde{\epsilon}$  eine charakteristische Energie. Diese Wechselwirkung führt zu den in Abb. 2.43 gezeigten *Friedel-Oszillationen* in der Spinpolarisation. Es sei hier noch angemerkt, dass der Abschirmeffekt der Leitungselektronen nicht nur zu einer Widerstandszunahme, sondern auch zu einer Abnahme der paramagnetischen Suszeptibilität der nicht-wechselwirkenden magnetischen Ionen führt. Für die verallgemeinerte Suszeptibilität ergibt sich eine analytische Funktion mit einer Singularität in der 2. Ableitung beim Wellenvektor  $q = 2k_F$ . Diese Singularität führt in der Fourier-Transformierten zu einem oszillierenden Term, der als *RKKY-Effekt*<sup>47</sup> bekannt ist. Die RKKY-Wechselwirkung zwischen benachbarten Kondo-Ionen führt über die sie umgebenden Polarisationswolken zu einer Kopplung zwischen den magnetischen Fremdatomen.

<sup>47</sup>RKKY: Rudermann, Kasuya, Kittel, Yosida. M. A. Rudermann, Ch. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954); T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16**, 45 (1956); K. Yosida, Phys. Rev. **106**, 893 (1957).

Zusammen mit dem Widerstand des Gitters und dem Restwiderstand erhalten wir für den Temperaturverlauf des Gesamtwiderstands

$$\rho(T) = aT^5 + b\rho_0 + b\rho_1 \ln \frac{\epsilon}{k_B T} . \quad (2.3.40)$$

Hierbei sind  $a$ ,  $b$ ,  $\rho_0$  und  $\rho_1$  Konstanten, wobei  $b$  durch die Konzentration  $n_d$  der magnetischen Verunreinigungen bestimmt wird. Für den Widerstand ergibt sich ein charakteristisches Minimum bei der Temperatur

$$T_{\min} = \left( \frac{b\rho_1}{5a} \right)^{1/5} . \quad (2.3.41)$$

Die Lage dieses Minimums hängt, wie experimentelle Ergebnisse bestätigen, nur schwach von der Konzentration der Verunreinigungen ab.

### 2.3.6 Vertiefungsthema:

#### Einfluss der Leitungselektronen auf lokale magnetische Momente

Um den Kondo-Effekt besser zu verstehen, diskutieren wir hier kurz den Einfluss von den Leitungselektronen ( $s$ -Elektronen) auf die lokalen magnetischen Momente aufgrund der  $d$ -Elektronen der Verunreinigungen. Insbesondere wollen wir die Frage klären, ob alle magnetischen Momente unter dem Einfluss einer  $s$ - $d$ -Wechselwirkung erhalten bleiben. Hierzu führen wir zuerst eine verallgemeinerte Suszeptibilität ein. Wir betrachten dazu die Reaktion eines Metalls auf ein sinusförmig oszillierendes Magnetfeld

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}_0 \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t) . \quad (2.3.42)$$

Die Response des Metalls wird eine Magnetisierung  $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{M}_0 \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$  sein, wobei  $\mathbf{M}_0 = \chi(\mathbf{q}, \omega)\mathbf{H}_0$ . Wir gehen hierbei von einem isotropen Material aus, so dass die Suszeptibilität  $\chi$  ein Skalar ist.

Die Suszeptibilität kann mit Hilfe von Störungstheorie analysiert werden.<sup>48,49</sup> Für ein paramagnetisches Metall, für das die Elektronenenergien unabhängig vom Spin sind, erhalten wir

$$\chi(\mathbf{q}, \omega) = -4\mu_B^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k},\uparrow} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}}{\epsilon_{\mathbf{k},\uparrow} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} - \omega + i\epsilon} . \quad (2.3.43)$$

Dieses Ergebnis kann wie folgt verstanden werden: In Störungstheorie 2. Ordnung macht ein Elektron einen virtuellen Übergang zwischen einem besetzten Zustand mit niedriger Energie zu einem unbesetzten mit hoher Energie. Aus diesem Grund treten im Zähler zwei Fermi-Faktoren auf. Die Suszeptibilität verschwindet, außer wenn die beiden Fermi-Faktoren unterschiedlich sind. Bei  $T = 0$  sind diese Faktoren entweder 0 oder 1, je nachdem ob die Energien oberhalb oder unterhalb der Fermi-Energie liegen. Wir sehen also, dass wir nur dann einen Beitrag erhalten, wenn einer der beiden Faktoren im Zähler 1 ist. Wenn  $\epsilon_{\mathbf{k},\uparrow} \leq \epsilon_F$  und  $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} \geq \epsilon_F$ ,

<sup>48</sup>C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, Wiley (1963).

<sup>49</sup>W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, W. H. Freeman (1980).

dann bedeutet dies notwendigerweise  $\epsilon_{\mathbf{k},\uparrow} < \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}$ , wodurch für  $\omega \rightarrow 0$  der Zähler negativ und deshalb  $\chi$  positiv wird. Der analoge Ausdruck für die dielektrische Suszeptibilität wird *Lindhard-Funktion* genannt.

Wir betrachten jetzt eine Verunreinigung in einem nicht-magnetischen Metall, die geladen sein kann und ein magnetisches Moment besitzen kann. Dadurch wird eine Verteilung von Ladungen und magnetischen Momenten um die Verunreinigung verursacht.

Für ein lokales Magnetfeld  $h$  am Ort  $\mathbf{r}'$  kann die Response als Fourier-Transformierte der oben abgeleiteten Suszeptibilität ausgedrückt werden:

$$m(\mathbf{r}) = \int d^3r' \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') h(\mathbf{r}') . \quad (2.3.44)$$

In gleicher Weise können wir die Polarisation durch ein lokales elektrisches Feld  $e$  durch

$$p(\mathbf{r}) = \int d^3r' \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e(\mathbf{r}') \quad (2.3.45)$$

ausdrücken. Die magnetische Suszeptibilität im Ortsraum erhalten wir durch Fourier-Transformation zu

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \frac{1}{\sqrt{N}} \int d^3q \exp[-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \chi(\mathbf{q}) \\ &= -\frac{4\mu_B^2}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \frac{\exp[-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')] (f_{\mathbf{k},\uparrow} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow})}{\epsilon_{\mathbf{k},\uparrow} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} + i\epsilon} . \end{aligned} \quad (2.3.46)$$

