

---

# Spinelektronik

---

**Vorlesungsskript zur Vorlesung im SS 2004**

**Prof. Dr. Rudolf Gross**

**und**

**Dr. Achim Marx**

**Walther-Meissner-Institut**

**Lehrstuhl für Technische Physik (E23)**

**Walther-Meissner-Strasse 8**

**D-85748 Garching**

**Rudolf.Gross@wmi.badw.de**



# Inhaltsverzeichnis

<b>Vorwort</b>	<b>9</b>
<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>I Grundlagen</b>	<b>9</b>
<b>1 Grundbegriffe und Messmethoden</b>	<b>11</b>
1.1 Grundbegriffe des Magnetismus . . . . .	12
1.2 Messmethoden . . . . .	13
<b>2 Spinabhängiger Transport</b>	<b>15</b>
2.1 Magnetoresistive Effekte – ein phänomenologischer Überblick . . . . .	16
2.1.1 Der positive Magnetwiderstand . . . . .	16
2.1.2 Der negative Magnetwiderstand – Streuung an Spinunordnung . . . . .	17
2.1.3 Der anisotrope Magnetwiderstand – AMR . . . . .	18
2.1.4 Der Riesenmagnetwiderstand – GMR . . . . .	19
2.1.5 Der Tunnelmagnetwiderstand – TMR . . . . .	22
2.1.6 Der kolossale Magnetwiderstand – CMR . . . . .	24
2.2 Elektrischer Transport in unmagnetischen Metallen . . . . .	28
2.2.1 Boltzmann-Gleichung und Relaxationszeit . . . . .	28
2.2.2 Elektrische Leitfähigkeit . . . . .	33
2.2.3 Magnetwiderstand und Hall-Effekt im Einbandmodell . . . . .	36
2.2.4 Vertiefungsthema: Magnetwiderstand und Hall-Effekt im Zweibandmodell . . . . .	38
2.2.5 Streuprozesse . . . . .	42
2.2.6 Streuprozesse in dünnen metallischen Schichten . . . . .	48
2.3 Elektrischer Transport in magnetischen Metallen . . . . .	52

2.3.1	Experimentelle Beobachtungen . . . . .	52
2.3.2	Das Zwei-Spinkanal-Modell . . . . .	54
2.3.3	Streuung in magnetischen Systemen . . . . .	57
2.3.4	Streuung von Leitungselektronen an lokalisierten magnetischen Momenten	61
2.3.5	Vertiefungsthema: Der Kondo-Effekt . . . . .	67
2.3.6	Vertiefungsthema: Einfluss der Leitungselektronen auf lokale magnetische Momente . . . . .	69
2.3.7	Vertiefungsthema: Der Kondo-Widerstand . . . . .	73
2.3.8	Hall-Effekt in ferromagnetischen Metallen . . . . .	75
<b>II</b>	<b>Magneto-resistive Effekte</b>	<b>83</b>
<b>3</b>	<b>AMR-Effekt</b>	<b>85</b>
3.1	Experimentelle Beobachtungen . . . . .	86
3.2	Anschauliche Erklärung des AMR . . . . .	88
3.3	Widerstandstensor und AMR-Effekt . . . . .	91
3.3.1	Anwendungsaspekte . . . . .	92
3.4	Außergewöhnlicher Hall-Effekt . . . . .	94
<b>4</b>	<b>CMR-Effekt</b>	<b>95</b>
4.1	Experimentelle Beobachtungen . . . . .	97
4.2	Kristallstruktur . . . . .	99
4.2.1	Toleranzfaktor . . . . .	99
4.2.2	Vertiefungsthema: Ruddlesden-Popper-Serie . . . . .	102
4.3	Elektronische Struktur . . . . .	103
4.3.1	Das Kristallfeld . . . . .	103
4.3.2	Jahn-Teller-Effekt . . . . .	108
4.4	Grundlagen zur magnetischen Struktur . . . . .	113
4.4.1	Experimentelle Beobachtungen . . . . .	113
4.4.2	Der Superaustausch . . . . .	114
4.4.3	Vertiefungsthema: Ladungstransfer- und Mott-Hubbard-Isolatoren . . . . .	118
4.4.4	Die Goodenough-Kanamori-Anderson Regeln . . . . .	120

4.4.5	Der Doppelaustausch . . . . .	124
4.5	Elektrische Transporteigenschaften . . . . .	132
4.5.1	Temperatur- und Magnetfeldabhängigkeit des spezifischen Widerstands .	132
4.5.2	Skalenverhalten des CMR-Effektes . . . . .	134
<b>5</b>	<b>GMR-Effekt</b>	<b>137</b>
5.1	Zwischenschicht-Austauschkopplung . . . . .	139
5.1.1	Experimentelle Beobachtungen . . . . .	139
5.1.2	Kopplungsarten . . . . .	140
5.1.3	Phänomenologische Beschreibung der Zwischenschichtkopplung . . . . .	143
5.1.4	Mikroskopisches Modell der Zwischenschichtkopplung . . . . .	144
5.1.5	RKKY-Wechselwirkung . . . . .	152
5.2	Der Riesenmagnetwiderstand . . . . .	154
5.2.1	Einfache Modellvorstellungen . . . . .	154
5.2.2	Intrinsischer GMR . . . . .	157
5.2.3	Extrinsischer GMR . . . . .	160
5.3	Skalenverhalten des GMR . . . . .	165
5.3.1	Anwendungsaspekte . . . . .	166
<b>6</b>	<b>Spinventile</b>	<b>169</b>
6.1	Austausch-Anisotropie . . . . .	171
6.1.1	Phänomenologische Beschreibung der Austausch-Anisotropie . . . . .	171
6.1.2	Theoretische Modelle zur Austausch-Anisotropie . . . . .	176
6.2	Realisierung von Spinventilen . . . . .	187
6.2.1	Optimierung des magnetoresistiven Effekts von Spinventilen . . . . .	188
6.2.2	Wahl des Antiferromagneten . . . . .	190
<b>7</b>	<b>TMR-Effekt</b>	<b>195</b>
7.1	Theoretische Behandlung des Tunnelns von Elektronen . . . . .	198
7.1.1	Elastisches Tunneln durch eine eindimensionale rechteckförmige Barriere – zeitunabhängiger Ansatz . . . . .	198
7.1.2	Vertiefungsthema: Elastisches Tunneln durch eine eindimensionale rechteckförmige Barriere – zeitabhängiger Ansatz . . . . .	202
7.1.3	Vertiefungsthema: Elastisches Tunneln durch eine eindimensionale Barriere beliebiger Form – WKB-Näherung . . . . .	203

7.1.4	Elastisches Tunneln in planaren Metall/Isolator/Metall-Kontakten . . . . .	204
7.1.5	Vertiefungsthema: Tunneln unter Berücksichtigung des Bildpotenzials . . . . .	209
7.1.6	Bandstruktureffekte beim elastischen Tunneln . . . . .	210
7.1.7	Vertiefungsthema: Resonantes Tunneln . . . . .	211
7.2	NIN- und NIS-Kontakte . . . . .	214
7.3	Ferromagnet/Isolator/Supraleiter-Kontakte . . . . .	218
7.3.1	Zeemann-Aufspaltung der Quasiteilchen-Zustandsdichte in Supraleitern	218
7.3.2	Zustandsdichte und Spinpolarisation in Ferromagneten . . . . .	221
7.4	Ferromagnet/Supraleiter-Kontakte: Andreev-Reflexion . . . . .	227
7.4.1	Andreev-Streuung an Metall/Supraleiter-Grenzflächen . . . . .	227
7.4.2	Andreev-Streuung an Ferromagnet/Supraleiter-Grenzflächen . . . . .	234
7.5	Ferromagnet/Isolator/Ferromagnet-Kontakte . . . . .	240
7.5.1	Jullière – Modell . . . . .	242
7.5.2	Vertiefungsthema: Weiterentwicklungen des Jullière-Modells . . . . .	244
7.6	Experimente zu FM/I/FM-Tunnelkontakten . . . . .	252
7.6.1	Untersuchung und Verbesserung der Barriereneigenschaften . . . . .	254
7.6.2	Temperatur- und Spannungsabhängigkeit des JMR . . . . .	255
7.6.3	Vertiefungsthema: Dotierung der Tunnelbarriere . . . . .	258
7.6.4	Vertiefungsthema: FIF-Tunnelkontakte mit nichtmagnetischen Zwischenschichten . . . . .	260
7.6.5	Vertiefungsthema: Grenzflächeneffekte und Vorzeichen der Spinpolarisation . . . . .	261
7.6.6	Neue Materialsysteme . . . . .	264
7.6.7	Vertiefungsthema: Rastertunnelmikroskopie . . . . .	266
7.7	Inelastisches Tunneln . . . . .	269
7.7.1	Inelastisches Tunneln mit Wechselwirkungsprozessen in der Barriere . . .	269
7.7.2	Inelastisches Tunneln mit Wechselwirkungsprozessen in den Tunnelektroden . . . . .	271
7.7.3	Tunneln über Zwischenzustände – Glazmann-Matveev Modell . . . . .	271
7.8	Vertiefungsthema: Tunneln durch ferromagnetische Barrieren – Spinfilter . . . . .	277

7.9	Vertiefungsthema: Austauscheffekte an Grenzflächen zu Ferromagneten . . . . .	280
7.10	Spinpolarisation: Theorie vs. Experiment . . . . .	283
7.10.1	Definition der Spinpolarisation . . . . .	283
7.10.2	Bestimmung der Spinpolarisation mit Andreev-Streuung . . . . .	289
7.10.3	Spinpolarisation – Nachbetrachtung . . . . .	291
<b>8</b>	<b>EMR- und BMR-Effekt</b>	<b>295</b>
8.1	Der ballistische Magnetwiderstand . . . . .	296
8.1.1	Punktkontakte . . . . .	296
8.1.2	Ballistischer Magnetowiderstandseffekt in Nanokontakten . . . . .	298
8.1.3	BMR-Effekt: Artefakte . . . . .	301
<b>III</b>	<b>Spininjektion und Spintransport</b>	<b>303</b>
<b>IV</b>	<b>Materialien für die Spinelektronik</b>	<b>305</b>
<b>V</b>	<b>Anwendungen</b>	<b>307</b>
<b>9</b>	<b>XMR-Effekte – Anwendungen</b>	<b>309</b>
9.1	Sensoren . . . . .	312
9.1.1	GMR Sensoren . . . . .	315
9.1.2	Anwendungen von GMR-Sensoren . . . . .	321
9.2	Magnetoresistive Leseköpfe . . . . .	326
9.2.1	Design von Lese- und Schreibköpfen . . . . .	328
9.3	Magnetic Random Access Memory – MRAM . . . . .	333
9.3.1	Geschichtlicher Hintergrund . . . . .	333
9.3.2	MRAM basierend auf AMR und GMR . . . . .	336
9.3.3	MRAM basierend auf Spinventilen . . . . .	338
9.3.4	MRAM basierend auf magnetischen Tunnelkontakten . . . . .	338
9.3.5	Ansteuerkonzepte für MRAMs . . . . .	340

<b>VI</b>	<b>Quanten-Spinelektronik</b>	<b>345</b>
<b>VII</b>	<b>Appendix</b>	<b>347</b>
A	Literatur . . . . .	349
B	SI-Einheiten . . . . .	350
B.1	Geschichte des SI Systems . . . . .	350
B.2	Die SI Basiseinheiten . . . . .	352
B.3	Einige von den SI Einheiten abgeleitete Einheiten . . . . .	353
B.4	Vorsätze . . . . .	355
B.5	Abgeleitete Einheiten und Umrechnungsfaktoren . . . . .	356
C	Physikalische Konstanten . . . . .	360



**Teil I**

**Grundlagen**





## **Teil II**

# **Magnetoresistive Effekte**



## Kapitel 7

# Spinabhängiges Tunneln und Tunnelmagnetowiderstand

Der spinabhängige Transport in Tunnelkontakten aus zwei ferromagnetischen Elektroden, die durch eine dünne isolierende Barriere voneinander getrennt sind, wurde bereits im Jahr 1975 von **Jullière** untersucht.<sup>1</sup> Allerdings war der für ferromagnetische Tunnelkontakte gefundene Magnetowiderstandseffekt klein und schlecht reproduzierbar, weshalb er lange Zeit in Vergessenheit geriet. Erst nach der Entdeckung des Riesenmagnetowiderstandseffekts Ende der 1980er Jahre wurde der spinabhängige Transport in Tunnelstrukturen wieder verstärkt untersucht. Die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse wurde aufgrund der Weiterentwicklung der Herstellungstechniken für magnetische Schichtstrukturen wesentlich verbessert. Heute können ferromagnetische Tunnelkontakte mit hohen Magnetowiderstandseffekten reproduzierbar hergestellt<sup>2,3</sup> und das spinabhängige Tunneln in diesen Strukturen gezielt untersucht und für Anwendungen ausgenutzt werden.

Bei der Behandlung des Riesenmagnetowiderstandseffekts in Kapitel 5 hatten wir Schichtsysteme aus ferromagnetischen Materialien betrachtet, welche über eine dünne metallische, nicht-magnetische Zwischenschicht gekoppelt sind (z.B. Fe/Cr/Fe). Wir hatten aber bereits in Abschnitt 2.1.4 darauf hingewiesen, dass eine antiferromagnetische Kopplung der ferromagnetischen Schichten über die nicht-magnetischen metallischen Zwischenschichten keine Grundvoraussetzung für die Beobachtung eines sehr großen magnetoresistiven (GMR) Effekts darstellt. Dies wird bei den Spin-Valve-Systemen (siehe Kapitel 6) und granularen Systemen bereits realisiert, bei denen ferromagnetische Schichten bzw. Körner oder Cluster durch metallische Zwischenschichten bzw. eine metallische Matrix voneinander entkoppelt werden. Wir wollen jetzt Systeme betrachten, bei denen die ferromagnetischen Schichten bzw. Körner durch isolierende Schichten bzw. eine isolierende Matrix voneinander getrennt sind. Wir erhalten dann ferromagnetische Tunnelkontakte (Ferromagnet/Isolator/Ferromagnet – FM/I/FM - Kontakte) oder ferromagnetische granulare Systeme mit einer isolierenden Matrix (siehe Abb. 7.1). Der Ladungstransport zwischen den ferromagnetischen Bereichen findet dann nicht mehr durch diffusiven Transport in einem Metall sondern durch eine isolierende Barriere statt. Falls die Dicke dieser isolierenden Schicht klein genug ist, besteht eine endliche Wahrscheinlichkeit für das quantenmechanische Tunneln von Ladungsträgern durch die isolierende Barriere und wir können den Ladungstransport experimentell beobachten.

---

<sup>1</sup>M. Jullière, Phys. Lett. A **54**, 225 (1975).

<sup>2</sup>siehe z.B. J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong, R. Meservey, Phys. Rev. Lett. **74**, 3273 (1995).

<sup>3</sup>T. Miyazaki et al., J. Magn. Magn. Mat. **151**, 403 (1995).

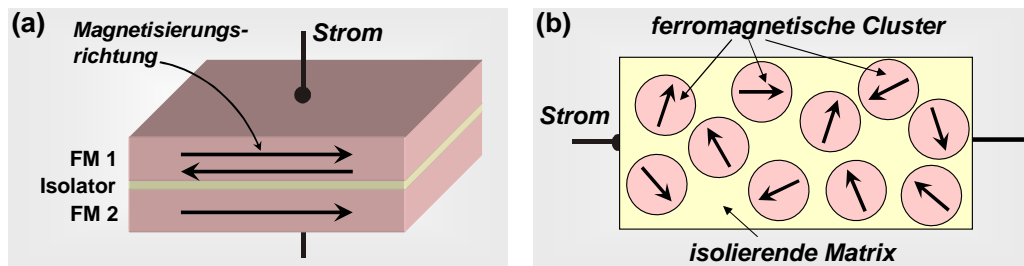


Abbildung 7.1: Ferromagnetischer Tunnelkontakt (a) und granulares ferromagnetisches System mit isolierender Matrix (b).

Das Tunneln zwischen zwei ferromagnetischen Materialien sowie zwischen Ferromagneten und normalleitenden Metallen oder Supraleitern wurde schon vor vielen Jahren untersucht. Basierend auf grundlegenden experimentellen Arbeiten zur Spinerhaltung beim Tunnelprozess der Elektronen und zur Spinpolarisation der Leitungselektronen in Ferromagneten zu Beginn der 1970er Jahre<sup>4</sup> entwickelte **Jullière** im Jahr 1975 ein quantitatives Modell,<sup>5</sup> welches voraussagt, dass das Tunneln in FM/I/FM-Kontakten zu einem sehr hohen magnetoresistiven Effekt führen sollte, dem so genannten *Tunnelmagnetowiderstand* (Tunneling Magnetoresistance: TMR).<sup>6</sup>

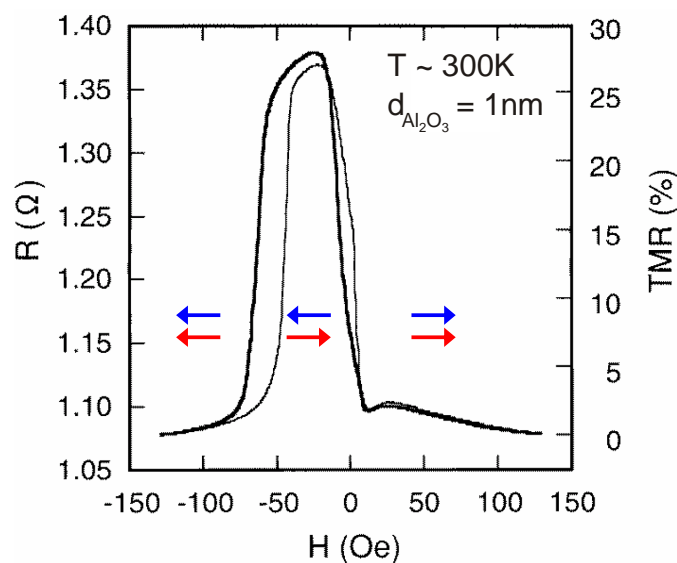


Abbildung 7.2: Widerstands-Magnetfeld Kurve eines ferromagnetischen Fe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Fe Tunnelkontakts. Eine Fe-Elektrode ist mit einer FeMn-Schicht austauschgekoppelt, wodurch die Verschiebung der  $R(H)$ -Kurve resultiert (aus T. Miyazaki et al., J. Phys. D: Appl. Phys. 31, 630 (1998)).