Die Existenz einer scharfen Fermi-Oberfläche bedeutet, dass  $\chi(\mathbf{q})$  eine schwache Singularität bei  $q = 2k_F$  besitzt. Dies wollen wir uns für eine kugelförmige Fermi-Oberfläche anhand von Abb. 2.44 klarmachen. Wir erinnern uns, dass, falls  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  innerhalb der Fermi-Kugel liegt,  $\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$  außerhalb liegen muss. Falls nun  $\mathbf{q}$  kleiner als  $2k_F$  ist, dann wird diese Bedingung nicht für alle  $\mathbf{k}$  erfüllt sein. Falls allerdings  $\mathbf{q}$  größer als  $2k_F$  ist, dann liegen *alle* Zustände bei  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$  außerhalb der Fermi-Kugel. In der Doppelsumme über  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{q}$  tritt dadurch eine schwache Diskontinuität (Änderung der Steigung) bei  $q = 2k_F$  auf. Dies kann wiederum anhand von Abb. 2.44 verstanden werden. Halten wir z.B.  $\mathbf{q}$  fest und summieren über  $\mathbf{k}$ , so werden für  $q < 2k_F$  zwar einige Werte von  $\mathbf{k}$  zur Summe beitragen (vergleiche Abb. 2.44a und b), für  $q \geq 2k_F$  werden aber alle Werte von  $\mathbf{k}$  beitragen. Daraus resultiert eine schwache Singularität von  $\chi$  im Impulsraum und die Fourier-Transformierte, d.h. die Suszeptibilität im Ortsraum zeigt dadurch Oszillationen. Im einfachen freien Elektronengasmodell tritt nur eine Oszillationsperiode auf, die durch den Fermi-Wellenvektor  $2k_F$  bestimmt ist.

### Friedel-Oszillationen

Unter Friedel-Oszillationen verstehen wir die Ladungsdichteoszillationen um eine geladene Störstelle. Die Ladung der Störstelle verursacht ein lokales elektrisches Potenzial, welches zu einer durch (2.3.46) gegebenen Antwort führt. Die abschirmende Ladungswolke der Metallelektronen fällt mit  $1/r^3$  ab und zeigt bei großen Abständen die charakteristischen Oszillationen mit  $2k_F$ . Die abschirmende Ladungsdichte kann durch

$$\Delta\rho(r) \propto \frac{\cos(2k_F r + \phi)}{r^3} \quad (2.3.47)$$

ausgedrückt werden. Hierbei ist  $\phi$  ein Phasenfaktor.

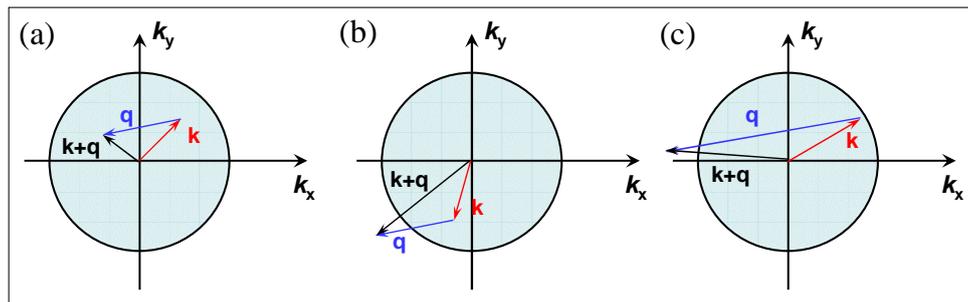


Abbildung 2.44: (a) Dieser Term kann nicht zu  $\chi$  beitragen, da beide Zustände Impulsen  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$  innerhalb der Fermi-Kugel entsprechen. (b) Dieser Term trägt zu  $\chi$  bei, wenngleich  $\mathbf{q}$  klein ist. (c) Dieser Term hat einen  $\mathbf{q}$  Wert, der so groß ist, dass dieser Term immer zu  $\chi$  beiträgt, egal welchen Wert  $\mathbf{k}$  hat.

### Ruderman-Kittel-Oszillationen

In analoger Weise antwortet ein nicht-magnetisches Metall auf die Störung durch eine Störstelle mit magnetischem Moment. Der lokale Spin  $\mathbf{S}$  der Verunreinigung besitzt eine Austauschenergie

$$\Delta E = -J \mathbf{S} \cdot \mathbf{s} \quad (2.3.48)$$

mit den Elektronenspins  $\mathbf{s}$ . Die Leitungselektronen sehen dadurch das lokale Feld  $J\mathbf{S}$  und mit Hilfe von (2.3.46) können wir die Response als Funktion des Abstandes durch

$$\Delta m(r) \propto \frac{\cos(2k_F r + \varphi)}{r^3} \quad (2.3.49)$$

ausdrücken. Dies hat eine sehr große Bedeutung, falls eine kleine Konzentration von magnetischen Verunreinigungen in einem paramagnetischen Metall gelöst ist. Jede Verunreinigung produziert um sich herum eine oszillierende Magnetisierung, die wiederum auf die anderen Verunreinigungen wirkt. Dadurch entsteht eine langreichweitige Wechselwirkung zwischen den Verunreinigungen, die durch  $(J\mathbf{S})^2$  charakterisiert ist und als RKKY-Wechselwirkung<sup>50,51,52</sup> (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) bekannt ist.

### Lokale Momente

Wir wollen nun unsere bisherige Betrachtung weiter vertiefen und die Wechselwirkung zwischen Elektronen genauer für den Fall einer starken Kopplung betrachten, für den die Störungstheorie nicht mehr angewendet werden kann. Wir wollen damit beginnen, zu überlegen, unter welchen Bedingungen eine Verunreinigung A ein magnetisches Moment tragen kann, wenn sie in einem nicht-magnetischen Metall B gelöst ist.

Wir betrachten eine Verunreinigung mit einem einzelnen  $d$ -Orbital  $\Psi_d$ , welches zwei Elektronen mit entgegengesetztem Spin aufnehmen kann. Die möglichen Energien sind  $0$ ,  $E_0$ ,  $E_0$  und  $2E_0 + U$  entsprechend einer Besetzung mit keinem, einem oder zwei Elektronen. Die Zustände schreiben wir als  $|0\rangle$ ,  $|\uparrow\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$  und  $|\uparrow\downarrow\rangle$ . Die Energie  $U$  charakterisiert die Coulomb-Abstoßung

<sup>50</sup>M. A. Rudermann, Ch. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954).

<sup>51</sup>T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16**, 45 (1956).