Trotz der zahlreichen theoretischen Vorarbeiten zum Tunneln zwischen zwei Ferromagneten bzw. zwischen einem Ferromagneten und einem Supraleiter gelang erst Mitte der 1990er Jahre, sicherlich stimuliert durch die Entdeckung des GMR und die Weiterentwicklungen im Bereich der Dünnschichttechnologie, auch im experimentellen Bereich der Durchbruch.<sup>7</sup> Inzwischen können mit ferromagnetischen Tunnelkontakten auf der Basis von Übergangsmetallen TMR-

<sup>4</sup>R. Meservey, P. M. Tedrow, P. Fulde, Physical Review Letters 25, 1270 (1970); P. M. Tedrow, R. Meservey, Physical Review Letters 26, 192 (1971).

<sup>5</sup>M. Jullière, Phys. Lett. A 54, 225 (1975).

<sup>6</sup>Manchmal wird in der Literatur auch die Bezeichnung Junction Magnetoresistance – JMR verwendet.

<sup>7</sup>J. S. Moodera, L. R. Kinder, T. M. Wong, R. Meservey, Phys. Rev. Lett. 74, 3273 (1995).

Werte über 50% bei Raumtemperatur realisiert werden (ein Beispiel zeigt Abb. 7.2). Die physikalischen Grundlagen des TMR-Effekts, insbesondere des spinabhängigen Tunnelns, werden heute immer noch intensiv theoretisch und experimentell erforscht.

Neben den grundlagenorientierten Forschungsarbeiten zum spinabhängigen Tunneln bestehen aber auch starke Aktivitäten zur Entwicklung von TMR-Bauelementen, die in verschiedenen Anwendungsbereichen eingesetzt werden sollen. Das derzeit wohl prominenteste (potenzielle) Anwendungsbeispiel für den TMR sind *Magnetic Random Access Memories (MRAMs)*. Diese neuartigen Datenspeicher könnten möglicherweise in Zukunft die heute verwendeten *Dynamic Random Access Memories (DRAMs)* ablösen und besitzen damit ein enorm hohes Marktpotenzial. Der wesentliche Vorteil der MRAMs, die eine sehr hohe Speicherdichte zulassen, liegt darin begründet, dass sie sowohl sehr kurze Zugriffszeiten erlauben als auch nichtflüchtig sind. Weitere potenzielle Anwendungen des TMR-Effekts liegen im Bereich magnetischer Leseköpfe für Festplatten und empfindlicher Magnetfeldsensoren. Auf verschiedene Anwendungen von magnetoresistiven Bauelementen (inkl. TMR-Bauelemente) wird später in Teil V noch ausführlicher eingegangen.

Für das Verständnis des Tunnelmagnetowiderstandseffekts ist ein grundlegendes Verständnis des spinabhängigen Tunnelns notwendig. Wir werden uns deshalb zunächst mit den Grundlagen zum Tunneleffekt beschäftigen und dabei auf die Besonderheiten beim Tunneln von spinpolarisierten Ladungsträgern eingehen. Danach werden wir das Jullière-Modell als einfachstes Modell für die Beschreibung des Tunnelmagnetowiderstands in FM/I/FM-Kontakten einführen und auf einige experimentelle Ergebnisse sowie auf neuere theoretische Konzepte zur Beschreibung des spinabhängigen Tunnelns eingehen. Wir wollen auch spezielle Probleme von magnetischen Tunnelkontakten wie z.B. die Abhängigkeit des Tunnelmagnetowiderstands von der anliegenden Spannung, von der Temperatur und von den Barriereneigenschaften diskutieren. Schließlich werden wir außer den elastischen Tunnelprozessen auch inelastisches Tunneln betrachten, wobei z.B. magnetische Grenzflächenstreuung und die Anregung von Magnonen eine Rolle spielen wird.



## 7.1 Theoretische Behandlung des Tunnelns von Elektronen

Tunnelphänomene spielen in vielen Bereichen der Physik eine bedeutende Rolle. In Festkörpern stellt das Tunneln von Ladungsträgern einen wichtigen Transportmechanismus dar. Künstlich erzeugte Tunnelkontakte spielen für das Studium von vielen physikalischen Fragestellungen eine wichtige Rolle und werden in einer Vielzahl von elektronischen Bauelementen verwendet. Im Gegensatz zu anderen Transportmechanismen wie der Diffusion, kann der Tunneltransport nicht klassisch beschrieben werden sondern bedarf einer quantenmechanischen Behandlung.

Es gibt verschiedene theoretische Ansätze zur Behandlung des Elektronentunnelns. Es ist deshalb wichtig, die folgenden grundsätzlichen Unterscheidungen zu machen:

- *Elastisches und inelastisches Tunneln:*

Wir sprechen von *elastischem Tunneln*, wenn sich beim Tunnelprozess die Energie des Elektrons nicht ändert. Im Gegensatz dazu spricht man von *inelastischem Tunneln*, wenn das Elektron beim Tunnelprozess Energie gewinnt oder verliert. Dies kann durch Anregung oder Absorption von elementaren Anregungen im Festkörper (Phonon, Magnon, Plasmon, ...) geschehen.

- *Ein-dimensionales vs. drei-dimensionales Tunneln:*

In theoretischen Abhandlungen wird aus Gründen der Einfachheit häufig eine ein-dimensionale Potenzialbarriere angenommen. Dies ist für die Beschreibung von planaren Metall/Isolator/Metall (MIM) Tunnelkontakten oft bereits eine ausreichende Näherung. Für andere Tunnelstrukturen (wie z.B. das Tunneln von einer Spitze in einen planaren Festkörper) müssen wir allerdings ein drei-dimensionales Problem betrachten.

- *Rechteckförmige Potentialbarriere vs. beliebig geformte Potenzialbarriere:*

Die Form der Potenzialbarriere wird wiederum aus Gründen der Einfachheit meist als rechteckförmig angenommen. Diese Annahme ist aber für die meisten realen Tunnelbarrieren nur eine schlechte Näherung. Anstatt mit einer idealen Tunnelbarriere haben wir es oft mit einer Barriere zu tun, die eine variierende Barrierenhöhe und auch Löcher hat (also eher das Aussehen der Schweizer Alpen und von Schweizer Käse hat).

- *Zeitunabhängige vs. zeitabhängige Behandlung:*

Tunnelprozesse werden theoretisch mit zwei unterschiedlichen Ansätzen behandelt. Man benutzt entweder einen zeitunabhängigen Ansatz, wobei man mit der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung außerhalb und innerhalb der Barriere startet, oder einen zeitabhängigen Ansatz, wobei man mit der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung startet und Fermi's Goldene Regel der Störungstheorie erster Ordnung benutzt.

### 7.1.1 Elastisches Tunneln durch eine eindimensionale rechteckförmige Barriere – zeitunabhängiger Ansatz

Wir betrachten die in Abb. 7.3 gezeigte Situation, bei der ein Elektron mit Energie  $E$  und Masse  $m$  auf eine Barriere der Höhe  $V_0$  trifft. Die jetzt beschriebene Methode wird auch Wave-Matching-Methode genannt, da wir die Schrödinger-Gleichung in unterschiedlichen Gebieten lösen und die Lösungen dann stetig anpassen. Für die drei Gebiete I, II und III erhalten

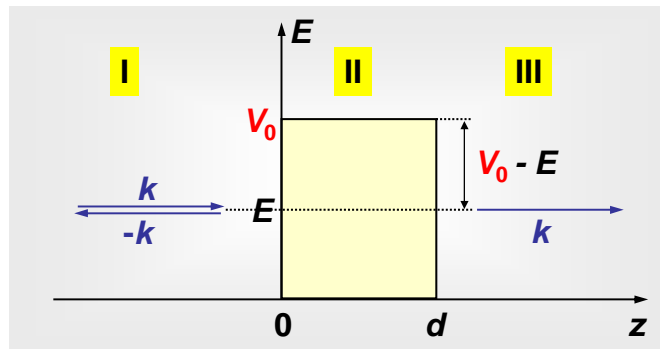


Abbildung 7.3: Eindimensionale, rechteckförmige Potenzialbarriere mit Höhe  $V_0$  und Breite  $d$ .

wir folgende zeitunabhängige Schrödinger-Gleichungen und die dazugehörigen Ansätze der Elektronen-Wellenfunktionen:

**Gebiet I:**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_I}{\partial z^2} = E \Psi_I \quad (7.1.1)$$

$$\Psi_I = e^{ikz} + A e^{-ikz} \quad \text{mit } k^2 = 2mE/\hbar^2 . \quad (7.1.2)$$

**Gebiet II:**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_{II}}{\partial z^2} + V_0 \Psi_{II} = E \Psi_{II} \quad (7.1.3)$$

$$\Psi_{II} = B e^{-\kappa z} + C e^{\kappa z} \quad \text{mit } \kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2 . \quad (7.1.4)$$

**Gebiet III:**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_{III}}{\partial z^2} = E \Psi_{III} \quad (7.1.5)$$

$$\Psi_{III} = D e^{ikz} . \quad (7.1.6)$$

Wir interessieren uns für das Verhältnis des einfallenden ( $J_i$ ) und des transmittierten Elektronenstroms ( $J_t$ ), das durch den Transmissionskoeffizienten der Barriere beschrieben wird. Mit dem quantenmechanischen Teilchenstromoperator erhalten wir

$$\begin{aligned} J_i &= \frac{-i\hbar}{2m} \left( \Psi_I^*(z) \frac{\partial \Psi_I(z)}{\partial z} - \Psi_I(z) \frac{\partial \Psi_I^*(z)}{\partial z} \right) \\ &= \frac{\hbar k}{m} \end{aligned} \quad (7.1.7)$$

$$\begin{aligned} J_t &= \frac{-i\hbar}{2m} \left( \Psi_{III}^*(z) \frac{\partial \Psi_{III}(z)}{\partial z} - \Psi_{III}(z) \frac{\partial \Psi_{III}^*(z)}{\partial z} \right) \\ &= \frac{\hbar k}{m} |D|^2 . \end{aligned} \quad (7.1.8)$$

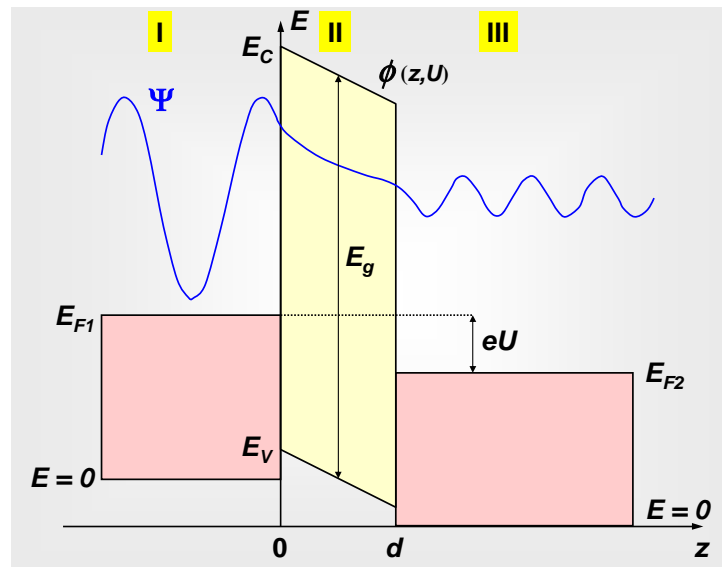


Abbildung 7.4: Stationäre Gesamtwellenfunktion in einer Tunnelstruktur.

Damit erhalten wir die Transmissionswahrscheinlichkeit zu

$$T = \frac{J_t}{J_i} = |D|^2. \quad (7.1.9)$$

Durch stetige Anpassung der Lösungen an den Potentialsprünge bei  $z = 0$  und  $z = d$  erhalten wir die Gesamtwellenfunktion, die beispielhaft in Abb. 7.4 gezeigt ist. Mit dieser Wellenfunktion kann dann  $D$  und damit  $T$  bestimmt werden:<sup>8</sup>

$$T = \frac{1}{1 + \frac{(k^2 + \kappa^2)^2}{4k^2\kappa^2} \sinh^2(\kappa d)}. \quad (7.1.10)$$

Aus diesem exakten Ausdruck für  $T$  ergibt sich in der Näherung  $\kappa d \gg 1$  die bekannte Näherung

$$T = \left( \frac{4k\kappa}{k^2 + \kappa^2} \right)^2 e^{-2\kappa d}. \quad (7.1.11)$$

Das heißt, der Transmissionskoeffizient und damit der Tunnelstrom nimmt exponentiell mit zunehmender Dicke der Potenzialbarriere ab. Die charakteristische Abklingrate  $\kappa = [2m(V_0 - E)]^{1/2}/\hbar$  hängt von der effektiven Höhe  $(V_0 - E)$  der Potenzialbarriere ab. Für typische Höhen der Potenzialbarriere im eV-Bereich beträgt  $1/\kappa$  weniger als  $1\text{\AA}$ . Das heißt, der Exponentialfaktor in (7.1.11) wird bereits bei Barriendicken im Bereich weniger  $\text{\AA}$  sehr klein. Ebenso ändert sich natürlich der Tunnelstrom bereits bei Änderung der Barriendicke im  $\text{\AA}$ -Bereich stark. Es soll hier noch angemerkt werden, dass auch für  $E > V_0$  die Transmissionswahrscheinlichkeit nicht wie in der klassischen Mechanik gleich 1 ist.

<sup>8</sup>Siehe z.B. E. L. Wolf, *Principles of Electron Tunneling Spectroscopy*, Oxford Science Publications, Oxford University Press (1989).

Das obige Beispiel lässt sich leicht auf eine Potentialschwelle  $V(x, y, z)$  im dreidimensionalen Raum erweitern, solange das Potenzial unabhängig von  $x$  und  $y$  ist. Die zugehörige Wellenfunktion hat dann die Form

$$\Phi(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_y y)} \Psi(z) , \quad (7.1.12)$$

wobei  $\Psi$  wieder durch (7.1.2) bis (7.1.6) gegeben ist, da wegen der Translationsinvarianz des Potentials in der  $xy$ -Ebene die parallele Komponente  $\mathbf{k}_{\parallel}$  des Wellenvektors erhalten bleibt. Als Ergebnis erhalten wir eine  $k_{\parallel}$ -abhängige Transmission

$$T(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{1}{1 + \frac{(k_z^2 + \kappa^2)^2}{4k_z^2 \kappa^2} \sinh^2(\kappa d)} \quad (7.1.13)$$

mit

$$\kappa(\mathbf{k}_{\parallel}) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E_z)} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( V_0 - E + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} \right)} . \quad (7.1.14)$$

und

$$k_z = \sqrt{\frac{2mE_z}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} \right)} . \quad (7.1.15)$$

Wir sehen, dass  $T$  nur von der für die Bewegung in  $z$ -Richtung zur Verfügung stehenden Energie  $E_z = \hbar^2 k_z^2 / 2m = E - \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m$  abhängt.

Beim Transport in Metallen ist die Gesamtenergie  $E$  der Ladungsträger in etwa durch die Fermi-Energie  $E_F$  gegeben. Um die mittlere Transmission durch die Barriere zu erhalten, muss daher  $T(k_{\parallel})$  mit Hilfe von (7.1.15) über alle  $k_{\parallel}$  für eine gegebene Fermi-Energie integriert werden:

$$T_{\text{tot}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \iint d^2 k_{\parallel} T(k_{\parallel}) . \quad (7.1.16)$$

Hierbei kann nach (7.1.14)  $\kappa(k_{\parallel}) \simeq \kappa(0) + \frac{1}{2} \frac{k_{\parallel}^2}{\kappa(0)}$  verwendet werden. Der Faktor  $1/(2\pi)^2$  resultiert aus der Zustandsdichte pro Einheitsvolumen im  $k$ -Raum. Für  $\kappa(0)d \gg 1$  (dicke oder hohe Barrieren) wird das Integral im Wesentlichen von den Beiträgen mit kleinen  $k_{\parallel}$  bestimmt, das heißt, von Elektronen die fast senkrecht auf die Barriere einfallen. Nach Ausführen der Integration erhalten wir in diesem Grenzfall

$$T_{\text{tot}} \simeq T(0) \frac{\kappa(0)}{4\pi d} . \quad (7.1.17)$$

### 7.1.2 Vertiefungsthema:

#### Elastisches Tunneln durch eine eindimensionale rechteckförmige Barriere – zeitabhängiger Ansatz

Falls der Transmissionskoeffizient  $T$  klein ist, scheint eine störungstheoretische Behandlung des Tunnelns angemessen. Allerdings gibt es keinen offensichtlichen Weg, wie man einen zusätzlichen Term in den Hamilton-Operator einbringen kann, der als klein betrachtet werden kann. Anstatt Zustände einzuführen, die die exakten Lösungen eines angenäherten Hamilton-Operators darstellen, hat **Bardeen** im Jahr 1961<sup>9</sup> folgende Näherungslösungen des exakten Hamilton-Operators für das Gebiet II verwendet

$$\Psi_l(z) = a e^{-\kappa z} \quad z \geq 0 \quad (7.1.18)$$

$$\Psi_r(z) = b e^{\kappa(z-d)} \quad z \leq d \quad (7.1.19)$$

Hierbei wurde für die linke und die rechte Elektrode das Potenzial  $V(z)$  derart modifiziert, dass die Wellenfunktionen vollständig links und rechts lokalisiert sind und kein Tunneln auftreten kann. Die Wellenfunktionen des linken und rechten Halbraums sind dann Eigenfunktionen zu verschiedenen Hamiltonoperatoren  $H_l$  und  $H_r$  und sind daher nicht orthogonal. Trotzdem können wir nach Bardeen "*Fermi's Goldene Regel*" anwenden, um die Übergangswahrscheinlichkeit von einem Zustand  $\Psi_l$  in einen rechten Zustand  $\Psi_r$  zu berechnen. Wir betrachten dazu ein Elektron zunächst im Zustand  $\Psi_l$  und benutzen die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$H\Psi(t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \quad (7.1.20)$$

mit

$$H = (H_l + H_r) + H_T = H_0 + H_T \quad (7.1.21)$$

$$H_0 \Psi_l = E_l \Psi_l \quad (7.1.22)$$

Hierbei sind  $H_l$  und  $H_r$  die Hamilton-Operatoren für den Bereich I (links) und II (rechts). Mit dem Ansatz

$$\Psi(t) = \alpha(t) \Psi_l e^{-iE_l t/\hbar} + \beta(t) \Psi_r e^{-iE_r t/\hbar} \quad (7.1.23)$$

erhalten wir aus (7.1.20) die Größe

$$M = \int \Psi_r^* (H - E_l) \Psi_l dz = \int \Psi_r^* H_T \Psi_l dz \quad (7.1.24)$$

die wir als effektives Tunnelmatrixelement für den Übergang von  $\Psi_l$  nach  $\Psi_r$  identifizieren können.  $H_T$  ist der so genannte *Transfer-Hamilton-Operator*, der das Tunneln der Elektronen von der einen zur anderen Elektrode beschreibt. Es ist bemerkenswert, dass die Störung  $H_T = H - E_l$  nicht klein sein muss, die angewandte Näherung aber trotzdem gute Ergebnisse liefert. Dies liegt daran, dass bei einer dicken oder hohen Barriere der Überlapp der Wellenfunktionen sehr klein ist und die Störung  $H_T$  nur in diesem Gebiet benötigt wird.

<sup>9</sup>J. Bardeen, Phys. Rev. Lett. 6, 57 (1961).

Für stark abschwächende Potenzialbarrieren können wir nun *Fermi's Goldene Regel*

$$w_{12} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \rho(E_r) \delta(E_r - E_l) . \quad (7.1.25)$$

benutzen, die die Übergangsrate von einem gegebenen Zustand auf der linken Seite in einen Satz von Zuständen mit gleicher Energie und Zustandsdichte  $\rho(E_r)$  auf der rechten Seite angibt. Um den transmittierten Strom zu erhalten, müssen wir noch mit  $2e$  (Spinartung) multiplizieren:

$$J_t = 2e \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \rho(E_r) . \quad (7.1.26)$$

Es sei darauf hingewiesen, dass  $J_t$  den Strom aufgrund der Übergangsrate von einem Zustand auf der linken Seite in einen Satz von Zuständen mit Zustandsdichte  $\rho(E_r)$  auf der rechten Seite angibt. Um den Gesamtstrom aufgrund aller möglicher besetzter Zustände in alle möglichen Endzustände zu berechnen, müssen wir noch über alle möglichen Anfangs- und Endzustände aufsummieren, wobei wir deren Besetzungswahrscheinlichkeiten mit entsprechenden Fermi-Faktoren berücksichtigen müssen.

Setzen wir die expliziten Ausdrücke für  $\Psi_l$  und  $\Psi_r$  ein (vergleiche (7.1.19)), so erhalten wir das gleiche Ergebnis für den Transmissionskoeffizienten wie im vorigen Abschnitt. Der Wave-Matching Ansatz und der Transfer-Hamiltonian Ansatz sind also für den Fall stark abschwächender Tunnelbarrieren äquivalent. Die Transfer-Hamiltonian Methode hat aber den Vorteil, dass sie nicht auf den eindimensionalen Fall beschränkt ist.

Basierend auf (7.1.26) wird oft festgestellt, dass der Tunnelstrom proportional zur elektronischen Zustandsdichte  $\rho$  ist. Berechnen wir allerdings das Tunnelmatrixelement  $M$  explizit und gelangen dadurch zu dem Ausdruck für den Transmissionskoeffizienten  $T$ , so sehen wir, dass dieser nicht mehr einfach mit der Zustandsdichte verknüpft ist. Deshalb ist bei der Interpretation von Tunnelexperimenten zur quantitativen Bestimmung der Zustandsdichte Vorsicht geboten. Es gibt nur wenige spezielle Fälle (z.B. Tunneln zwischen normalleitendem und supraleitendem Metall), wo der Tunnelstrom genaue Information über die Zustandsdichte liefert.

### 7.1.3 Vertiefungsthema:

#### Elastisches Tunneln durch eine eindimensionale Barriere beliebiger Form – WKB-Näherung

Eine Erweiterung der obigen Überlegungen auf Potenzialbarrieren beliebiger Form kann entweder durch eine Unterteilung der realen Barriere in viele rechteckförmige Potenzialbarrieren<sup>10</sup> oder mit der *WKB-Näherung* gemacht werden, die von **Wentzel**, **Kramers** und **Brillouin** bereits im Jahr 1926 entwickelt wurde.<sup>11</sup> Die WKB-Methode kann, obwohl sie eine semi-klassische Näherung darstellt, auch in Bereichen verwendet werden, die klassisch verboten sind, d.h. in Bereichen, in denen die Energie der Elektronen kleiner als die Barrierenhöhe ist. Allerdings ist die WKB-Methode nur für eindimensionale Probleme vernünftig anwendbar, obwohl es Verallgemeinerungen auf mehrdimensionale Probleme gibt.<sup>12</sup>

<sup>10</sup>Y. Ando, T. Itoh, J. Appl. Phys. **61**, 1497 (1987).

<sup>11</sup>siehe z.B. E. L. Wolf, *Principles of Electron Tunneling Spectroscopy*, Oxford Science Publications, Oxford University Press (1989).

<sup>12</sup>B. Das, J. Mahanty, Phys. Rev. **B 36**, 898 (1987);

Z. H. Huang, T. E. Feuchtwang, P. H. Cutler, E. Kazes, J. Vac. Science Techn. **A 8**, 177 (1987).

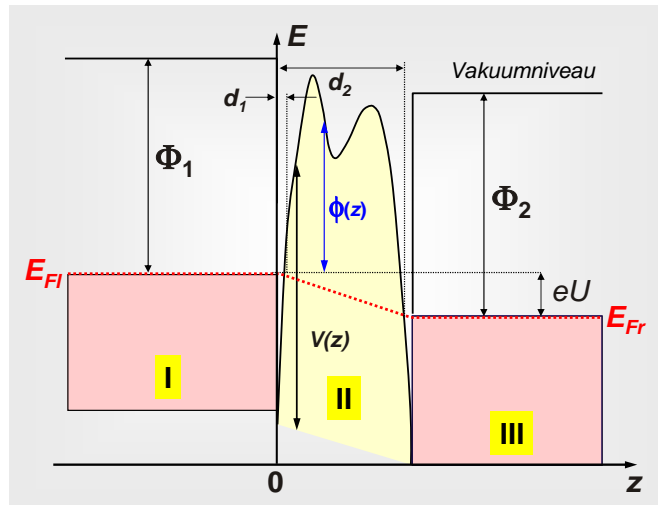


Abbildung 7.5: Eindimensionale Potenzialbarriere mit beliebiger Form zwischen zwei Metallen.  $\Phi_1$  und  $\Phi_2$  sind die Austrittsarbeiten in den beiden Tunnelelektroden.

Mit der WKB-Methode kann die Wahrscheinlichkeit  $P(E)$ , dass ein Elektron in eine eindimensionale Barriere  $V(z)$  mit beliebiger Form eindringt, wie folgt berechnet werden:

$$\begin{aligned}
 P(E) &= \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{d_1}^{d_2} [2m(V(z) - E)]^{1/2} dz \right\} \\
 &= \exp \left\{ -2 \int_{d_1}^{d_2} \kappa(z, E) dz \right\} .
 \end{aligned} \tag{7.1.27}$$

Hierbei sind  $d_1$  und  $d_2$  die klassischen Umkehrpunkte und  $(d_2 - d_1)$  die effektive Barrierebreite (siehe Abb. 7.5). Die WKB-Näherung ist nur anwendbar, solange die Energie  $E$  klein gegenüber der maximalen Barrierehöhe ist und die Kanten der Barriere bei  $d_1$  und  $d_2$  sanft ansteigen.

#### 7.1.4 Elastisches Tunneln in planaren Metall/Isolator/Metall-Kontakten

Wir betrachten jetzt einen planaren MIM-Tunnelkontakt, der mit der eindimensionalen Potenzialbarriere aus Abb. 7.5 beschrieben werden kann. Die beiden Metallelektroden sollen aus dem gleichen Material bestehen und mit dem freien Elektronengasmodell beschrieben werden können. Wir nehmen außerdem an, dass die metallischen Elektroden sich immer im thermischen Gleichgewicht befinden.

Einen Nettotunnelstrom zwischen den beiden Tunnelelektroden erhalten wir dann, wenn sich im statistischen Mittel aufgrund einer angelegten Spannung  $U$  mehr Elektronen von links nach rechts als von rechts nach links bewegen. Wir wollen im Folgenden die Konvention benutzen, dass eine positive Spannung  $U$  das Fermi-Niveau der rechten Elektrode um  $eU$  absenkt. Für

den Strom von links nach rechts erhalten wir<sup>13</sup>

$$J_{12} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \iiint d^2k_{\parallel} dk_z v_z T(E_z) f(E) [1 - f(E + eU)] . \quad (7.1.28)$$

Um den Tunnelstrom  $J_{12}$  zu erhalten, müssen wir über alle möglichen  $k$ -Zustände in Elektrode 1 aufsummieren, wobei wir jeden Zustand mit der zugehörigen Gruppengeschwindigkeit

$$v_z = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z} \quad (7.1.29)$$

wichten müssen. Wir müssen ferner mit der Transmissionswahrscheinlichkeit  $T(E_z)$  und den Fermi-Funktionen multiplizieren, um sicherzustellen, dass der Anfangszustand besetzt und der Endzustand leer ist. In (7.1.28) resultiert der Faktor 2 aus der Spinartung und der Faktor  $(2\pi)^3$  im Nenner aus der Zustandsdichte pro Einheitsvolumen im  $k$ -Raum.

Für den Strom  $J_{21}$  von rechts nach links erhalten wir analog

$$J_{21} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \iiint d^2k_{\parallel} dk_z v_z T(E_z) f(E + eU) [1 - f(E)] . \quad (7.1.30)$$

Der Nettostrom  $J$  ergibt sich zu  $J = J_{12} - J_{21}$ :

$$J = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int dE [f(E) - f(E + eU)] \frac{1}{(2\pi)^2} \iint d^2k_{\parallel} T(E_z) . \quad (7.1.31)$$

Hierbei haben wir (7.1.29),  $v_z dk_z = dE/\hbar$ , verwendet, um zur Integrationsvariablen  $E_z$  zu wechseln. Der letzte Term in (7.1.31) entspricht dabei der Mittelung über alle möglichen  $k_{\parallel}$  für eine bestimmte Energie  $E_z$  (vergleiche hierzu (7.1.16)).

Um (7.1.31) auszuwerten, betrachten wir das Tunneln zwischen zwei Metallen bei  $T = 0$ . Nur Elektronen in Zuständen, die im Intervall  $[E_{F_1}, E_{F_1} - eU]$  liegen, tragen zum Tunnelstrom bei, da nur diese Zustände auf freie Zustände in der rechten Elektrode treffen. Im  $k$ -Raum liegen diese Zustände zwischen zwei Kugelschalen, die durch die Energien  $E_{F_1}$  und  $E_{F_1} - eU$  charakterisiert sind (siehe Abb. 7.6). Da wir nur Elektronen betrachten, die sich in positive  $z$ -Richtung bewegen, müssen wir nur das halbe Volumen zwischen den Kugelschalen bei der Berechnung des Tunnelstroms berücksichtigen. Da der Transmissionsfaktor  $T$  für gleiche Werte von  $E_z$  konstant ist, führen wir die  $k$ -Raum Integration über scheibenförmige Gebiete aus, wie dies in Abb. 7.6b gezeigt ist. Wird jedoch  $E_z < E_{F_1} - eU$ , bzw.  $k_z < k_{\min} = \sqrt{(2m/\hbar^2)(E_{F_1} - eU)}$ , so ändert sich die Fläche mit konstantem  $E_z$  von einer Scheibe zu einem Kreisring (siehe Abb. 7.6a). Aufgrund dieser Änderung spalten wir die Integration entsprechend auf und erhalten

$$J = \frac{2e\rho_{\parallel}}{2\pi\hbar} \left[ \int_{E_{F_1} - eU}^{E_{F_1}} P(E_z, U) dE_z \int_0^{E_{F_1} - E_z} dE_{\parallel} + \int_0^{E_{F_1} - eU} P(E_z, U) dE_z \int_{E_{F_1} - eU - E_z}^{E_{F_1} - E_z} dE_{\parallel} \right] \quad (7.1.32)$$

<sup>13</sup>Ein Strom ist immer durch das Produkt aus Ladung, Geschwindigkeit der Ladung und Dichte der Ladungen gegeben, wobei die Ladungsträgerdichte durch  $N = (1/(2\pi)^3) \iiint d^3k$  gegeben ist. Beim Transport durch eine Tunnelbarriere muss natürlich auch mit der Transmissionswahrscheinlichkeit multipliziert werden sowie die Besetzungswahrscheinlichkeit der Zustände berücksichtigt werden.



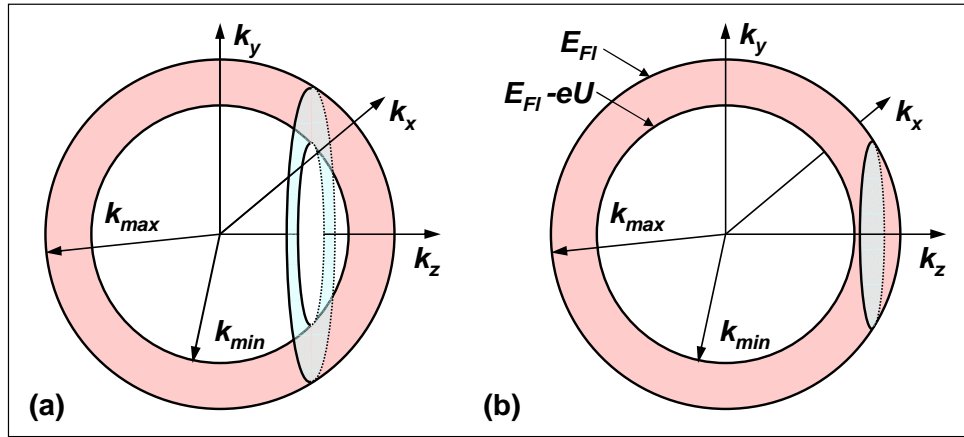


Abbildung 7.6: Schematische Darstellung der Zustände, die in einem mit  $eU$  vorgespannten Tunnelkontakt von links nach rechts tunneln können. (a) Zustände mit gleicher Tunnelwahrscheinlichkeit für  $k_z < k_{min} = \sqrt{(2m/\hbar^2)(E_{FI} - eU)}$ . (b) Zustände mit gleicher Tunnelwahrscheinlichkeit für  $k_{min} < k_z < k_{max}$  mit  $k_{max} = \sqrt{(2m/\hbar^2)E_{FI}}$ .

Hierbei haben wir eine zwei-dimensionale Zustandsdichte  $\rho_{\parallel} = m/2\pi\hbar^2$  über

$$\frac{1}{(2\pi)^2} d^2 k_{\parallel} = \frac{1}{(2\pi)^2} 2\pi k_{\parallel} dk_{\parallel} = \frac{m_{\parallel}}{2\pi\hbar^2} dE_{\parallel} = \rho_{\parallel} dE_{\parallel} \quad (7.1.33)$$

definiert, wobei wir die Gruppengeschwindigkeit (7.1.29) verwendet haben, um die Integration über  $k_{\parallel}$  in eine Integration über die entsprechende Energie  $E_{\parallel}$  umzuwandeln. Führen wir die Integration über  $E_{\parallel}$  aus, so erhalten wir das für  $T = 0$  gültige Ergebnis

$$J = \frac{2e\rho_{\parallel}}{2\pi\hbar} \left[ eU \int_0^{E_{FI}-eU} P(E_z, U) dE_z + \int_{E_{FI}-eU}^{E_{FI}} P(E_z, U) (E_{FI} - E_z) dE_z \right]. \quad (7.1.34)$$

Wir können nun für die Transmissionswahrscheinlichkeit den WKB-Ausdruck (7.1.27) benutzen, d.h.

$$\begin{aligned} P(E_z) &= \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{d_1}^{d_2} \{2m(V(z) - E_z)\}^{1/2} dz \right\} \\ &= \exp \left\{ -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{d_1}^{d_2} \{E_{FI} + \phi(z) - E_z\}^{1/2} dz \right\}, \end{aligned} \quad (7.1.35)$$

wobei  $V(z) = E_{FI} + \phi(z)$  benutzt wurde (siehe Abb. 7.5). Die WKB-Näherung zeigt, dass Elektronen mit der größten Energiekomponente  $E_z = \hbar^2 k_z^2 / 2m$  also mit dem kleinsten Wert von  $E_{\parallel} = \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m = E - E_z$  bzw.  $k_{\parallel}$  die größte Tunnelwahrscheinlichkeit besitzen. Dies resultiert natürlich daraus, dass diese Elektronen das niedrigste effektive Barrierenpotenzial sehen. Diese Tatsache resultiert in einer Winkelabhängigkeit der Tunnelwahrscheinlichkeit. Diejenigen

Elektronen, die senkrecht auf die Barriere zulaufen ( $k_{\parallel} = 0$ ) haben die größte Tunnelwahrscheinlichkeit.