<sup>52</sup>K. Yosida, Phys. Rev. **106**, 893 (1957).

von zwei Elektronen im gleichen Orbital. Qualitativ könnten wir sagen, dass ein lokales Moment dann auftritt, wenn die Energie  $E_0$  unterhalb der Fermi-Energie liegt, d.h.  $E_0 < \epsilon_F$ , die Energie des Zustandes mit zwei Elektronen aber oberhalb der Fermi-Energie liegt, d.h.  $2E_0 + U > \epsilon_F$ . Diese Betrachtungsweise ist allerdings etwas zu einfach, da der lokalisierte Zustand mit den Leitungselektronen hybridisieren kann, wobei die Stärke der Hybridisierung durch eine Hüpfamplitude  $t$  charakterisiert werden kann. Eine endliche Hüpfamplitude erlaubt, dass der lokalisierte Zustand in einen Zustand zerfällt, für den sich kein Elektron im  $d$ -Orbital der Verunreinigung befindet und dafür ein zusätzliches Leitungselektron im Metall vorhanden ist. Das Energieniveau des lokalisierten Zustands wird dadurch verbreitert, wobei sich die Breite  $\Gamma$  aus der Unschärferelation  $\Gamma \simeq \hbar/\Delta t$  abschätzen lässt, wenn  $\Delta t$  die mittlere Lebensdauer des Verunreinigungszustandes ist. Da  $\Delta t$  umso kleiner ist, je größer die Hüpfwahrscheinlichkeit  $t^2$  und je größer die Zustandsdichte  $D(\epsilon_F)$  der Leitungselektronen beim Fermi-Niveau ist, erhalten wir

$$\Gamma \sim t^2 D(\epsilon_F) . \quad (2.3.50)$$

Wir müssen nun die Besetzung des  $d$ -Niveaus selbstkonsistent berechnen, was wir hier nicht explizit ausführen wollen. Die Dichte der  $d$ -Elektronenzustände ist durch eine Lorentz-Verteilung mit einer Breite  $\Gamma$  gegeben<sup>53</sup>

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(E - E_\sigma)^2 + \Gamma^2} , \quad (2.3.51)$$

wobei  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ . Damit können wir die Besetzungswahrscheinlichkeit des  $|\uparrow\rangle$  Zustands berechnen:

$$\langle n_{d\uparrow} \rangle = \int_0^{\epsilon_F} \rho_\uparrow(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left[ \frac{E_\uparrow - \epsilon_F}{\Gamma} \right] . \quad (2.3.52)$$

Die Energie des Zustandes  $|\uparrow\rangle$  hängt von der Besetzung des Zustandes  $|\downarrow\rangle$  ab, da die Elektronen ja wechselwirken. Benutzt man eine einfache Hartree-Fock-Näherung erhält man die Energie zu

$$E_\uparrow = E_0 + U \langle n_{d\downarrow} \rangle . \quad (2.3.53)$$

Dies führt zu zwei Gleichungen für  $\langle n_{d\uparrow} \rangle$  und  $\langle n_{d\downarrow} \rangle$

$$\langle n_{d\uparrow} \rangle = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left[ \frac{E_0 - \epsilon_F + U \langle n_{d\downarrow} \rangle}{\Gamma} \right] \quad (2.3.54)$$

$$\langle n_{d\downarrow} \rangle = \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left[ \frac{E_0 - \epsilon_F + U \langle n_{d\uparrow} \rangle}{\Gamma} \right] , \quad (2.3.55)$$

die selbstkonsistent gelöst werden müssen. Es gibt eine nicht-magnetische Lösung, für die  $\langle n_{d\uparrow} \rangle = \langle n_{d\downarrow} \rangle$ , und eine magnetische Lösung, für die  $\langle n_{d\uparrow} \rangle \neq \langle n_{d\downarrow} \rangle$ . Die Bedingung für das Auftreten eines lokalen magnetischen Moments hängt von  $E_0 - \epsilon_F$ ,  $\rho(\epsilon_F)$ ,  $t$  und  $U$  ab.<sup>54</sup> In jedem Fall ist allerdings ein genügend großes  $U$  erforderlich.

<sup>53</sup>A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Cambridge University Press (1993).

<sup>54</sup>P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).

Wir können jetzt den Kondo-Effekt nochmals diskutieren. Oben hatten wir phänomenologisch eine Kopplungskonstante  $J$  zwischen dem Verunreinigungsspin  $\mathbf{S}$  und dem Spin  $\mathbf{s}$  der Leitungselektronen eingeführt. Wir können jetzt die bisher geführte Diskussion benutzen, um  $J$  abzuschätzen. Ein Bedingung für das Auftreten eines lokalen magnetischen Moments war ein genügend großes  $U$ . Wollen wir ein zweites Elektron auf ein Verunreinigungsniveau setzen, das bereits mit einem Elektron besetzt ist. Aufgrund des Pauli-Prinzips muss das zweite Elektron entgegengesetzten Spin besitzen. Der Doppelbesetzungsprozess wird durch die endliche Hüpfamplitude  $t$  unterstützt und durch die Zusatzenergie  $U$  für Doppelbesetzung unterdrückt. In Störungstheorie 2. Ordnung kann die Energie insgesamt um  $t^2/U$  reduziert werden, allerdings nur bei entgegengesetztem Spin. Das heißt, die anti-parallele Einstellung ist bevorzugt und wir können dies als effektive antiferromagnetische Austauschenergie,  $J\mathbf{S} \cdot \mathbf{s}$ , schreiben, wobei wir jetzt wissen, dass  $J \sim t^2/U$ .

### 2.3.7 Vertiefungsthema: Der Kondo-Widerstand

Wir wollen in diesem Abschnitt einen Ausdruck für den Kondo-Widerstand (2.3.37) herleiten. Dazu müssen wir die in Abschnitt 2.3.4 benutzte Störungstheorie erster Ordnung auf eine Störungstheorie 2. Ordnung erweitern. Bei der Diskussion der Streuprozesse von Leitungselektronen an lokalen magnetischen Momenten müssen wir die Präsenz der anderen Leitungselektronen berücksichtigen, die wir durch Fermi-Verteilungen beschreiben. Bei der Diskussion der möglichen Prozesse können wir uns auf folgende zwei Prozesse beschränken:

- **Direkte Prozesse:** Das Elektron im Anfangszustand  $|\mathbf{k}, \boldsymbol{\alpha}\rangle$  geht zuerst in einen freien Zustand  $|\mathbf{k}_1, \boldsymbol{\alpha}_1\rangle$  und dann in den Endzustand  $|\mathbf{k}', \boldsymbol{\alpha}'\rangle$  über. Um die Übergangswahrscheinlichkeit zu bestimmen, müssen wir über alle möglichen Zwischenzustände aufsummieren, wobei natürlich gewährleistet sein muss, dass diese leer sind. Dies können wir mit einem Faktor  $1 - f(\mathbf{k}_1)$  berücksichtigen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} {}^a T_{kk'}^{\sigma\sigma'} &= \sum_{\sigma_1} \int \frac{\langle \mathbf{k}'\sigma' | H_{sd} | \mathbf{k}_1\sigma_1 \rangle \langle \mathbf{k}_1\sigma_1 | H_{sd} | \mathbf{k}\sigma \rangle [1 - f(\mathbf{k}_1)]}{\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}_1)} \\ &= \left( \frac{J}{n_d} \right)^2 \sum_{\sigma_1} \int \frac{(\mathbf{s}\mathbf{S})_{\sigma'\sigma_1} (\mathbf{s}\mathbf{S})_{\sigma_1\sigma} [1 - f(\mathbf{k}_1)]}{\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}_1)} \frac{d^3\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} . \end{aligned} \quad (2.3.56)$$