Für Barrieren mit räumlich schwankender Barrierenhöhe können wir, wie von **Simmons**<sup>14</sup> vorgeschlagen wurde, eine mittlere Barrierenhöhe über der Fermi-Energie der negativ vorgelegten Elektrode

$$\bar{\phi} = \frac{1}{d} \int_{d_1}^{d_2} \phi(z) dz \quad (7.1.36)$$

einführen, wobei  $d = d_2 - d_1$ . Für eine rechteckförmige Barriere erhalten wir natürlich  $\bar{\phi} = \phi_0$ . Damit erhalten wir

$$P(E_z) = \exp \left\{ -Ad [\bar{\phi} - \epsilon_x]^{1/2} \right\}, \quad (7.1.37)$$

wobei  $A = \sqrt{8m}/\hbar$  und  $\epsilon_x = E_x - E_{F_l}$  die Energie bezogen auf die Fermi-Energie der linken Elektrode ist. Für die Tunnelstromdichte bei  $T = 0$ , wo die Fermi-Funktionen durch Stufenfunktionen darstellen, erhalten wir damit

$$J = \frac{e}{4\pi^2 \hbar d^2} \left\{ \bar{\phi} \exp(-A\bar{\phi}^{1/2}d) - (\bar{\phi} - eU) \exp(-A(\bar{\phi} - eU)^{1/2}d) \right\}, \quad (7.1.38)$$

wobei  $A = \sqrt{8m}/\hbar$ .

Wir betrachten jetzt einige Grenzfälle für die Tunnelstromdichte:

1. **Kleine Spannungen**  $eU \ll \bar{\phi}$ :

Wir erhalten

$$\begin{aligned} J &= \frac{e^2}{4\pi^2 \hbar^2} \frac{(2m\bar{\phi})^{1/2}}{d} U \exp(-A\bar{\phi}^{1/2}d) \\ &= \frac{e^2}{8\pi^2 \hbar} \frac{A\bar{\phi}^{1/2}}{d} U \exp(-A\bar{\phi}^{1/2}d). \end{aligned} \quad (7.1.38)$$

Wir finden wieder die charakteristische exponentielle Abhängigkeit des Tunnelstroms von der Barrierendicke und der Wurzel der mittleren Barrierenhöhe. Zusätzlich erhalten wir eine lineare Abhängigkeit des Tunnelstroms von der angelegten Spannung, d.h. eine Ohm'sche Kennlinie.

2. **Rechteckförmige Barriere der Höhe  $\phi_0$ , mittlere Spannungen**  $eU < \phi_0$ :

Wir erhalten

$$\begin{aligned} J &= \frac{e}{4\pi^2 \hbar d^2} \left\{ \left( \phi_0 - \frac{eU}{2} \right) \exp \left[ -A \left( \phi_0 - \frac{eU}{2} \right)^{1/2} d \right] \right. \\ &\quad \left. - \left( \phi_0 + \frac{eU}{2} \right) \exp \left[ -A \left( \phi_0 + \frac{eU}{2} \right)^{1/2} d \right] \right\}. \end{aligned} \quad (7.1.39)$$

<sup>14</sup>J. G. Simmons, J. Appl. Phys. **34**, 1793 und 2581 (1963).

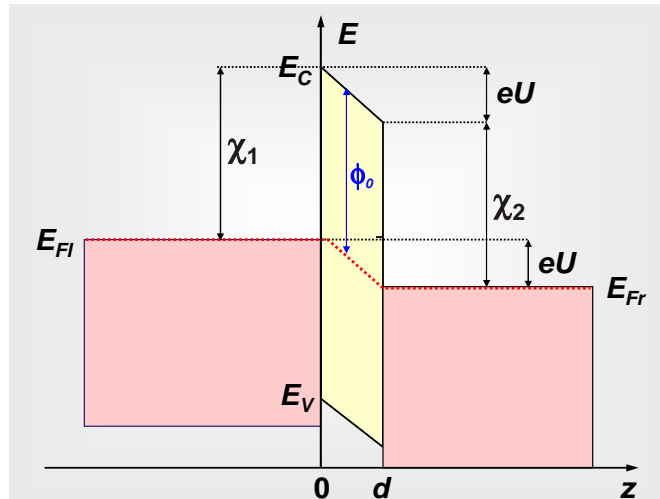


Abbildung 7.7: NIN-Kontakt aus normalleitenden Metallen mit rechteckförmiger Potenzialbarriere,  $\chi_1$  und  $\chi_2$  ist der Abstand der Fermi-Niveaus der Metallelektroden zur Leitungsbandkante des Isolators.

Wir finden ein von (7.1.39) abweichendes Ergebnis, wenn wir den Einfluss der angelegten Spannung auf das Barrierenpotenzial berücksichtigen. Dazu betrachten wir die in Abb. 7.7 gezeigte Situation, d.h. das Tunneln zwischen zwei gleichen Metallelektroden (gleiche Austrittsarbeit  $\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi$ ) durch eine rechteckförmige Barriere. Wir sehen, dass die rechteckförmige Potenzialbarriere der Höhe  $\phi_0$  und der Dicke  $d$  durch die angelegte Spannung  $U$  verkippt wird.

Mit den obigen Annahmen folgt damit für die Barrierenform

$$\phi(z, U) = \phi_0 - \left(\frac{x}{d}\right) eU \quad (7.1.40)$$

Für diese Barrierenform erhalten wir die Tunnelleitfähigkeit  $G(U) = dI/dU$ <sup>15</sup>

$$G(U) = G(0) + G(0) \left(\frac{e^2 m d^2}{4\hbar^2 \phi_0}\right) U^2, \quad (7.1.41)$$

wobei sich die Tunnelleitfähigkeit  $G(0) = \frac{e^2}{4\pi^2 \hbar^2 d} \sqrt{2m\phi} \exp(-A\sqrt{\phi}d)$  für  $U = 0$  aus (7.1.39) ergibt. Wir sehen, dass wir aus der Messung von  $G(U)$  Informationen über die Höhe  $\phi$  und Breite  $d$  der Tunnelbarriere erhalten.

### 3. Rechteckförmige Barriere der Höhe $\phi_0$ , mittlere Spannungen $eU > \phi_0$ :

Wir erhalten

$$J = \frac{2.2e^3 \left(\frac{U}{d}\right)^2}{16\pi^2 \hbar \phi_0} \left\{ \exp \left[ -\frac{4}{2.96\hbar e(U/d)} \sqrt{2m\phi_0^{3/2}} \right] - \left(1 + \frac{2eU}{\phi_0}\right) \exp \left[ -\frac{4}{2.96\hbar e(U/d)} \sqrt{2m\phi_0^{3/2}} \left(1 + \frac{2eU}{\phi_0}\right)^{1/2} \right] \right\}. \quad (7.1.42)$$

<sup>15</sup>siehe z.B. E. L. Wolf, *Principles of Electron Tunneling Spectroscopy*, Oxford Science Publications, Oxford University Press (1989).

#### 4. Sehr hohe Spannungen $eU > \phi_0 + E_F$ :

Für sehr hohe Spannungen vereinfacht sich (7.1.42) zu

$$J = \frac{2.2e^3 \left(\frac{U}{d}\right)^2}{16\pi^2\hbar\phi_0} \left\{ \exp \left[ -\frac{4}{2.96\hbar e(U/d)} \sqrt{2m}\phi_0^{3/2} \right] \right\}. \quad (7.1.43)$$

Dieser Ausdruck für den Tunnelstrom ist sehr ähnlich zur *Fowler-Nordheim Gleichung*, die die Feldemission aus Metallen in starken elektrischen Feldern beschreibt.<sup>16</sup> Nach (7.1.43) kann die Spannungsabhängigkeit im Feldemissions- oder Fowler-Nordheim Bereich durch

$$J \propto U^2 \exp \left[ -\frac{\text{const.}}{U} \right] \quad (7.1.44)$$

ausgedrückt werden.

Falls wir MIM-Tunnelkontakte mit Elektroden aus Metallen mit unterschiedlichen Austrittsarbeiten  $\Phi_1$  und  $\Phi_2$  vorliegen haben, erhalten wir ein intrinsisches Kontaktpotenzial  $(\Phi_2 - \Phi_1)/e$ . Dadurch wird die Potenzialbarriere asymmetrisch und die Spannungsabhängigkeit des Tunnelstroms wird von der Polarität der Spannung abhängig. Die Abhängigkeit der Barrierenform von der angelegten Spannung ist in diesem Fall durch

$$\phi(x, V) = \Phi_1 + \left(\frac{x}{d}\right)(\Phi_2 - eU - \Phi_1). \quad (7.1.45)$$

Für dicke Tunnelbarrieren erhalten wir mit dieser Barrierenform die Tunnelleitfähigkeit<sup>17</sup>

$$\frac{G(U)}{G(0)} = 1 - \left( \frac{4e(2m)^{1/2}}{3\hbar} \frac{d\Delta\phi}{\phi^{3/2}} \right) U + \left( \frac{e^2 m d^2}{4\hbar^2 \phi} \right) U^2, \quad (7.1.46)$$

mit

$$G(0) = \frac{\sqrt{2m\phi}}{d} \left(\frac{e}{\hbar}\right)^2 \exp \left( -\frac{2\sqrt{2m}}{\hbar} d\phi^{1/2} \right). \quad (7.1.47)$$

Hierbei ist  $\Delta\phi = \Phi_2 - \Phi_1$ . Diese so genannte *Brinkman Formel* gibt eine gute Beschreibung des elastischen Tunnelns bei Vorhandensein von Barrierenasymmetrien.

Da die Höhe der Tunnelbarriere üblicherweise groß gegenüber der thermischen Energie ist ( $\phi \gg k_B T$ ), ist die Temperaturabhängigkeit des Tunnelstroms bei konstanter Spannung sehr klein.

### 7.1.5 Vertiefungsthema:

#### Tunneln unter Berücksichtigung des Bildpotenzials

Eine genaue Beschreibung des Tunnelns erfordert auch die Berücksichtigung der Wechselwirkung der tunnelnden Elektronen mit den beiden Metalloberflächen. Diese Wechselwirkung

<sup>16</sup>In der Fowler-Nordheim Gleichung ist der Nenner 2.96 durch 3 ersetzt und der Faktor 2.2 fehlt.

<sup>17</sup>W. F. Brinkman, R. C. Dynes, and J. M. Rowell, J. Appl. Phys. **41**, 1915 (1970).

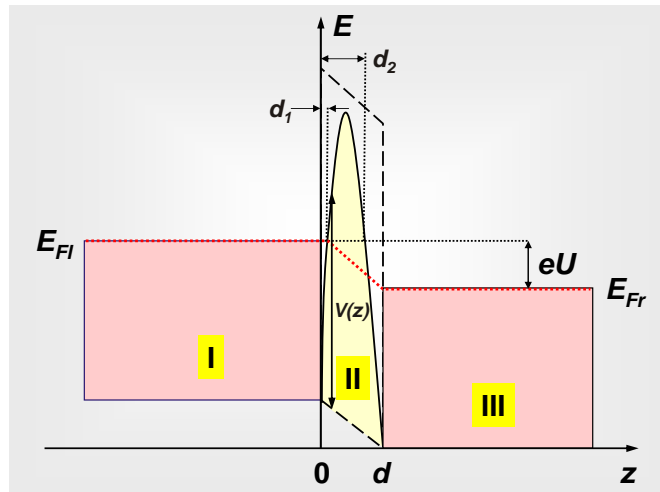


Abbildung 7.8: Schematische Darstellung des Potenzialdiagramms eines eindimensionalen MIM-Tunnelkontakts unter Berücksichtigung des klassischen Bildpotenzials. Die Barriere  $V(z)$  ist erniedrigt und die effektive Barriendicke ist reduziert.

wird klassisch durch ein Mehrfachbildpotenzial

$$V_i(z) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left\{ \frac{1}{2z} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{nd}{\{(nd)^2 - z^2\}} - \frac{1}{nd} \right] \right\} \quad (7.1.48)$$

beschrieben. Hierbei ist  $\epsilon_0$  die Dielektrizitätskonstante und  $d$  der Abstand der beiden Metalloberflächen. Gleichung (7.1.48) kann zu

$$V_i(z) = -\frac{1.15(\ln 2)e^2}{8\pi\epsilon_0 d} \left[ \frac{z}{d} \left( 1 - \frac{z}{d} \right) \right]^{-1} \quad (7.1.49)$$

vereinfacht werden.<sup>18</sup>

Die Berücksichtigung des Bildpotenzials hat folgende Auswirkungen (siehe Abb. 7.8):

- Die Kanten der ursprünglich rechteckförmig angenommenen Barriere werden abgerundet.
- Die effektive Dicke der Barriere wird reduziert und damit der Tunnelstrom erhöht.

### 7.1.6 Bandstruktureffekte beim elastischen Tunneln

Wir haben bis jetzt die metallischen Elektroden mit dem freien Elektronengasmodell beschrieben. Wir wollen jetzt den Einfluss von Bandstruktureffekten auf den Tunnelstrom diskutieren, wobei wir 2 Haupteffekte unterscheiden können:

#### 1. Einfluss der Bandstruktur auf die Tunnelwahrscheinlichkeit:

Eine Folge des freien Elektronengasmodells ist, dass die Tunnelwahrscheinlichkeit  $P$  nur von der Energiekomponente  $E_z$  abhängt. Im Allgemeinen muss aber  $P$  als Funktion der

<sup>18</sup>J. G. Simmons, J. Appl. Phys. **34**, 1793 und 2581 (1963).

Gesamtenergie  $E$  und des Impulses  $\mathbf{k}_{\parallel}$  des tunnelnden Elektrons betrachtet werden, die beide beim Tunnelprozess erhalten bleiben. Die Größen  $E$ ,  $E_z$ ,  $E_{\parallel}$  und  $\mathbf{k}_{\parallel}$  sind durch

$$\begin{aligned} E &= E_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) + E_z(k_z) \\ E_{\parallel}(\mathbf{k}_{\parallel}) &= \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} & E_z(k_z) &= \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \end{aligned} \quad (7.1.50)$$

gegeben. Dabei ist  $m^*$  die effektive Masse, die sich von der Masse  $m$  des freien Elektrons unterscheidet. Die Abhängigkeit der Wahrscheinlichkeit  $P$  von  $E$  und  $\mathbf{k}_{\parallel}$  muss in der Berechnung des Tunnelstroms explizit berücksichtigt werden.

## 2. Einfluss der Bandstruktur auf die effektive Barrierenhöhe:

Ein weiterer Effekt ist die Abhängigkeit der effektiven Höhe der Tunnelbarriere von  $\mathbf{k}_{\parallel}$ , die aus der Erhaltung von  $\mathbf{k}_{\parallel}$  beim Tunnelprozess resultiert. Im freien Elektronengasmodell ist die Barrierenhöhe einfach durch

$$V(z) - E_z = \frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2 \quad (7.1.51)$$

gegeben. Um Bandstruktureffekte zu berücksichtigen, müssen wir (7.1.50) benutzen. Innerhalb der effektiven Massennäherung erhalten wir dann

$$V(z) - E_z = V(z) - (E - E_{\parallel}(k_{\parallel})) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \kappa^2 . \quad (7.1.52)$$

Die Abklingrate  $\kappa$  ist also durch

$$\kappa^2 = k_{\parallel}^2 + \frac{2m^*}{\hbar^2} \{V(z) - E\} \quad (7.1.53)$$

gegeben. Für eine gegebene Energie  $E$  ist also die Abklingrate für größere  $k_{\parallel}$  größer. Elektronen mit großem  $k_{\parallel}$  tunneln also weniger effektiv. Ebenso tunneln Elektronen mit großer effektiver Masse weniger effektiv. Dies ist z.B. für  $3d$ -Übergangsmetalle wichtig, wo sowohl  $4s$ - als auch  $3d$ -Elektronen zum Tunnelstrom beitragen. Aufgrund der üblicherweise wesentlich höheren effektiven Masse der  $3d$ -Elektronen tunneln diese aber weniger effektiv als die  $4s$ -Elektronen.

### 7.1.7 Vertiefungsthema: Resonantes Tunneln

Eine besondere Situation, in der die Dicke der Tunnelbarriere einen starken Einfluss auf die Spannungsabhängigkeit des Tunnelstroms hat und nicht nur die Größenordnung des Tunnelstroms festlegt, ist in Abb. 7.9 gezeigt. Wir haben es mit einer eindimensionalen Barriere zu tun, die in der Mitte einen rechteckförmigen Potenzialtopf der Breite  $a$  enthält. In diesem Potenzialtopf existieren so genannte resonante Zustände, die durch die gestrichelten Linien angedeutet sind. Falls die Breite  $d$  der Barriere unendlich groß wäre, würden diese Niveaus gebundene Zustände repräsentieren. Da  $d$  aber endlich ist, zerfallen die gebundenen Zustände innerhalb einer gewissen Lebensdauer durch Tunneln in die angrenzenden metallischen Elektroden. Falls diese Zerfallszeit kurz ist, finden wir nur Transmissionsresonanzen anstelle von gebundenen Zuständen in der Barriere. Die Transmissionsresonanzen treten für Spannungen auf, bei denen

die Elektronen aus einer der Elektroden gerade eine Energie haben, die dem Resonanzniveau entspricht. Für diese Situation kann die Transmissionswahrscheinlichkeit durch die Barriere um Größenordnungen erhöht sein.

Der Transmissionskoeffizient für die in Abb. 7.9 gezeigte Situation ist gegeben durch<sup>19,20</sup>

$$T = \frac{J_t}{J_i} = \frac{2^8 k_1 \kappa_2^2 k_3^2 k_4^2 k_5}{(k_1^2 + \kappa_2^2)(\kappa_2^2 + k_3^2)(k_3^2 + \kappa_4^2)(\kappa_4^2 + k_5^2)} \frac{1}{Q} . \quad (7.1.54)$$

Hierbei ist  $k_i^2 = 2m_i E / \hbar^2$  und  $\kappa_i^2 = 2m_i (V_{0,i} - E_z) / \hbar^2$ . Die  $T$  dominierenden Exponentialterme stecken in dem Faktor  $1/Q$ , der durch

$$Q = a_1 \exp(\kappa_2 d_2 + \kappa_4 d_4) + a_2 \exp(\kappa_2 d_2 - \kappa_4 d_4) + a_3 \exp(-\kappa_2 d_2 + \kappa_4 d_4) + a_4 \exp(-\kappa_2 d_2 - \kappa_4 d_4) \quad (7.1.55)$$

gegeben ist. Hierbei sind  $d_2$  und  $d_4$  die Barrierendicken im Gebiet II und IV. Wir sehen, dass für die in Abb. 7.9 gezeigte Situation  $\kappa_2 d_2 = \kappa_4 d_4 = \kappa d$  ist und dadurch  $1/Q \simeq a_1 \exp(-2\kappa d)$  wird, da der letzte Term in 7.1.55) gegenüber dem ersten vernachlässigt werden kann und die beiden mittleren Terme verschwinden. Wir sehen also, dass wir wieder die übliche exponentielle Abhängigkeit des Transmissionskoeffizienten von der Barrierendicke erhalten. Wichtig ist, dass wir  $T \propto \exp(-2\kappa d)$  und nicht  $T \propto \exp(-4\kappa d)$  erhalten, obwohl wir dies aufgrund der doppelten Barrierendicke der gesamten Struktur eigentlich erwarten könnten. Dies ist aber nicht der Fall. Wir können uns dies so vorstellen, dass die beiden Teilbarrieren nacheinander durchtunnelt werden (sequentielles Tunneln), wobei für die Teiltransmissionskoeffizienten durch Gebiet II und IV jeweils  $T_{2,4} \propto \exp(-2\kappa d)$  gilt. Die gesamte Transmissionswahrscheinlichkeit ergibt sich dann aus der Summe der beiden Teiltransmissionswahrscheinlichkeiten, d.h. wir erhalten  $T = T_2 + T_4 \propto \exp(-2\kappa d)$ .

Es kann nun aber gezeigt werden, dass der Vorfaktor  $a_1$  null wird, wenn die Resonanzbedingung erfüllt ist.<sup>21</sup> Unter dieser Bedingung wird dann der Transmissionskoeffizient durch die nächstgrößeren Terme in (7.1.55) bestimmt. Wir haben aber bereits gesehen, dass der zweite und dritte Term für eine symmetrische Situation  $\kappa_2 d_2 = \kappa_4 d_4 = \kappa d$  verschwinden. Unter diesen Umständen wird dann der Transmissionskoeffizient eins. Wir erwarten also für bestimmte Spannungen, für die die Resonanzbedingung erfüllt ist, ein starkes Ansteigen des Tunnelstroms. In diesem Fall gibt es keine Abschwächung durch die Barriere sondern nur eine gewisse Reflexionswahrscheinlichkeit an den verschiedenen Kanten des Doppelbarrierenpotenzials. In dieser Situation kann *resonantes Tunneln* beobachtet werden. Resonante Transmission durch Potenzialbarrieren ist ein in der Festkörperphysik wohlbekanntes Phänomen. So treten in einem eindimensionalen Kristallgitter, das aus einer Serie von identischen Potenzialbarrieren betrachtet werden kann, erlaubte Bänder mit perfekter Transmission (ausgedehnte Zustände) auf, die von verbotenen Bändern getrennt sind.

Aufgrund der endlichen Lebensdauer  $\tau$  und der damit verbundenen energetischen Ausschmierung  $\Gamma \sim \hbar/\tau$  des resonanten Zustandes ist der Anstieg stark verschmiert. Im Allgemeinen kann die Transmissionswahrscheinlichkeit um den resonanten Zustand durch ein Lorentzprofil beschrieben werden:

$$T \simeq \frac{\Gamma^2}{(E_z - E_{z0})^2 + \Gamma^2} \quad (7.1.56)$$

<sup>19</sup>E. Burnstein, S. Lundquist, *Tunneling Phenomena in Solids*, Plenum, New York (1969).

<sup>20</sup>E. L. Wolf, *Principles of Electron Tunneling Spectroscopy*, Oxford Science Publications, Oxford University Press (1989).

<sup>21</sup>E.O. Kane, in *Tunneling Phenomena in Solids*, E. Burnstein and S. Lundquist eds., Plenum, New York (1969).

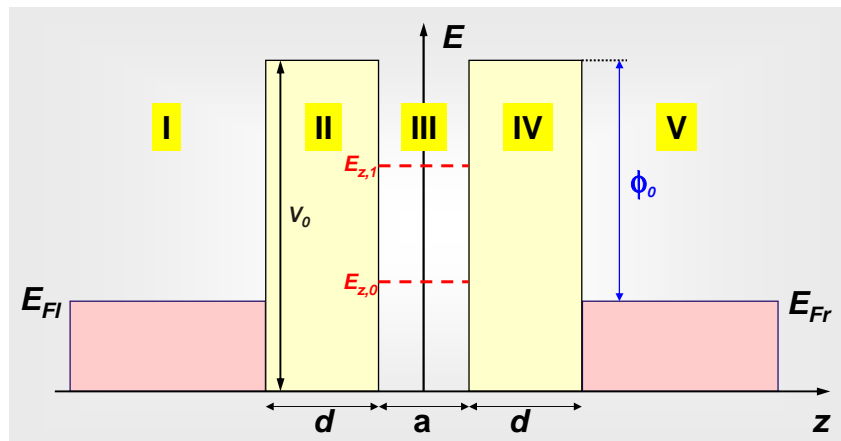


Abbildung 7.9: Eindimensionale Doppelbarriere zur Veranschaulichung des Resonanztunnels.

Hierbei ist  $E_{z0}$  die Energie des resonanten Zustandes.

Die bisher geführte Diskussion ist natürlich insofern zu einfach, dass wir eine eindimensionale Struktur angenommen haben. Um reale Tunnelstrukturen zu modellieren, müssen wir auch die beiden Dimensionen senkrecht zur Tunnelrichtung berücksichtigen. In diesem Fall wird der maximale Wert der Gesamtenergie  $E = E_z + E_t$  durch die angelegte Spannung  $U$  bestimmt. Im symmetrischen Fall gilt  $E = eU/2$ . Das heißt, diejenigen Elektronen, für die  $E_t = 0$  und damit  $E_z = E_{z0} = eU/2$  ist, erfüllen die Resonanzbedingung zuerst. Allerdings gibt es für größere Spannungen eine zunehmende Zahl von Elektronen mit  $E_t \neq 0$  (also Elektronen, die nicht senkrecht auf die Barriere treffen) für die dann auch die Resonanzbedingung  $E_z = E_{z0}$  erfüllt ist. Da der Transmissionsfaktor aber nur von  $E_z$  abhängt, nimmt der Transmissionskoeffizient für Spannungen oberhalb der Schwellenspannung  $eU/2 = E_{z0}$  nicht ab. Wir erwarten also für die drei-dimensionale Situation mehr ein stufenförmiges Ansteigen des Tunnelstroms als eine Lorentz-förmige Spitze.

Resonantes Tunneln kann auch über so genannte lokalisierte Zustände in oxidischen Barrieren erfolgen. Es wurde bereits früh darauf hingewiesen, dass aufgrund der lokalisierten Zustände ein erhöhter Tunnelstrom erwartet wird. In einem eindimensionalen Modell ist der Effekt am größten, wenn die lokalisierten Zustände nahe beim Fermi-Niveau liegen. Eine realistische Behandlung des resonanten Tunnelns über lokalisierte Zustände in einer isolierenden Barriere der Dicke  $d$  erfordert aber ein dreidimensionales Modell. Für resonantes Tunneln über lokalisierte Zustände wurde

$$T \propto \exp(-\kappa d) \quad (7.1.57)$$

erhalten.<sup>22</sup> Das heißt, der Tunnelstrom nimmt viel langsamer mit zunehmender Barriere Dicke ab als im Fall von direktem Tunneln, wo

$$T \propto \exp(-2\kappa d) \quad (7.1.58)$$

gilt. In den resonanten Tunnelstrom geht natürlich noch die Dichte der lokalisierten Zustände in der Barriere ein, die als Vorfaktor in (7.1.57) auftaucht. Wir erwarten aber, dass resonantes Tunneln über lokalisierte Zustände bei dicken Barrieren immer dominieren wird.

<sup>22</sup>J. Halbritter, Surf. Sci. **122**, 80 (1982) und J. Appl. Phys. **58**, 1320 (1985).



## 7.2 NIN- und NIS-Kontakte

Im Folgenden wollen wir kurz als Beispiele die Tunnelkennlinien von planaren NIN- und NIS-Tunnelkontakten diskutieren (N: normalleitendes Metall, S: Supraleiter). Hierzu nehmen wir an, dass der Tunnelstrom  $I_{12}$  von Elektrode 1 nach Elektrode 2 nach Fermi's Goldener Regel proportional der Zahl der besetzten Zustände in 1, proportional der Zahl der unbesetzten Zustände in 2 und proportional zum Tunnelmatrixelement  $|M|^2$  ist. Umgekehrtes gilt für den Tunnelstrom von 2 nach 1. Im Folgenden wählen wir die Konvention, dass eine positive Spannung  $U$  die rechte Elektrode 2 gegenüber der linken 1 um die Energie  $eU$  absenkt. Desweiteren betrachten wir nur *elastische Tunnelprozesse*, das heißt die Energie der Ladungsträger bleibt beim Tunnelprozess erhalten.

Der Tunnelstrom bei angelegter Spannung  $U$  ergibt sich mit diesen Annahmen zu

$$I_{12} = 2e \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} |M(\epsilon)|^2 \times N_1(\epsilon - eU) f(\epsilon - eU) \times N_2(\epsilon) \{1 - f(\epsilon)\} d\epsilon \quad (7.2.1)$$

und

$$I_{21} = 2e \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} |M(\epsilon)|^2 \times N_2(\epsilon) f(\epsilon) \times N_1(\epsilon - eU) \{1 - f(\epsilon - eU)\} d\epsilon. \quad (7.2.2)$$

Die Energie  $\epsilon$  ist hierbei auf das Fermi-Niveau  $E_F$  der jeweiligen Elektrode bezogen, d.h.  $\epsilon \equiv E - E_F$ , und folglich geht die Integration von  $-\infty$  bis  $+\infty$ .  $f(\epsilon)$  ist die Fermi-Verteilung:

$$f(\epsilon) \equiv \frac{1}{\exp\{\epsilon/k_B T\} + 1}. \quad (7.2.3)$$

Die Differenz liefert dann den Nettotunnelstrom

$$I = I_{12} - I_{21} = 2e \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} |M(\epsilon)|^2 \times N_1(\epsilon - eU) N_2(\epsilon) \times [f(\epsilon - eU) - f(\epsilon)] d\epsilon. \quad (7.2.4)$$

Die bisherige Beschreibung gilt allgemein für beliebige Zustandsdichten. Im Folgenden betrachten wir zwei Spezialfälle:

### 1. NIN-Kontakt:

Beide Elektroden sollen normalleitend sein. Mit den beiden Annahmen dass (i) die Energieabhängigkeit der Zustandsdichte  $N$  in der Nähe des Fermi-Niveaus vernachlässigbar ist (freies Elektronengas:  $N(E) \propto \sqrt{E} \approx \text{const.}$  bei  $E_F$  und bei kleinen Spannungen<sup>23</sup>) und

<sup>23</sup>Zustandsdichte (für eine Spinrichtung) des freien Elektronengases pro Volumen und Energie:  $N(E) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E}$ ,  $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ ,  $v_F = \hbar^{-1} \nabla_k E_F = \hbar k_F / m$ .

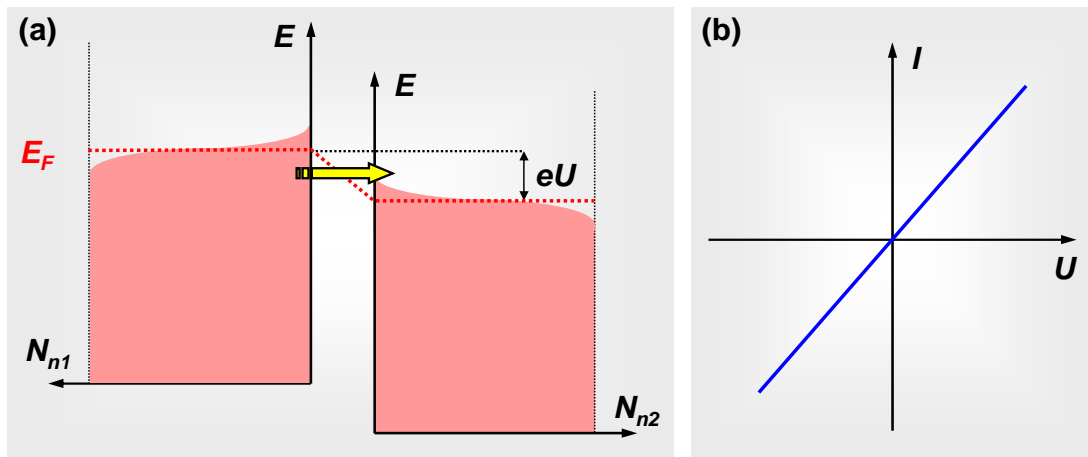


Abbildung 7.10: NIN-Tunnelkontakt: (a) Energieschema, die Zustandsdichte ist in der Nähe der Fermi-Energie als konstant angenommen. (b) Strom-Spannungs-Kennlinie.

dass (ii) das Tunnelmatrixelement unabhängig von  $\epsilon$  ist ( $eU$  klein gegen Barrierenhöhe), folgt aus (7.2.4)

$$I_{\text{NIN}} = 2e \frac{2\pi}{\hbar} N_{n1} N_{n2} |M|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} [f(\epsilon - eU) - f(\epsilon)] d\epsilon. \quad (7.2.5)$$

Für den Fall  $T = 0$  und  $eU \ll \phi_0$  liefert (7.2.5) eine lineare Tunnelkennlinie  $I \propto U$ , bzw. eine spannungsunabhängige Tunnelleitfähigkeit  $(dI/dU)_{\text{NIN}} \equiv G_{\text{NIN}} \propto N_{n1} N_{n2} \approx \text{const.}$  Diese Beziehung lässt sich anhand der schematischen Darstellung in Abb. 7.10 leicht veranschaulichen: Die Zahl der besetzten Zustände in der einen Elektrode, welchen beim Tunneln freie Zustände in der anderen Elektrode zur Verfügung stehen wächst linear mit  $U$ .

## 2. NIS-Tunnelkontakt:

Im Folgenden betrachten wir den wichtigen Fall, dass eine der beiden Elektroden supraleitend ist, d.h. wir betrachten einen NIS-Kontakt. Für die Zustandsdichte der Quasiteilchen im Supraleiter folgt aus der BCS-Theorie

$$N_s(\epsilon) = N_n(0) \frac{|\epsilon|}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}} \quad \text{wenn} \quad |\epsilon| \geq \Delta$$

$$N_s(\epsilon) = 0 \quad \text{wenn} \quad |\epsilon| < \Delta \quad (7.2.6)$$

Die Zustandsdichte verschwindet also im Bereich der Energielücke  $2\Delta$  um die Fermi-Energie. Beim Anlegen einer Spannung  $U$  (siehe Abb. 7.11a) fließt daher zunächst kein (für  $T = 0$ ), bzw. nur ein sehr kleiner (für endliche  $T$ ) Tunnelstrom, der abrupt ansteigt wenn  $eU = \Delta$  erreicht wird, da dann die besetzten Zustände am Fermi-Niveau des Normalleiters einer hohen Dichte von freien Zuständen im Supraleiter gegenüberstehen. Wird  $eU \gg \Delta$ , geht die Tunnelkennlinie wieder in die (in einfachster Näherung) lineare Kennlinie des NIN-Kontakts über (siehe Abb. 7.11b).