- **Austauschprozesse:** Eines der Elektronen in einem besetzten Zustand, z.B.  $|\mathbf{k}_1, \boldsymbol{\alpha}_1\rangle$ , geht zuerst in den Zustand  $|\mathbf{k}', \boldsymbol{\alpha}'\rangle$  über. Erst dann geht das Elektron im Zustand  $|\mathbf{k}, \boldsymbol{\alpha}\rangle$  in den jetzt freien Zustand  $|\mathbf{k}_1, \boldsymbol{\alpha}_1\rangle$  über. Im Gegensatz zum direkten Prozess muss jetzt hier der Zustand  $|\mathbf{k}_1, \boldsymbol{\alpha}_1\rangle$  besetzt sein und wir müssen den Faktor  $f(\mathbf{k}_1)$  einführen. Wir erhalten dann

$$\begin{aligned} {}^b T_{kk'}^{\sigma\sigma'} &= \sum_{\sigma_1} \int \frac{\langle \mathbf{k}_1\sigma_1 | H_{sd} | \mathbf{k}\sigma \rangle \langle \mathbf{k}'\sigma' | H_{sd} | \mathbf{k}_1\sigma_1 \rangle f(\mathbf{k}_1)}{\epsilon(\mathbf{k}_1) - \epsilon(\mathbf{k})} \\ &= - \left( \frac{J}{n_d} \right)^2 \sum_{\sigma_1} \int \frac{(\mathbf{s}\mathbf{S})_{\sigma_1\sigma} (\mathbf{s}\mathbf{S})_{\sigma'\sigma_1} f(\mathbf{k}_1)}{\epsilon(\mathbf{k}_1) - \epsilon(\mathbf{k})} \frac{d^3\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} . \end{aligned} \quad (2.3.57)$$

Das Minuszeichen ist dabei mit der Antisymmetrie der Wellenfunktionen von Elektronen bezüglich der Vertauschung der Teilchen verbunden.

Ohne Spinumkehr ist das Produkt der Matrixelemente unabhängig von der Reihenfolge und die Terme mit  $f(\mathbf{k}_1)$  in (2.3.56) und (2.3.57) heben sich auf. Für solche Prozesse ergibt sich deshalb ein kleiner und insbesondere temperaturunabhängiger Beitrag zur Streuamplitude. Mit Spinumkehr müssen wir aber berücksichtigen, dass im Operator  $\mathcal{H}_{\text{sd}}$  Ausdrücke auftreten, die nicht vertauschen und sich somit die Terme mit  $f(\mathbf{k}_1)$  nicht mehr herausheben. Es sind gerade diese Prozesse, die den temperaturabhängigen Beitrag zum elektrischen Widerstand liefern.

Aufgrund der Elastizität der Streuprozesse gilt  $\epsilon^n(\mathbf{k}') = \epsilon(\mathbf{k})$  und die Nenner unterscheiden sich deshalb nur im Vorzeichen. Die Zähler enthalten Spinfaktoren, die als

$$(\mathbf{sS})(\mathbf{sS}) \quad \text{und} \quad \sum_{i,k} \sigma^i \sigma^k S^i S^k \quad (2.3.58)$$

geschrieben werden können. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass  $S^i$  und  $S^k$  nicht vertauscht werden können, da es sich um Operatoren handelt. Die beiden Spinfaktoren sind deshalb unterschiedlich. Benutzen wir die Paulischen Spinmatrizen, so erhalten wir

$$(\mathbf{sS})(\mathbf{sS}) = S(S+1) - \mathbf{sS} \quad (2.3.59)$$

$$\sum_{i,k} \sigma^i \sigma^k S^i S^k = S(S+1) + \mathbf{sS} . \quad (2.3.60)$$

Setzen wir dies in (2.3.56) und (2.3.57) ein, so erhalten wir die Summe der beiden Ausdrücke zu

$$T_{kk'}^{\sigma\sigma'} = \left(\frac{J}{n_d}\right)^2 \int \left\{ \frac{S(S+1)\delta_{\sigma'\sigma}}{\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}_1)} \frac{2f(\mathbf{k}_1) - 1}{\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon(\mathbf{k}_1)} (\mathbf{sS})_{\sigma'\sigma} \right\} \frac{d^3\mathbf{k}_1}{(2\pi\hbar)^3} . \quad (2.3.61)$$

In 2. Ordnung Störungstheorie erhalten wir durch die Auswertung dieses Ausdrucks

$${}^2T_{kk'}^{\sigma\sigma'} = \left(\frac{J}{n_d}\right)^2 D(E_F) (\mathbf{sS})_{\sigma'\sigma} \ln\left(\frac{\tilde{\epsilon}}{\max(|\xi|, T)}\right) , \quad (2.3.62)$$

wobei  $\xi = \epsilon - E_F$  die Energie der Elektronen bezogen auf die Fermi-Energie ist und angenommen wurde, dass die Kopplungskonstante  $J$  nur im Energieintervall  $\delta E < |E_F \pm \tilde{\epsilon}|$  von null verschieden ist. In erster Ordnung hatten wir das Ergebnis

$${}^1T_{kk'}^{\sigma\sigma'} = -\left(\frac{J}{n_d}\right) (\mathbf{sS})_{\sigma'\sigma} \quad (2.3.63)$$

erhalten, so dass sich insgesamt die Streuamplitude

$$T_{kk'}^{\sigma\sigma'} = -\left(\frac{J}{n_d}\right) (\mathbf{sS})_{\sigma'\sigma} \left[ 1 - \left(\frac{J}{n_d}\right) D(E_F) \ln\left(\frac{\tilde{\epsilon}}{\max(|\xi|, T)}\right) \right] \quad (2.3.64)$$

ergibt. Da  $D(E_F)/n_d \sim D(E_F)/n_e \sim 1/E_F$ , sehen wir, dass wir eine Korrektur zur 1. Ordnung Streuamplitude in der Größenordnung  $\frac{J}{E_F} \ln\left(\frac{\tilde{\epsilon}}{\max(|\xi|, T)}\right)$  erhalten. Das Vorzeichen dieser Korrektur hängt vom Vorzeichen der Kopplungskonstante  $J$  ab. Für  $J > 0$  erhalten wir eine Abnahme, für  $J < 0$  eine Zunahme der Streuamplitude und damit des elektrischen Widerstands.