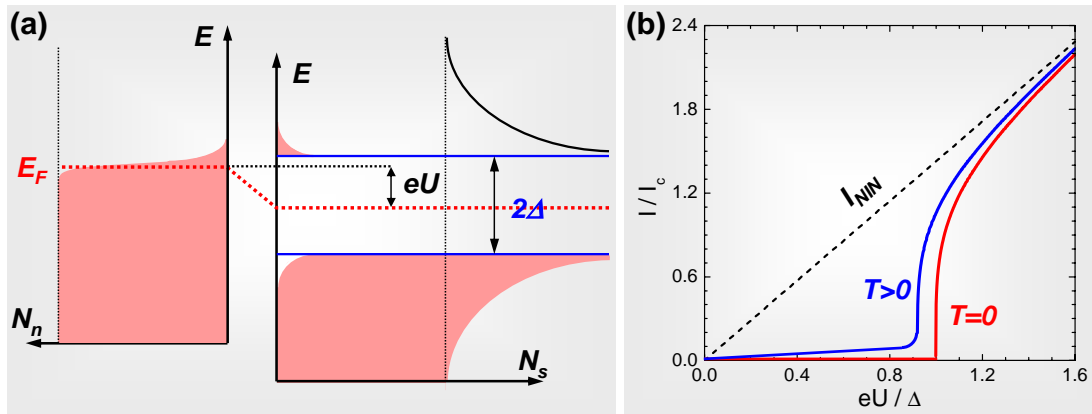


Abbildung 7.11: NIS-Tunnelkontakt: (a) Energieschema, die Zustandsdichte ist in der Nähe der Fermi-Energie als konstant angenommen. (b) Strom-Spannungs-Kennlinie.

Unter der Annahme, dass die Zustandsdichte des Normalleiters unabhängig von  $\epsilon$  ist, kann diese wieder vor das Integral gezogen werden, und der Tunnelstrom ergibt sich zu

$$I_{\text{NIS}} = 2e \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 N_n \int_{-\infty}^{+\infty} N_s(\epsilon) [f(\epsilon - eU) - f(\epsilon)] d\epsilon . \quad (7.2.7)$$

Für die differentielle Leitfähigkeit folgt damit

$$G_{\text{NIS}}(U) = \frac{dI(U)}{dU} \propto \int_{-\infty}^{+\infty} N_s(\epsilon) K(\epsilon - eU) d\epsilon . \quad (7.2.8)$$

$G_{\text{SN}}$  ergibt sich also aus der Faltung der supraleitenden Zustandsdichte  $N_s(\epsilon)$  und der Funktion  $K(\epsilon - eU)$ , der Ableitung der Fermi-Funktion  $f(\epsilon - eU)$  nach  $U$

$$K = e\beta \frac{\exp[\beta(\epsilon - eU)]}{\{1 + \exp[\beta(\epsilon - eU)]\}^2} . \quad (7.2.9)$$

Hierbei ist  $\beta \equiv 1/k_B T$ . In Abb. 7.12 sind die Zustandsdichte, die Funktion  $K$  und die aus (7.2.8) berechnete Tunnelleitfähigkeit zusammen dargestellt.

Die Funktion  $K$  besitzt ein Maximum bei  $\epsilon = eU$  und wird zur Delta-Funktion im Limes  $T \rightarrow 0$ . In diesem Grenzfall besitzt  $G_{\text{NIS}}(U)$  denselben funktionalen Verlauf wie  $N_s(\epsilon)$ . Das heißt, die Messung der Tunnelkennlinie liefert bei tiefen Temperaturen gerade die Zustandsdichte des Supraleiters.

Die eben beschriebene Analyse geht zurück auf **Giaever** und **Megerle**<sup>24</sup> und wurde von **Tedrow** und **Meservey** auf Ferromagnet/Isolator/Supraleiter (FIS) Kontakte erweitert. Dies ermöglicht, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, die Bestimmung der Spinpolarisation von Ferromagneten.

<sup>24</sup>I. Giaever, K. Megerle, Phys. Rev. **122**, 1101 (1961).

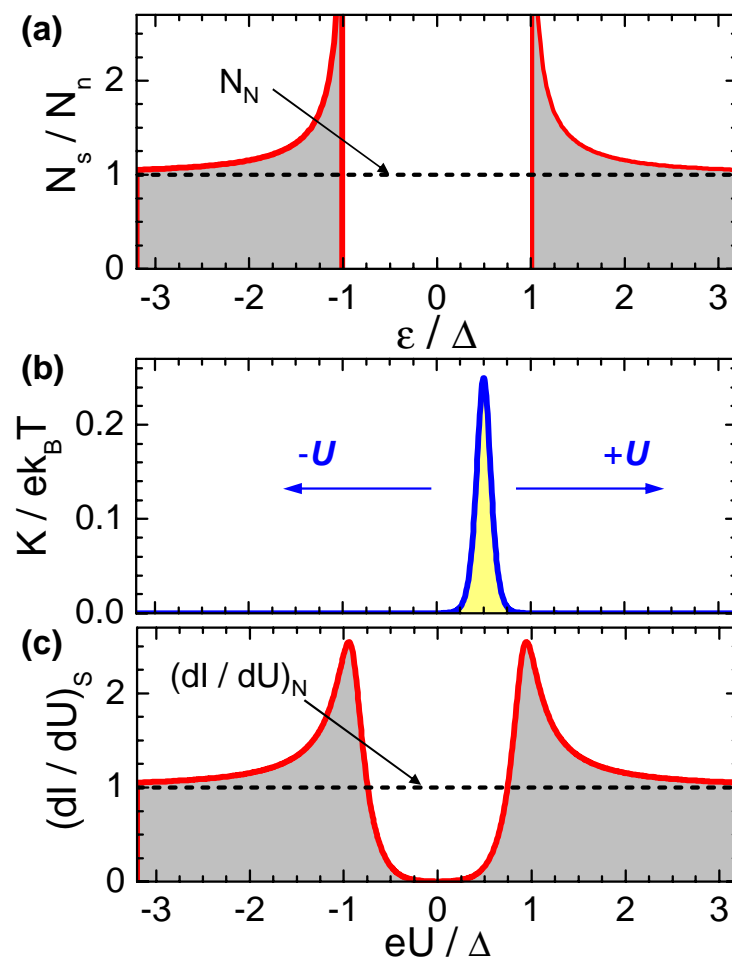


Abbildung 7.12: NIS-Tunnelkontakt: (a) Zustandsdichte vs  $\epsilon/\Delta$  nach (7.2.6), (b) Funktion  $K$  nach (7.2.9) und (c) Tunnelleitfähigkeit nach (7.2.8).

### 7.3 Ferromagnet/Isolator/Supraleiter-Kontakte

Wir diskutieren nun die Strom-Spannungs-Charakteristiken von Ferromagnet/Isolator-/Supraleiter (FIS) Kontakten, da mit solchen Elementen die Spinpolarisation der Leitungselektronen in Ferromagneten nachgewiesen werden kann. Dies wurde erstmals von **Tedrow** und **Meservey** im Jahr 1971 gezeigt.<sup>25</sup> In diesen Experimenten wurde die Zeemann-Aufspaltung der Quasiteilchen-Zustandsdichte von Supraleitern in einem äußeren Feld benutzt, die von Tedrow, Meservey und Fulde erstmals 1970 nachgewiesen wurde.<sup>26,27,28,29</sup> Wir diskutieren im folgenden Unterabschnitt deshalb zunächst die Zeemann-Aufspaltung der Quasiteilchen-Zustandsdichte in Supraleitern.

#### 7.3.1 Zeemann-Aufspaltung der Quasiteilchen-Zustandsdichte in Supraleitern

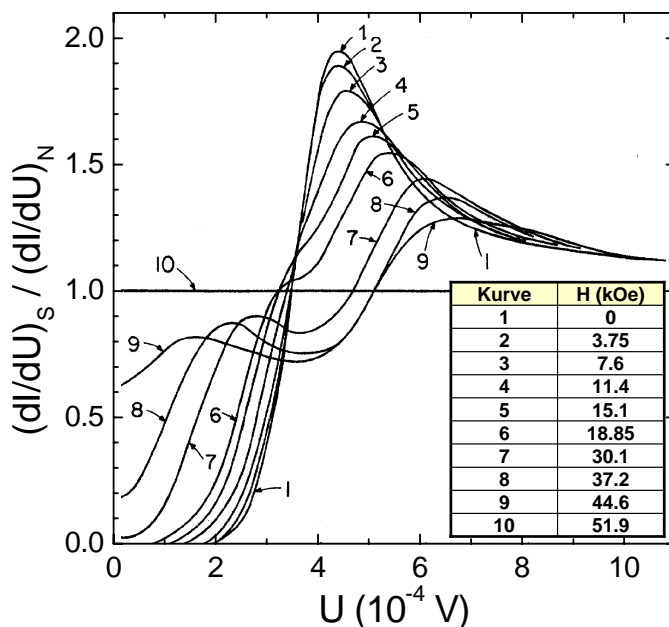


Abbildung 7.13: Differentielle Tunnelleitfähigkeit  $G = dI/dU$  vs Spannung  $U$  eines Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ag-Tunnelkontakts für verschiedene Magnetfelder (in der Filmebene) a: 0 T, b: 1.5 T, c: 2.24 T, d: 2.99 T, e: 3.72 T, f: 4.31 T (nach R. Meservey, P. M. Tedrow, P. Fulde, Phys. Rev. Lett. 25, 1270 (1970)).

Aus theoretischen Betrachtungen für Typ-II Supraleiter folgt, dass für  $T \ll T_{c0}$  ( $T_{c0}$ : Sprungtemperatur des Supraleiters im Magnetfeld  $H = 0$ ) und bei Abwesenheit von Spin-Flip-Streuung die Energielücke  $\Delta(H)$  nahezu unabhängig vom Magnetfeld  $H$  sein sollte, solange  $H < H_{c2}$  gilt ( $H_{c2}$ : oberes kritisches Feld von Typ-II Supraleiter). In sehr dünnen supraleitenden Al-Filmen mit dem angelegten Magnetfeld parallel zur Filmebene sollte dieser Effekt nachweisbar sein, was der Ausgangspunkt der Arbeit von Meservey, Tedrow und Fulde war.

In ihren Experimenten an Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ag-Tunnelkontakten beobachten die Autoren nun einen weiteren Effekt: die Aufspaltung der Al-Zustandsdichte im Magnetfeld (siehe Abb. 7.13). Die

<sup>25</sup>P. M. Tedrow, R. Meservey, Phys. Rev. Lett. 26, 192 (1971).

<sup>26</sup>R. Meservey, P. M. Tedrow, P. Fulde, Phys. Rev. Lett. 25, 1270 (1970).

<sup>27</sup>P.M. Tedrow, R. Meservey, Phys. Rev. Lett. 26 192 (1971).

<sup>28</sup>P.M. Tedrow, R. Meservey, Phys. Rev. B 7 318 (1973).

<sup>29</sup>R. Meservey, P.M. Tedrow, Phys. Rep. 238 173 (1994).

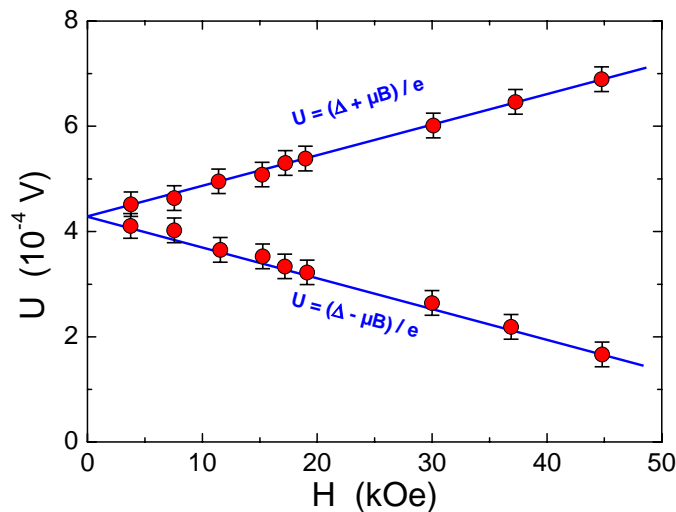


Abbildung 7.14: Spannungswert  $U$  entsprechend der Maxima in den  $G(U)$ -Kennlinien aus Abb. 7.13 für die Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Zustände eines supraleitenden Al-Films aufgetragen gegen das angelegte Magnetfeld (nach R. Meservey, P. M. Tedrow, P. Fulde, Phys. Rev. Lett. 25, 1270 (1970)).

Auswertung der Spannungswerte  $U$ , bei denen Maxima in der differentiellen Leitfähigkeit (Zustandsdichte) gemessen wurden, in Abhängigkeit des angelegten Magnetfeldes  $H$  lieferte eine gute Übereinstimmung mit dem theoretischen Ergebnis  $U = (\Delta \pm \mu\mu_0 H)/e = (\Delta \pm \mu B)/e$  für die Zeeman-Aufspaltung der Zustandsdichte für Spin-Up und Spin-Down Elektronen (siehe Abb. 7.14). Hierbei ist  $\mu = g_s \mu_B S/\hbar \simeq \mu_B$  das magnetische Moment des Elektrons.

Abb. 7.15 zeigt in Analogie zu Abb. 7.12 wie wir ausgehend von der Quasiteilchenzustandsdichte die differentielle Tunnelleitfähigkeit  $G(U) = dI/dU$  erhält. In Abb. 7.15a sind entsprechend der Zeeman-Aufspaltung die Spin- $\uparrow$  Zustände um den Wert  $\mu B$  nach links bzw. die Spin- $\downarrow$  Zustände um den Wert  $\mu B$  nach rechts verschoben. Die Zeeman-Aufspaltung liefert damit die Basis für spinpolarisiertes Tunneln: Bei einer Energie  $\Delta - \mu B$  tragen wesentlich Spin- $\uparrow$  Elektronen zum Tunnelstrom bei, während bei einer Energie  $\Delta + \mu B$  die Spin- $\downarrow$  Elektronen den wesentlichen Beitrag liefern.

Entscheidend für die Beobachtbarkeit dieses Effekts sind zwei Voraussetzungen:

- Der aufgrund des angelegten Felds fließende Abschirmstrom im Supraleiter muss klein genug sein, so dass dieser nicht zum Aufbrechen (Depairing) der Cooper-Paare führt (Grenzfall kleiner "Depairing Parameter"). Diese Bedingung kann erfüllt werden, indem die Filmdicke  $d$  der Al-Elektrode klein gegenüber der London'schen Eindringtiefe  $\lambda_L$  des Supraleiters gewählt und das Feld parallel zur Filmebene angelegt wird. Damit werden die Abschirmströme minimiert ( $H_{c2\parallel} \propto d^{-3/2}$ ).
- Die Spin-Lebensdauer (mittlere Zeit für Spin-Flip-Prozess) der Quasiteilchen darf nicht zu klein sein. Die wichtigste Begrenzung der Spin-Lebensdauer in Systemen ohne magnetische Verunreinigungen resultiert aus der Spin-Bahn-Streuung: eine nicht-magnetische Verunreinigung in einem sonst perfekten periodischen Kristallgitter führt zu einer Verzerrung des ansonsten periodischen elektrischen Feldes. Diese Verzerrung übt auf ein sich schnell bewegendes Elektron ein zeitlich veränderliches Magnetfeld aus, welches den Spin umdrehen kann. Die Streurrate für dieses so genannte "spin-orbit-scattering" ist nach **Abrikosov** und **Gorkov**  $\tau_{so}^{-1} \propto Z^4$  ( $Z$ : Ordnungszahl). Daher ist dieser Effekt in Al klein, im Gegensatz zu In, Sn und Pb.

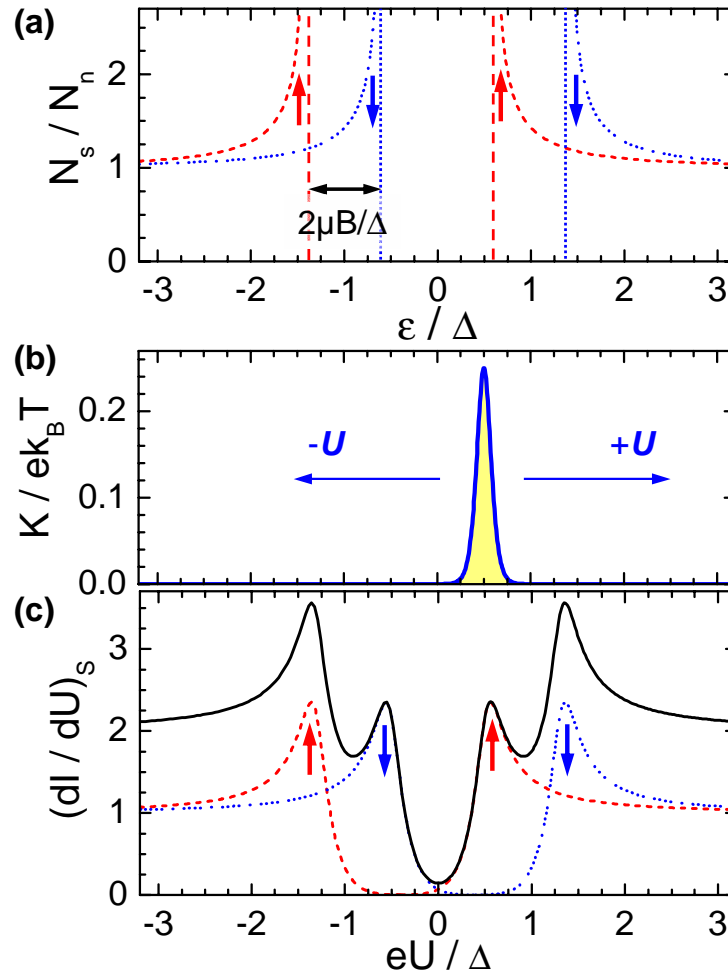


Abbildung 7.15: (a) Zeeman-Aufspaltung der Quasiteilchenzustandsdichte eines Supraleiters in Spin- $\uparrow$  (gestrichelte Linie) und Spin- $\downarrow$  (gepunktete Linie) Zustandsdichten. (b) Spin- und temperaturabhängige Funktion  $K$  im Integral für die Tunnelleitfähigkeit. (c) Spin- $\uparrow$ -Leitfähigkeit (gestrichelt), Spin- $\downarrow$ -Leitfähigkeit (gepunktet) und gesamte Leitfähigkeit (durchgezogen).