Dies hat eine einfache physikalische Erklärung. Für  $J > 0$  haben wir eine ferromagnetische Wechselwirkung, die die Spins der Leitungselektronen parallel zum Verunreinigungsspin ausrichtet. Falls der Gesamtspin aber  $S + 1/2$  entspricht, kann das Leitungselektron nicht mehr mit einem Spinflip gestreut. Das heißt, die Korrelation der Spins führt zu einer Abnahme der Streuamplitude. Für  $J < 0$  liegt eine anti-parallele Ausrichtung vor und der maximale Spin wird  $S - 1/2$  sein. In diesem Fall ist eine Spinflip-Streuung immer möglich und wir erhalten eine Erhöhung der Streuamplitude. Gehen wir zu genügend tiefen Temperaturen, so wird die logarithmische Korrektur bei der Temperatur

$$T_{\text{Kondo}} \sim \tilde{\epsilon} \exp \left[ -\frac{n_d}{|J|D(E_F)} \right] \quad (2.3.66)$$

dominierend. Diese Temperatur wird *Kondo Temperatur* genannt. Unterhalb dieser Temperatur sind die Näherungen, die wir zur Herleitung von (2.3.64) benutzt haben nicht mehr zulässig.

Betrachten wir den elektrischen Transport, so müssen wir nur Elektronen mit  $\xi \sim k_B T$  berücksichtigen. Ferner ist der spezifische Widerstand proportional zum Quadrat der Streuamplitude, so dass wir

$$\rho = \rho_V + \rho_{\text{Kondo}} = \rho_V + \rho_0^{sd} \left[ 1 - \frac{J}{n_d} D(E_F) \ln \left( \frac{\tilde{\epsilon}}{k_B T} \right) \right] \quad (2.3.68)$$

erhalten (vergleiche hierzu (2.3.37)). Hierbei resultiert der 1. Term aus der gewöhnlichen Potenzialstreuung und der 2. Term aus der Spinwechselwirkung, wobei  $\rho_0^{sd}$  das Ergebnis der Störungsrechnung 1. Ordnung ist. Wir sehen, dass für  $J < 0$  der Widerstand mit abnehmender Temperatur ansteigt. Dies wird in vielen Experimenten bestätigt.

Wir haben oben gesehen, dass die Wechselwirkung zwischen den Leitungselektronen und den Verunreinigungsspins zu so genannten RKKY-Oszillationen führt. Diese führen wiederum dazu, dass die Verunreinigungsspins über die polarisierten Leitungselektronen miteinander wechselwirken (indirekte Wechselwirkung). Bei genügend tiefen Temperaturen kann sogar ein kohärenter Singulett-Grundzustand zwischen dem lokalen Spin und den Spins der Leitungselektronen gebildet werden, man spricht von einem Kondo-Singulett. Falls diese Wechselwirkung groß genug ist, wird die Spinflip-Streuung der Leitungselektronen unterhalb einer charakteristischen Temperatur unterdrückt und der elektrische Widerstand wird unabhängig von der Temperatur.

### 2.3.8 Hall-Effekt in ferromagnetischen Metallen

Der Hall-Effekt in unmagnetischen Metallen wurde in den Abschnitten 2.2.3 und 2.2.4 ausführlich diskutiert. Bei der Diskussion des Hall-Effekts in ferromagnetischen Metallen gelten zunächst die gleichen Überlegungen mit dem Unterschied, dass die Probenmagnetisierung  $\mathbf{M}$  das äußere Feld  $\mathbf{H}$  verstärkt, so dass  $\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M})$ . Desweiteren bildet sich unterhalb der Curie-Temperatur durch die Austauschkopplung ein Majoritäts- und ein Minoritätsband aus, die üblicherweise eine unterschiedliche Zustandsdichte bei der Fermi-Energie besitzen. Dadurch nimmt oft im Wesentlichen nur noch ein Teilband am Ladungstransport teil. Damit

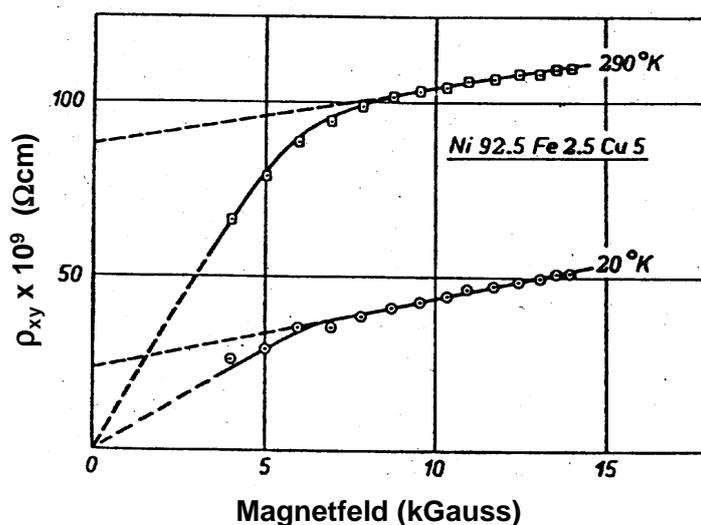


Abbildung 2.45: Anomaler Hall-Effekt von Nickellegierungen bei 20 K und 290 K (aus J. Smit, Physica XXI, 877 (1955)).

nimmt die scheinbare Ladungsträgerkonzentration ab und der Hall-Koeffizient entsprechend zu. Für Nickel findet man z.B. bei  $T_C$  ein Leitungselektron pro Gitterplatz, in der ferromagnetischen Phase dagegen nur noch 0.3 Elektronen pro Gitterplatz (siehe Abb. 2.45).

Misst man den Hall-Effekt in ferromagnetischen Metallen, so findet man eine starke Änderung der Querspannung in kleinen Feldern (siehe Abb. 2.45). Diese starke Magnetfeldabhängigkeit ist meist um ca. 2 Größenordnungen höher als man aufgrund der Ladungsträgerdichte erwarten würde. Dieser als *anomaler Hall-Effekt* bezeichnete Effekt kann, abhängig vom betrachteten Metall, das gleiche (siehe Abb. 2.45) oder das entgegengesetzte Vorzeichen (siehe Abb. 2.46) vom gewöhnlichen Hall-Effekt besitzen, so dass eine Feldverstärkung als mögliche Ursache ausgeschlossen werden kann.

Nach einer theoretischen Arbeit von **Karplus** und **Luttinger**<sup>55</sup> können die beiden Anteile (normal und anomal) der gemessenen Hall-Spannung in folgender Form ausgedrückt werden:

$$\rho_{xy}(H) = R_0 \mu_0 H + R_A \mu_0 M(H) . \quad (2.3.70)$$

Hierbei repräsentiert der erste Summand den normalen Hall-Widerstand, der proportional zum angelegten Feld ist, und der zweite den anomalen Hall-Widerstand, der proportional zur Probenmagnetisierung ist. Der Koeffizient  $R_A$  hängt stark von der Temperatur ab, wohingegen  $R_0$  nur wenig mit der Temperatur variiert. Der anomale Effekt skaliert linear mit der Magnetisierung und saturiert deshalb in hohen Magnetfeldern, so dass hier der normale Beitrag dominiert.

Die Ursache des anomalen Hall-Effekts sind asymmetrische Streueffekte, d.h. die Elektronen werden bei einem Streuprozess nicht mit gleicher Wahrscheinlichkeit nach links und rechts gestreut. Diese asymmetrischen Streueffekte ergeben sich aus einer endlichen Spin-Bahn-Kopplung. In Abb. 2.47 ist gezeigt, dass dabei verschiedene Wechselwirkungen möglich sind, die sich gegenseitig addieren, aber auch teilweise kompensieren können:

<sup>55</sup>Karplus und Luttinger, Phys. Rev. **95**, 1154 (1994).

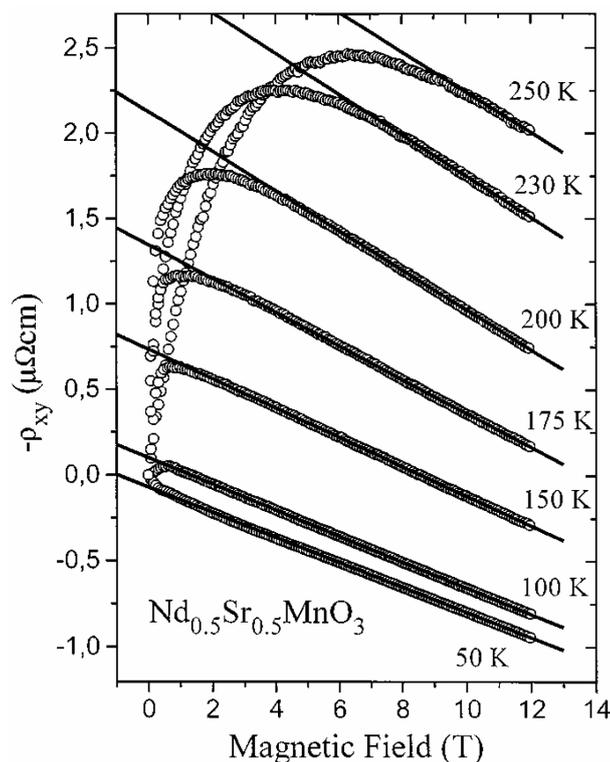


Abbildung 2.46: Anomaler Hall-Effekt in  $\text{Nd}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$  (aus P. Wagner et al., Europhysics Letters 41, 49 (1998)).

- Bei der Streuung eines spinpolarisierten Elektrons an einem unmagnetischen Streuzentrum (unmagnetische Störstelle, Phonon) gibt es eine Wechselwirkung zwischen dem Spin des Elektrons und seinem eigenen Bahnmoment bezüglich des Streuzentrums.<sup>56</sup>
- Besitzt das Streuzentrum selbst ein magnetisches Moment (z.B. magnetisches Streuzentrum, Spinwelle), so kann dieses sowohl mit dem Spinmoment als auch mit dem Bahnmoment des Elektrons in Wechselwirkung treten.

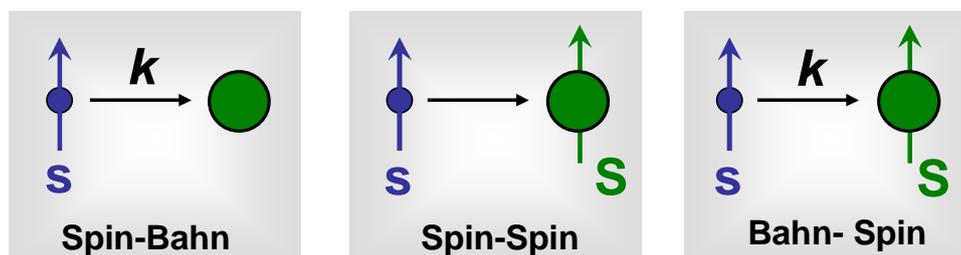


Abbildung 2.47: Schematische Darstellung der verschiedenen Wechselwirkungsmöglichkeiten bei der Streuung eines Elektrons an magnetischen und unmagnetischen Streuzentren.  $S$  und  $s$  sind hierbei die Spinoperatoren des Elektrons und des Streuzentrums,  $k$  ist das Bahnmoment.

Die beiden Terme in (2.3.69) können als Summe geschrieben werden, da die Symmetrie der beiden Hall-Effekte gleich ist. Die Vektor-Symmetrie der Spin-Bahn-Kopplung,  $L \cdot s$ , die für

<sup>56</sup>Diesen Effekt gibt es auch prinzipiell in unmagnetischen Metallen. Allerdings ist hier die Spinpolarisation des Elektronengases in äußeren Magnetfeldern (Pauli-Paramagnetismus) sehr gering.

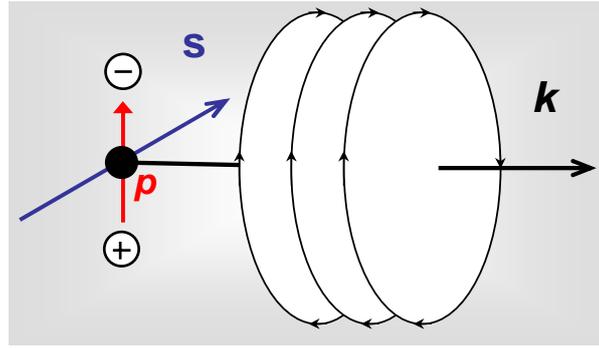


Abbildung 2.48: Zur Veranschaulichung der Ursache eines elektrischen Dipolmoments  $\mathbf{p}$  durch eine endliche Spin-Bahn-Kopplung. Die Bahnbewegung des Elektrons erzeugt ein Magnetfeld, das mit dem Spinmoment wechselwirkt und zu einer vertikalen Translation und damit zu einem elektrischen Dipolmoment führt.

den anomalen Hall-Effekt verantwortlich ist, ist mit der radialen Komponente der Lorentz-Kraft,  $\mathbf{r} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{B})$ , die den normalen Hall-Effekt bestimmt, wie folgt verknüpft:

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{s} = (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{s} \propto \mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{M}) \propto \mathbf{r} \cdot (\mathbf{J} \times \mathbf{M}) . \quad (2.3.71)$$

Wir sehen, dass das mikroskopische Bild für den anomalen Hall-Effekt ähnlich zu dem des normalen Hall-Effekts ist, mit dem Unterschied, dass  $\mathbf{H}$  durch  $\mathbf{M}$  ersetzt werden muss.