Die Zustandsdichte  $N_s(\epsilon)$  lässt sich unter der Erfüllung der oben genannten Voraussetzungen in zwei Terme für Spin- $\uparrow$  ( $N_\uparrow$ ) und Spin- $\downarrow$  ( $N_\downarrow$ ) Elektronen aufspalten

$$N_s(\epsilon) = N_\uparrow(\epsilon) + N_\downarrow(\epsilon) = \frac{1}{2}[N_s(\epsilon + \mu B) + N_s(\epsilon - \mu B)] \quad (7.3.1)$$

und für die Tunnelleitfähigkeit folgt damit in der Form von (7.2.8)

$$G_{\text{NIS}}(U) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} N_s(\epsilon + \mu B) K(\epsilon - eU) d\epsilon + \int_{-\infty}^{+\infty} N_s(\epsilon - \mu B) K(\epsilon - eU) d\epsilon. \quad (7.3.2)$$

Es sei hier noch angemerkt, dass die Spin-Bahn-Streuung die Zustandsdichten im Magnetfeld verändert und im Grenzfall großer normierter Spin-Bahn-Streuratens  $b \equiv \hbar/(3\Delta\tau_{so}) > 1$  zum Verschwinden der Zeeman-Aufspaltung führt, d.h. der Supraleiter verhält sich dann so, als ob die Quasiteilchen keinen Spin hätten. Aufgrund der engen Verknüpfung der Tunnelleitfähigkeit mit der Zustandsdichte der Quasiteilchen im Supraleiter bietet spinpolarisiertes Tunneln eine ausgezeichnete Möglichkeit, um die Spin-Bahn-Streuung zu untersuchen.

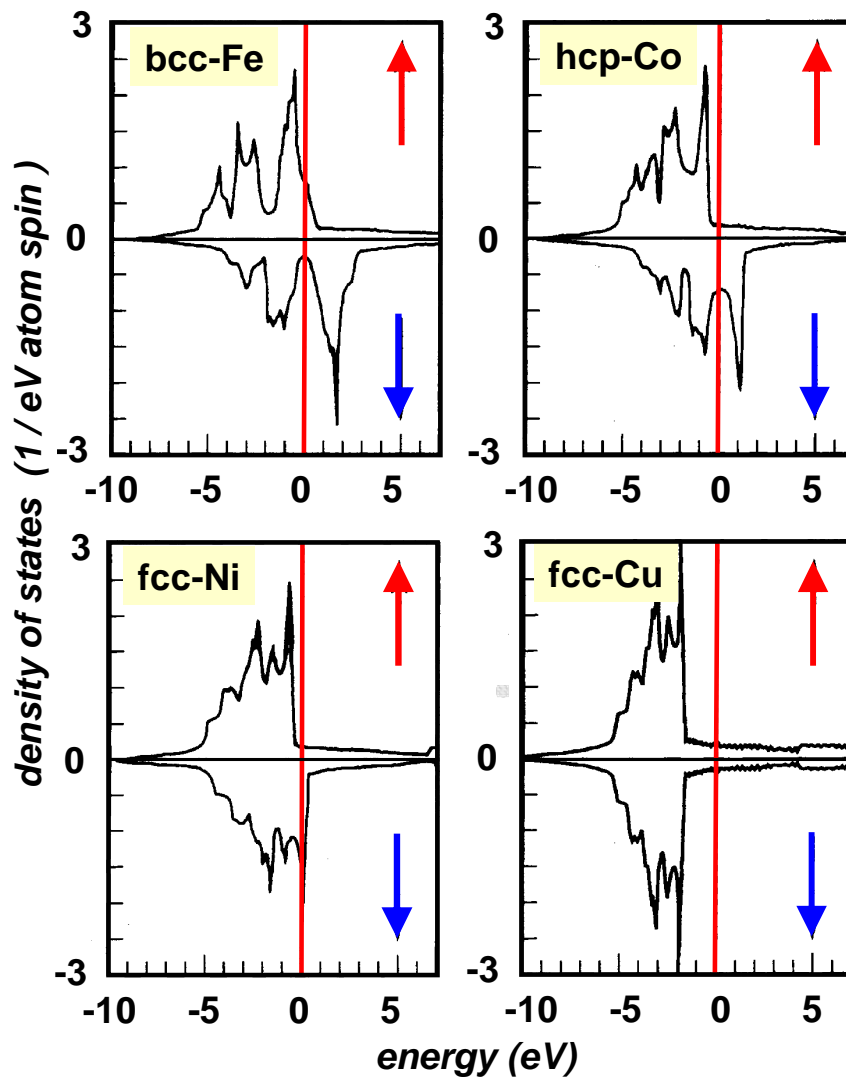


Abbildung 7.16: Zustandsdichten von Majoritäts- und Minoritäts-Elektronen in ferromagnetischem Fe, Co, Ni im Vergleich mit unmagnetischem Cu (nach J. S. Moodera, J. Nassar, G. Mathon, Annu. Rev. Mater. Sci. 29, 381 (1999)).

### 7.3.2 Zustandsdichte und Spinpolarisation in Ferromagneten

#### Zustandsdichte

Übergangsmetalle und Seltene Erden haben unvollständig aufgefüllte innere  $3d$ - bzw.  $4f$ -Schalen, d.h. sie besitzen unbesetzte, lokalisierte ( $3d$ ) bzw. stark lokalisierte ( $4f$ ) Zustände mit hoher effektiver Masse. Der Ladungstransport beruht vorwiegend auf  $4s$ - bzw.  $5s$ -Elektronen, die allerdings in die freien  $3d$ - und  $4f$ -Zustände gestreut werden. Wie bereits in Abb. 2.3.4 diskutiert wurde, führt die starke Streuung der  $s$ -Elektronen zu einem hohen spezifischen Widerstand.

Im ferromagnetischen Zustand ( $T < T_C$ ) bewirkt die ferromagnetische Austauschwechselwirkung eine energetische Aufspaltung der Bänder, d.h. die Teilbänder für die Spin- $\uparrow$  (Majoritäts-) und Spin- $\downarrow$  (Minoritäts-) Elektronen werden energetisch abgesenkt bzw. angehoben (siehe hierzu Abb. 2.2). Für Übergangsmetalle führt dies zu einer signifikanten Änderung der Zustandsdichte für die  $d$ -Elektronen am Fermi-Niveau führen.



Die berechneten Zustandsdichten für einige Übergangsmetalle sind in Abb.7.16 gezeigt. Berechnungen der Ni-Bandstruktur ergeben ein (fast) vollständig gefülltes  $3d$ -Band für die Spin-Up Elektronen (Majoritätsladungsträger), während das  $3d$ -Band für Spin-Down Elektronen (Minoritätsladungsträger) nur teilweise gefüllt ist mit einer sehr hohen Zustandsdichte am Fermi-Niveau. In Abb. 7.16 sind die Zustandsdichten von Ni, Fe, Co und zum Vergleich die von unmagnetischem Cu dargestellt. Während im Cu die Zustandsdichten für Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen symmetrisch sind, besitzen Fe, Co und Ni unterschiedliche Zustandsdichten am Fermi-Niveau. In Fe besitzen die Spin- $\uparrow$  Elektronen eine größere Zustandsdichte als die Spin- $\downarrow$  Elektronen. In Co und Ni ist dies gerade umgekehrt.

### Spinpolarisation

Bei den Betrachtungen zur Tunnelleitfähigkeit von NIS-Kontakten hatten wir stets eine Entartung der Zustandsdichte bezüglich Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen in der normalleitenden Elektrode angenommen. Im Folgenden betrachten wir nun Tunnелеlemente, in denen mindestens eine der Elektroden im ferromagnetischen Zustand ist. Dazu definieren wir zunächst die *Spinpolarisation* für ferromagnetische Materialien. Sei  $a \equiv N_{\uparrow}/(N_{\uparrow} + N_{\downarrow})$  der Bruchteil der Elektronen am Fermi-Niveau mit Spinorientierung in Richtung der Magnetisierung (Majoritätspins). Hierbei ist  $N_{\uparrow}$  die Zustandsdichte der Spin- $\uparrow$  Elektronen und  $N_{\downarrow}$  die Zustandsdichte der Spin- $\downarrow$  Elektronen. Damit ist  $(1 - a) \equiv N_{\downarrow}/(N_{\uparrow} + N_{\downarrow})$  der Bruchteil der Elektronen am Fermi-Niveau mit Spinorientierung entgegen der Magnetisierungsrichtung (Minoritätspins). Die Spinpolarisation  $P$  wird dann als Differenz dieser Bruchteile definiert:

$$P \equiv \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} = a - (1 - a) = 2a - 1 \quad (7.3.3)$$

Ausgehend von dem Resultat von **Meservey, Tedrow und Fulde** zur Zeeman-Aufspaltung der Quasiteilchenzustände in Al wird damit klar, dass eine endliche Spinpolarisation zu asymmetrischen Tunnelkennlinien führen sollte, wenn die nicht-magnetische Ag-Elektrode durch eine ferromagnetische Elektrode mit endlicher Spinpolarisation ersetzt wird. Dieser Effekt wurde von Tedrow und Meservey 1971 in Experimenten an Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ni-Tunnelkontakten erstmals gezeigt.<sup>30</sup>

In Abb. 7.17 ist die Zeeman-Aufspaltung der Quasiteilchenzustandsdichte von Al im Magnetfeld klar zu sehen. Ebenfalls deutlich zu erkennen ist die Asymmetrie der Kennlinien nahe  $U = 0$ . Die von Tedrow und Meservey durchgeführte Analyse liefert einen Ausdruck für die Tunnelleitfähigkeit, der von derselben Form ist wie (7.3.2)

$$G_{\text{FIS}}(U) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} a N_s(\epsilon + \mu B) K(\epsilon - eU) d\epsilon + \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - a) N_s(\epsilon - \mu B) K(\epsilon - eU) d\epsilon. \quad (7.3.4)$$

Hierbei gehen folgende zwei Annahmen ein:

- Die Zustandsdichte des Supraleiters für jede Spinrichtung in einem gegebenen Magnetfeld hat dieselbe funktionale Abhängigkeit und ist lediglich um die Energie  $\pm\mu B$  verschoben (Vernachlässigung von Spin-Bahn- oder Spin-Flip-Streuung).

<sup>30</sup>P. M. Tedrow, R. Meservey, Phys. Rev. Lett. **26**, 192 (1971).

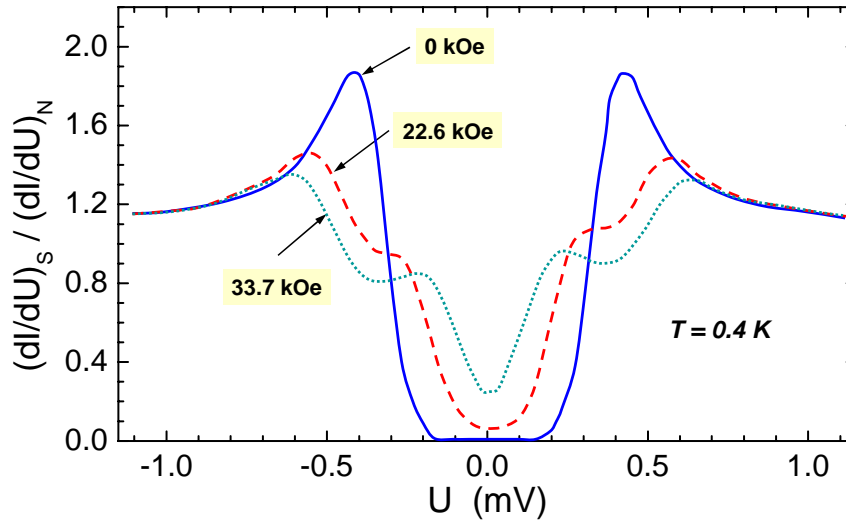


Abbildung 7.17: Normierte Tunnelleitfähigkeit  $G(U)$  eines  $\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}$ -Tunnelkontakts für drei unterschiedliche Werte des Magnetfeldes in der Filmebene (nach P. M. Tedrow, R. Meservey, Phys. Rev. Lett. 26, 192 (1971)).

- Es gibt keine Spin-Flip-Tunnelprozesse.

Damit ergibt sich bei der Interpretation von (7.3.4) mit Hilfe von Abb. 7.18 wieder eine ähnliche Situation wie schon in Abb. 7.15. Wesentlicher Unterschied ist der von der Spinpolarisation der ferromagnetischen Elektrode stammende unterschiedliche Beitrag  $aK$  bzw.  $(1-a)K$  unter den beiden Integralen in (7.3.4).

Der qualitative Verlauf der Tunnelleitfähigkeit in Abb. 7.18c ist zu verstehen, wenn die Zustandsdichte der Spin- $\uparrow$  Elektronen im Ferromagneten dominiert. Eine quantitative Analyse basierend auf dem Vergleich der Werte für die Maxima in der Tunnelleitfähigkeit in Abb. 7.18c ergibt sich unter der Berücksichtigung der oben beschriebenen Annahmen wie folgt:

Ist  $g(U)$  die Tunnelleitfähigkeit vs  $U$  ohne Zeeman-Aufspaltung, dann ist  $ag(U-h)$  der Beitrag der Spin-Up Elektronen zur Leitfähigkeit, der in der Spannung um den Zeeman-Term  $h \equiv \mu B/e$  verschoben ist. Hierbei ist  $a$  der Anteil der Spin- $\uparrow$  Elektronen zum Tunnelstrom. Der Spin- $\downarrow$ -Anteil der Leitfähigkeit ist dann  $(1-a)g(U+h)$ . Die Gesamtleitfähigkeit  $G(U)$  ist dann durch die Summe der beiden Spin-Beiträge gegeben und in Abb. 7.18c dargestellt. Für jeden Wert von  $U$  ergeben sich vier Gleichungen für die gesamte Tunnelleitfähigkeit  $\sigma$  an den Punkten  $-U-h$ ,  $-U+h$ ,  $U-h$  und  $U+h$  ausgedrückt durch die nicht-aufgespaltene Funktion  $g(x)$ :

$$\begin{aligned}
 \sigma_1 &= G(-U-h) = ag(-U) + (1-a)g(-U-2h), \\
 \sigma_2 &= G(-U+h) = ag(-U+2h) + (1-a)g(-U), \\
 \sigma_3 &= G(U-h) = ag(U) + (1-a)g(U-2h), \\
 \sigma_4 &= G(U+h) = ag(U+2h) + (1-a)g(U).
 \end{aligned} \tag{7.3.5}$$

Wegen  $g(U) = g(-U)$  folgt damit

$$\begin{aligned}
 \sigma_4 - \sigma_2 &= a[g(U+2h) - g(U-2h)] \\
 \sigma_1 - \sigma_3 &= (1-a)[g(U+2h) - g(U-2h)].
 \end{aligned} \tag{7.3.6}$$

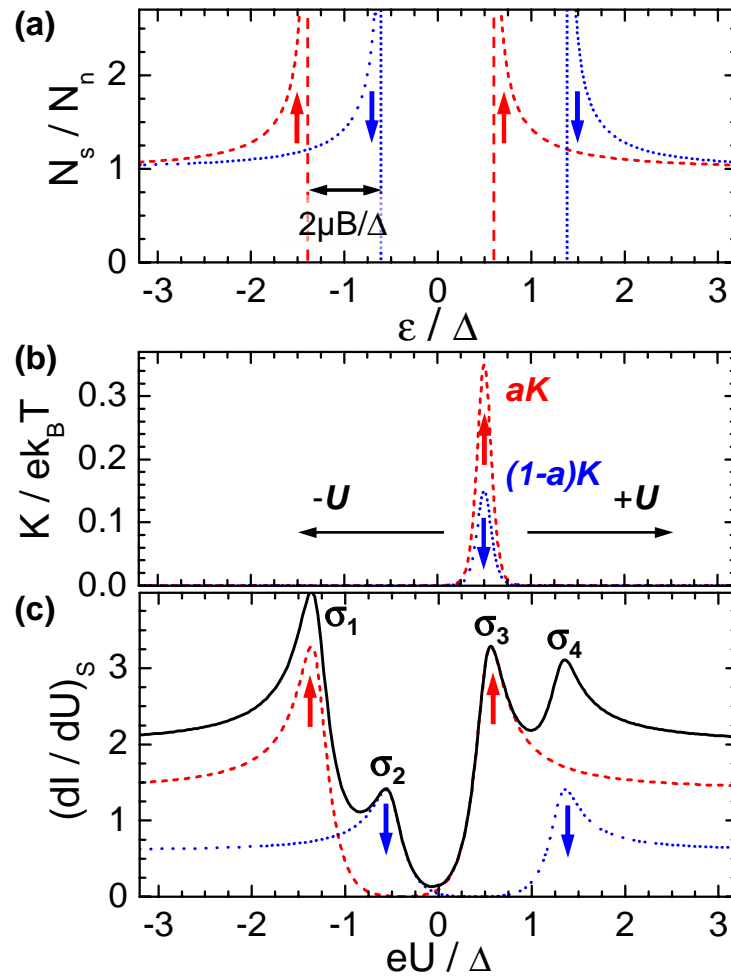


Abbildung 7.18: F/I/S-Tunnelkontakt: (a) Zeeman-Aufspaltung der Quasiteilchenzustände in der Al-Elektrode in Spin- $\uparrow$  (gestrichelte Linie) und Spin- $\downarrow$  (gepunktete Linie) Zustandsdichten. (b) Spin- und temperaturabhängiger Term  $aK$  (für Spin-Up) bzw.  $(1-a)K$  (für Spin-Down) im Integral für die Tunnelleitfähigkeit multipliziert mit den jeweiligen Zustandsdichten im Ferromagneten für Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen. (c) Spin- $\uparrow$ -Leitfähigkeit (gestrichelt), Spin- $\downarrow$ -Leitfähigkeit (gepunktet) und gesamte Leitfähigkeit (durchgezogen) (nach R. Meservey, P. M. Tedrow, Physics Reports 238, 173 (1994)).