### Anomaler Hall-Effekt durch Skew-Scattering

Die folgenden Überlegungen zum asymmetrischen Streuquerschnitt beruhen auf dem oben erstgenannten Effekt. Bei einer endlichen Spin-Bahn-Kopplung trägt jedes sich bewegende Elektron mit Spin  $\mathbf{s}$  das elektrische Dipolmoment  $\mathbf{p} = -\lambda_{LS} \mathbf{k} \times \mathbf{s}$ , wobei  $\lambda_{LS}$  der Spin-Bahn-Kopplungsparameter und  $\mathbf{k}$  das Bahnmoment des Elektrons ist. Anschaulich können wir uns dies so vorstellen, dass sich auf den elektrischen Kreisstrom des magnetischen Dipols eine Translationskomponente addiert, die in Richtung senkrecht zum Spin  $\mathbf{s}$  und zum Bahnmoment  $\mathbf{k}$  des Elektrons ist. Wir können auch argumentieren, dass durch die Bahnbewegung des Elektrons ein Magnetfeld erzeugt wird, das mit dem Spinmoment wechselwirkt und zu einer Translation senkrecht zu  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{s}$  führt (siehe Abb. 2.48). Diese Translation führt zu einem elektrischen Dipolmoment senkrecht zu  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{s}$ .

Wir betrachten jetzt die potenzielle Energie des elektrischen Dipols im homogenen elektrischen Feld und im inhomogenen Feld eines Streuzentrums. Im homogenen elektrischen Feld hängt die potenzielle Energie des elektrischen Dipols nur vom Winkel zwischen  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{E}$  ab und es gilt  $\mathcal{E}_{\text{pot}} = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}$ . Dadurch ergibt sich ein ortsunabhängiges Drehmoment. In einem räumlich inhomogenen elektrischen Feld (z.B. Elektronenwolke des Streuzentrums) wirkt auf den elektrischen Dipol noch eine translatorische Kraft  $\mathbf{F} = \mathbf{p} \cdot \nabla \mathbf{E}$  mit der potentiellen Energie  $\mathcal{E}_{\text{pot}} = \mathbf{p} \cdot \nabla(e\phi(\mathbf{r})) = -\lambda_{LS}(\mathbf{k} \times \mathbf{s}) \cdot \nabla V(\mathbf{r})$ . Hierbei ist  $V(\mathbf{r}) = e\phi(\mathbf{r})$  und  $\phi(\mathbf{r})$  ist das elektrostatische Potenzial. Berücksichtigen wir noch die potenzielle Energie  $\mathcal{E}_{\text{pot}} = -e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$  durch die Kraft auf die Ladung  $e$  im homogenen elektrischen Feld  $\mathbf{E}$ , so ergibt sich insgesamt der Hamiltonian<sup>57</sup>

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} + V(\mathbf{r}) - \lambda_{LS}(\mathbf{k} \times \mathbf{s}) \cdot \nabla V(\mathbf{r}) . \quad (2.3.72)$$

<sup>57</sup>Eine detaillierte Herleitung kann in P. Nozières und C. Lewiner, Journal de Physique **34**, 901 (1973) gefunden werden.

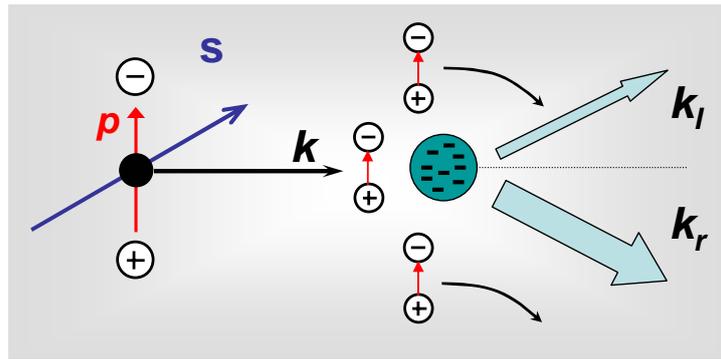


Abbildung 2.49: Schematische Darstellung der Streuung eines bewegten Spins an der Ladungsverteilung einer Störstelle.

Hierbei sind die beiden letzten Terme lokale Korrekturterme, die nur in der unmittelbaren Umgebung des Streuzentrums auftreten. Diese Terme führen mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit (im Sinne der Störungsrechnung) zu einem Übergang der einlaufenden Welle mit Wellenzahl  $\mathbf{k}$  in den gestreuten Zustand  $\mathbf{k}'$ . Für das Übergangsmatrixelement gilt

$$\langle \mathbf{k}' | V - \lambda_{LS} (\mathbf{k} \times \mathbf{s}) \cdot \nabla V(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \{ 1 - i\lambda_{LS} (\mathbf{k} \times \mathbf{k}') \cdot \mathbf{s} \} . \quad (2.3.73)$$

Unter Anwendung Fermi's Goldener Regel<sup>58</sup> und der Annahme eines kurzreichweitigen,  $\delta$ -förmigen Streupotenzials der Höhe  $V_0$  ergibt sich für die normierte Übergangswahrscheinlichkeit zwischen den Zuständen  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{k}'$

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left\{ 1 + \frac{2\pi}{\hbar} \lambda_{LS} V_0 (\mathbf{k} \times \mathbf{k}') \cdot \mathbf{s} \right\} . \quad (2.3.74)$$

Der erste Term in der geschweiften Klammer resultiert aus der bereits diskutierten Potenzialstreuung allein und der zweite Term ist der Beitrag aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung. Sein Vorzeichen hängt von  $V_0$  ab.

In Abb. 2.49 ist schematisch die Streuung eines bewegten Spins (entspricht elektrischem Dipol aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung) an einer Ladungsverteilung (z.B. Elektronenwolke einer Störstelle) dargestellt. Aus (2.3.74) folgt, dass der zweite Term in der geschweiften Klammer für  $\mathbf{k}_r$  und  $\mathbf{k}_l$  unterschiedliches Vorzeichen besitzt, d.h. die Streuung nach rechts und links ist unterschiedlich groß. In dem in Abb. 2.49 gezeigten Beispiel ist die Streuung nach rechts größer. Dieses asymmetrische Verhalten nennt man *Skew Scattering*.

Aufgrund des Skew Scatterings erzeugt jedes Streueignis einen transversalen Strombeitrag. Dadurch baut sich eine Querspannung auf. Im Gleichgewichtsfall kompensiert die Kraft auf die Leitungselektronen aufgrund dieser anomalen Hall-Spannung gerade den Skew Scattering Beitrag. Da die betrachteten Streueignisse gleichzeitig den longitudinalen und den transversalen Widerstand verursachen, erwarten wir, dass der Längswiderstand  $\rho_{xx}$  proportional zum Hallwiderstand  $\rho_{xy}$  ist. Es ist außerdem anschaulich klar, dass eine Querspannung aufgrund von Skew Scattering nur dann auftreten kann, wenn die Spins der Leitungselektronen eine Vorzugsrichtung besitzen. Anderenfalls würden sich die Beiträge aufgrund von Skew Scattering

<sup>58</sup>Die Übergangswahrscheinlichkeit ist proportional zum Betragsquadrat des Matrixelements und zur Dichte der verfügbaren Endzustände.

wegmitteln. Deshalb erwarten wir, dass der Hall-Widerstand auch proportional zur Spinpolarisation der Leitungselektronen ist, die bei Bandferromagneten wiederum proportional zur Magnetisierung ist. Wir erwarten deshalb insgesamt

$$\rho_{xy} \propto \rho_{xx} M(H) . \quad (2.3.75)$$

### Anomaler Hall-Effekt durch Side-Jump Scattering

Experimentelle Ergebnisse zum Hall-Effekt in Ferromagneten zeigen entgegen der Erwartung (2.3.75) häufig eine quadratische Abhängigkeit zwischen anomalem Hall-Widerstand und dem Längswiderstand, d.h.  $\rho_{xy} \propto \rho_{xx}^2$ . Diese Abhängigkeit kann mit dem *Side-Jump Modell*<sup>59</sup> erklärt werden. Bei diesem Modell geht man davon aus, dass die Elektronen während des Streuprozesses noch eine seitliche Versetzung der Bahnkurve (in eine bevorzugte Richtung) erfahren. Diese Versetzung liegt typischerweise in der Größenordnung von  $10^{-14}$  bis  $10^{-10}$  m.

Der Side-Jump Prozess kann anschaulich folgendermaßen verstanden werden: Das einlaufende Elektron besitzt neben der kinetischen Energie  $\hbar^2 k^2 / 2m$  die potentielle Energie des elektrischen Dipols im elektrischen Feld  $\mathbf{E}$ . Nach einem elastischen Stoß ist die kinetische Energie  $\hbar^2 k'^2 / 2m$  unverändert. Allerdings hat sich die Richtung des elektrischen Dipolmoments geändert, da dieses immer senkrecht zu  $\mathbf{k}$  oder  $\mathbf{k}'$  ist. Mit der Richtungsänderung von  $\mathbf{p}$  ist eine Änderung der potentiellen Energie  $-\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}$  verbunden. Aus Gründen der Energieerhaltung muss deshalb das Elektron im Potenzial des Streuzentrums zu einem größeren oder kleineren Stoßparameter verschoben werden. Da zum einen die Häufigkeit der Streueignisse proportional zum longitudinalen Widerstand  $\rho_{xx}$  ist und andererseits die Größe der seitlichen Versetzung vom anliegenden elektrischen Feld abhängt, das bei gegebener Stromdichte ebenfalls proportional zu  $\rho_{xx}$  ist, erwarten wir insgesamt<sup>60</sup>

$$\rho_{xy} \propto \rho_{xx}^2 M(H) . \quad (2.3.76)$$

Skew-Scattering und Side-Jump treten in der Regel zusammen auf, so dass die Kombination der beiden Effekte zu

$$\rho_{xy} \propto a \rho_{xx} + b \rho_{xx}^2 \quad (2.3.77)$$

führt. Dieser Zusammenhang gilt natürlich nur dann, wenn  $\rho_{xx}$  und  $\rho_{xy}$  auf dem gleichen Streuprozess beruhen. Der Skew-Scattering Beitrag dominiert, da er linear mit  $\rho_{xx}$  geht, üblicherweise bei tiefen Temperaturen, während der Side-Jump Beitrag mit seiner quadratischen Abhängigkeit bei höheren Temperaturen dominiert. Tragen wir  $\rho_{xy}$  doppeltlogarithmisch gegen  $\rho_{xx}$  auf, so finden wir entsprechend abschnittsweise die Exponenten 1 und 2 bzw. Exponenten zwischen 1 und 2.<sup>61</sup>

Zur Ermittlung des anomalen Hall-Koeffizienten bei einer bestimmten Temperatur können wir im Prinzip bei bekanntem  $M(H)$  den Karplus-Luttinger Ansatz (Gl.(2.3.69)) verwenden und erhalten daraus  $R_0$  und  $R_A$  als Fitparameter. Häufig ist aber  $M(H)$  nicht mit genügender Genauigkeit bekannt. In diesem Fall können wir  $R_A$  bestimmen aus

<sup>59</sup>Siehe hierzu L. Berger, Phys. Rev. **B 2**, 4559 (1970).

<sup>60</sup>Die Größe dieser seitlichen Versetzung  $\delta y$  kann über die Beziehung  $\rho_{xy} / \rho_{xx}^2 = (ne^2 / v_F m) \delta y$  abgeschätzt werden. Typische Zahlenwerte z.B. für die dotierten Manganate liegen in der Größenordnung von  $10^{-13}$  m pro Streueignis; siehe G. Jakob et al., Phys. Rev. B (1998).

<sup>61</sup>Würde z.B.  $\rho_{xx}$  durch Elektron-Phonon Streuung oder Streuung an Domänen- oder Korngrenzen dominiert, so würde man kein Skalierungsverhalten entsprechend (2.3.77) erwarten, da diese Streuprozesse zwar zum longitudinalen Widerstand beitragen, nicht aber zum anomalen Hall-Effekt, da sie keine Rechts-Links-Asymmetrie besitzen.

- der Anfangssteigung von  $d\rho_{xy}(H \rightarrow 0)/dH = R_0\mu_0 + R_A\mu_0\chi$ , wobei die Suszeptibilität durch die Magnetisierung in kleinen Feldern approximiert wird. Diese Methode funktioniert wegen der Divergenz von  $\chi$  unterhalb von  $T_C$  nur gut im paramagnetischen Bereich.
- dem spontanen Hall-Effekt: Für Felder oberhalb der Sättigung wird die lineare  $\rho_{xy}(H)$ -Kurve auf  $H = 0$  zurückextrapoliert. Der Achsenabschnitt  $\rho_{xy}^* = \mu_0 M_s R_A$  entspricht dann vollständig dem anomalen Hall-Widerstand der gesättigten Probe, bereinigt um den Beitrag des normalen Hall-Effekts.<sup>62</sup> Diese Methode funktioniert gut im ferromagnetischen Bereich weit unterhalb von  $T_C$ , wo  $M_s$  nur wenig von der Temperatur abhängt, aber nicht im paramagnetischen Bereich, da hier die Magnetisierung erst in sehr hohen Feldern sättigt.

---

<sup>62</sup>Eigentlich müsste man bis zum negativen Koerzitivfeld zurückextrapolieren, vergleiche Abschnitt 3.