Daraus folgt die "Tunnel"-Spinpolarisation  $P_T$  als Funktion der gemessenen  $\sigma_i$  ( $i=1,2,3,4$ ) zu

$$P_T = \frac{(\sigma_4 - \sigma_2) - (\sigma_1 - \sigma_3)}{(\sigma_4 - \sigma_2) + (\sigma_1 - \sigma_3)} = 2a - 1 \quad (7.3.7)$$

Hierbei ist das zweite Gleichheitszeichen, also  $P_T = P$ , nur dann richtig, wenn die Tunnelmatrixelemente für Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen gleich sind (siehe hierzu die vertiefende Diskussion in Abschnitt 7.10). Basierend auf dieser Analyse – mit geeigneter Wahl der Werte für  $U$  und  $H$  (siehe Abb. 7.18c zur Wahl der  $\sigma_i$ ) – lieferten die Messungen von Tedrow und Meservey eine Spinpolarisation für Nickel von  $P = 11 \pm 1\%$ . Dies bedeutete insbesondere, dass an der Fermi-Kante die Zustandsdichte der Spin- $\uparrow$  Elektronen dominiert. Derselbe Befund wurde von Tedrow und Meservey in weiteren Messungen mit Fe, Co und Gd gefunden, wobei Fe und Co eine wesentlich größere Spinpolarisation zeigen als Ni. Diese frühen Messungen an FIS-Kontakten hatten das Problem, dass die Oxidbarrieren bzw. die F/I-Grenzflächen nicht von

Material	Ni	Co	Fe	Ni <sub>80</sub> Fe <sub>20</sub>	Co <sub>50</sub> Fe <sub>50</sub>	Co <sub>84</sub> Fe <sub>16</sub>
Spinpolarisation	33%	42%	44%	48%	55%	55%

Tabelle 7.1: Spinpolarisation von Metallen und Legierungen (nach Moodera *et al.*, Annu. Rev. Mater. Sci. **29**, 381 (1999)).

hoher Qualität waren, was insbesondere Spin-Flip-Streuung an magnetischen Verunreinigungen bewirkte und somit zu niedrigen Werten für  $P$  führte. Neuere Messungen an denselben Materialien mit verbesserter Qualität der Tunnelkontakte ergaben deutlich höhere Werte für  $P$ , die in Tabelle 7.1 (nach Korrektur für Spin-Orbit-Streuung) zusammengestellt sind.

Unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Streuung besitzen die Zustandsdichten (Tunnelleitfähigkeiten) für die beiden verschiedenen Spinrichtungen nicht mehr denselben funktionalen Verlauf. Ein endlicher Spin-Bahn-Parameter  $b$  führt zu einer Reduzierung der Zeeman-Aufspaltung der Zustandsdichten im Magnetfeld. Gleichzeitig sind die Zustandsdichten nicht mehr symmetrisch zur Fermi-Energie, sondern es gilt  $N_{s\uparrow}(\epsilon) = N_{s\downarrow}(-\epsilon)$ . Damit gilt  $g(V) \uparrow = g(-V) \downarrow$ . Eine detaillierte Analyse liefert einen Zusammenhang zwischen dem wirklichen Wert der Spinpolarisation  $P$  und dem aus der Tunnelmessung unter Vernachlässigung der Spin-Bahn-Streuung extrahierten Wert  $P^*$ . Für genügend kleine Werte  $b < 0.15$  gilt  $P = P^*(1 - 1.67b)$ , d.h. die Korrektur für Spin-Bahn-Streuung liefert einen Wert  $P < P^*$ .<sup>31</sup>

Im Folgenden sollen die experimentellen Ergebnisse zur Spinpolarisation in  $3d$ -Übergangsmetallen und  $4f$ -Seltene Erden diskutiert werden:

### 1. $3d$ -Übergangsmetalle:

Für  $3d$ -Übergangsmetalle und deren Legierungen wurde ein nahezu proportionaler Zusammenhang zwischen der Spinpolarisation  $P$  und der Sättigungsmagnetisierung  $M_s$  gefunden, insbesondere für Legierungen mit kleinen Konzentrationen des zulegierten Materials. Dieser Zusammenhang ist sehr nützlich, da die Messung der Magnetisierung des Bulk-Materials ein Maß für die Spinpolarisierung liefert.

Die Messungen von  $P$  ergaben in allen Tunnelexperimenten an FIS-Kontakten mit ferromagnetischen  $3d$ -Metallen einen positiven Wert. Dies steht im Widerspruch zu einem sehr hohen negativen Wert für  $P$  in Ni, wie er aus Abb. 7.16 erwartet wird. Theoretische Ansätze zur Aufklärung dieses Widerspruches berücksichtigen den Beitrag der  $s$ -Elektronen zur Spinpolarisation. Es wird angenommen, dass viele Elektronen aus dem nur teilweise aufgefüllten  $s$ -Band zum Tunneln beitragen,<sup>32</sup> dass aber aufgrund der  $s - d$ -Hybridisierung die Leitungselektronen polarisiert sind. Nach einem einfachen quantitativen Modell von Stearns<sup>33</sup> tragen die  $s - d$ -hybridisierten Bänder mit nahezu freiem Elektronencharakter im Wesentlichen den gesamten Tunnelstrom. Die damit berechneten Werte für  $P$  sind in guter Übereinstimmung mit den Tunnelexperimenten.

### 2. $4f$ -Seltene Erden:

Tunnelmessungen an FIS-Strukturen mit schweren seltenen Erden wie Eu, Gd, Tb, Dy, Ho Er, Tm, und Lu ergaben  $P = 0$  für die nicht-magnetischen Elemente Yb und Lu. Alle

<sup>31</sup>Diese Korrektur liefert für ferromagnetische Übergangsmetalle und deren Legierungen gute Resultate, ist allerdings für sehr hohe Werte  $P \rightarrow 100\%$  nicht mehr anwendbar (siehe z.B. Abschnitt 5.2 *Spin-Filter-Tunnelbarrieren* in R. Meservey, P. M. Tedrow, Physics Reports **238**, 173 (1994).

<sup>32</sup> Aufgrund ihrer hohen effektiven Masse  $m^*$  besitzen die  $d$ -Elektronen eine um Größenordnungen geringere Tunnelwahrscheinlichkeit als die  $s$ -Elektronen.

<sup>33</sup>M. B. Stearns, J. Magn. Magn. Mat. **5**, 167 (1977).

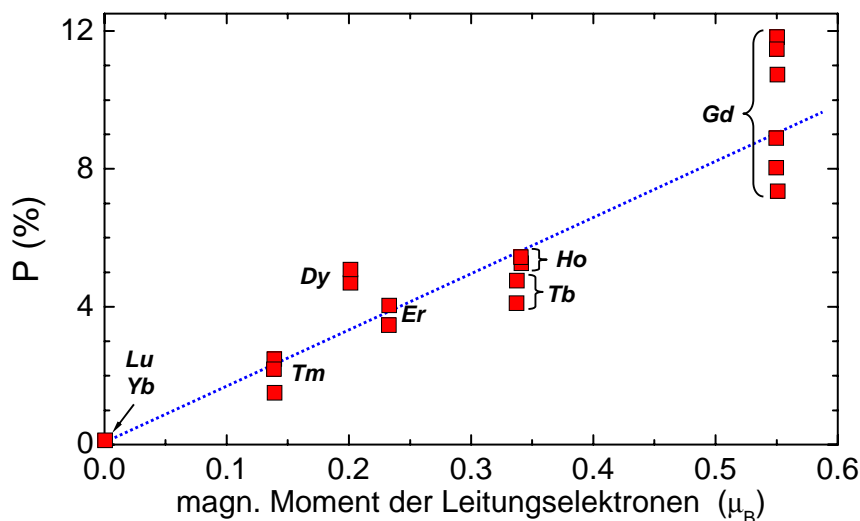


Abbildung 7.19: Gemessene Polarisation als Funktion des magnetischen Moments der Leitungselektronen für schwere Elemente der Seltenen Erden (nach R. Meservey, P. M. Tedrow, Physics Reports 238, 173 (1994)).

anderen Elemente ergaben positive Werte für  $P$ . Das magnetische Moment resultiert hier im Wesentlichen von den  $4f$ -Elektronen, die aber zu stark lokalisiert sind um zum Tunnelstrom beitragen zu können. Eine indirekte Wechselwirkung zwischen den  $4f$  und den  $6s$ - sowie  $5d$ -Leitungselektronen führt hier zu einer positiven Polarisierung der Leitungselektronen. Abb. 7.19 zeigt einen näherungsweise linearen Zusammenhang zwischen  $P$  und dem magnetischen Moment der Leitungselektronen.

Als wesentliches Ergebnis erhielt man den klaren Beleg dafür, dass positiv polarisierte Elektronen einen positiv polarisierten Tunnelstrom liefern. Damit konnten bestimmte Überlegungen zum Spin-Flip im Tunnelprozess ausgeschlossen werden, welche im Zuge der Erklärung der Ergebnisse zu den  $3d$ -Metallen angestellt wurden.

## 7.4 Ferromagnet/Supraleiter-Kontakte: Andreev-Reflexion

In Abschnitt 7.3 wurden die Strom-Spannungs-Charakteristiken von FM/I/S-Kontakten diskutiert und wie mit Hilfe solcher Tunnelkontakte die Spinpolarisation von Ferromagneten bestimmt werden kann. Tunnelspektroskopie mit FM/I/S-Kontakten ist neben der spinpolarisierten Photoemission<sup>34</sup> die am häufigsten verwendete Methode, um die Spinpolarisation experimentell zu bestimmen. Während bei der Photoemission das Problem der Oberflächenpräparation (im Experiment ist nur eine Oberflächenschicht im Nanometerbereich entscheidend) und die schlechte Energieauflösung ( $\sim 1$  meV) das große Problem sind, macht die Notwendigkeit einer dünnen Tunnelbarriere ohne Kurzschlüsse die Experimente mit FM/I/S-Kontakten schwierig. Deshalb wurde in jüngster Vergangenheit auch eine andere Methode verwendet, die auf der *Andreev-Reflexion* an einer Ferromagnet/Supraleiter Grenzfläche beruht.<sup>35</sup> Wir wollen deshalb im Folgenden zunächst die physikalischen Grundlagen zur Andreev-Streuung vorstellen und dann zeigen, wie Andreev-Streuung an einer FM/S-Grenzfläche zur Bestimmung der Spinpolarisation benutzt werden kann.

Es sei darauf hingewiesen, dass das Phänomen Andreev-Streuung auf den ersten Blick nichts in dem Kapitel zum spinabhängigen Tunneln zu suchen hat. Wir können aber eine FM/S-Grenzfläche auch als einen FIS-Tunnelkontakt im Grenzfall verschwindender Barrierendicke betrachten. Wir diskutieren dann im Prinzip nicht mehr spinabhängiges Tunneln, sondern allgemeiner die spinabhängige Transmission an einer idealen Grenzfläche. Hier zeigt sich auch ein Problem bei der experimentellen Untersuchung der Andreev-Reflexion. Wir kennen in Experimenten meistens nicht die Transparenz der Grenzfläche. Insbesondere liegt häufig keine ideale Grenzfläche mit Transparenz eins vor, was die Interpretation der experimentellen Daten erschwert. Wir werden auf das Problem der spinabhängigen Transmission über Grenzflächen zwischen zwei Materialien später in Teil III bei der Diskussion der Spininjektion wieder zurückkommen. Viele der bereits hier eingeführten Konzepte können wir dann später verwenden.

### 7.4.1 Andreev-Streuung an Metall/Supraleiter-Grenzflächen

#### Blonder-Klapwijk-Tinkham-Modell

In Abschnitt 7.2 wurde bereits das Tunneln in NIS-Kontakten diskutiert. Dabei wurde der Supraleiter im Rahmen eines so genannten Halbleitermodells beschrieben und der Tunnelstrom ergab sich aus den Zustandsdichten. Dieses Halbleitermodell lässt sich aber nur verwenden, wenn das Paarpotenzial  $\Delta(x)$  im Supraleiter auf der Längenskala der Kohärenzlänge  $\xi$  als konstant angenommen werden darf. Muss diese Annahme fallengelassen werden, so ist es nicht mehr zulässig, elektronen- und lochartige Anregungen im Supraleiter zusammenzufassen und nur die Zustandsdichte zu betrachten. Dies ist insbesondere an Normalleiter/Supraleiter (NS) Grenzflächen mittlerer bis hoher Transparenz der Fall, da hier das Paarpotenzial auf einer Längenskala  $\xi$  von Null im Normalleiter auf den Wert  $\Delta$  im Supraleiter ansteigt. Diese Situation kann durch das Halbleiter-Modell nicht zufriedenstellend beschrieben werden. **Blonder, Tinkham** und **Klapwijk** haben bereits 1982 ein verallgemeinertes Modell (BTK-Modell) vorgestellt, das die Natur der elektronen- und lochartigen Anregungen im Supraleiter (Quasiteilchen-Anregungen) berücksichtigt.<sup>36</sup> Der theoretische Ansatz basiert dabei

<sup>34</sup>siehe z.B. *Polarized Electrons in Surface Physics*, herausgegeben von R. Feder, World Scientific, Singapore (1985).

<sup>35</sup>R. J. Soulen et al., *Science* **282**, 85 (1998), siehe auch R. J. Soulen et al., *J. Appl. Phys.* **85**, 4589 (1999).

<sup>36</sup>T. M. Klapwijk, G. E. Blonder and M. Tinkham, *Physica* **B 109/110**, 1657 (1982).

auf der Lösung der *Bogoliubov-de-Gennes-Gleichungen*<sup>37</sup>

$$\begin{pmatrix} \mathcal{H}(z) & \Delta(z) \\ \Delta^*(z) & -\mathcal{H}(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k(z) \\ v_k(z) \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} u_k(z) \\ v_k(z) \end{pmatrix} \quad (7.4.1)$$

mit

$$\mathcal{H}(z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(z) - \mu, \quad (7.4.2)$$

wobei eine mögliche zusätzliche Barriere, die normalleitende und supraleitende Elektrode trennt, durch ein  $\delta$ -Funktions-Potential modelliert wird, dessen Stärke durch die dimensionslose *Barriertrennparenz*  $Z$  gegeben ist:

$$U(z) = \delta(z) \cdot V \quad \text{mit} \quad Z = \frac{V}{\hbar v_F} = \frac{mV}{\hbar^2 k_F}. \quad (7.4.3)$$

Hierbei sind  $v_F$  und  $k_F$  die Fermi-Geschwindigkeit bzw. der Fermi-Wellenvektor. Der Parameter  $Z$  stellt das Verhältnis des Streupotenzials und der Fermi-Geschwindigkeit dar. Für eine ideale N/S-Grenzfläche ist  $Z = 0$ , für einen N/I/S-Tunnelkontakt ist  $Z \gg 1$ . Das heißt, mit den obigen Gleichung können wir sowohl einen N/I/S-Tunnelkontakt als auch eine ideale N/S-Grenzfläche beschreiben.

In (7.4.3) sind  $v_k(z)$  und  $u_k(z)$  die so genannten Kohärenzfaktoren, die die Wahrscheinlichkeit für die Besetzung bzw. Nichtbesetzung eines Paarzustands ( $\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$ ) liefern. Die BCS-Theorie (Bardeen, Cooper and Schrieffer 1957) definiert sie wie folgt:

$$u_k^2 = 1 - v_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right) \quad (7.4.4)$$

mit der kinetischen Energie bezogen auf das Fermi-Niveau

$$\xi_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F \quad (7.4.5)$$

und der Quasiteilchen-Anregungsenergie

$$\epsilon_k = \sqrt{\Delta^2 + \xi_k^2}. \quad (7.4.6)$$

Abb. 7.20 zeigt das Anregungsspektrum im normalleitenden und supraleitenden Zustand nahe der Fermi-Energie bei  $T = 0$ . Dabei ist die Energie der Löcher unterhalb der Fermi-Energie auch in positiver Richtung aufgetragen. Wir sehen, dass es im normalleitenden Zustand nur rein elektronen- oder lochartige Anregungen gibt. Im Supraleiter sind die Quasiteilchen-Anregungen dagegen eine Mischung von elektronen- und lochartigen Anregungen, wobei sich der Charakter der Anregung von rein elektronenartig ( $k \gg k_F$ ) kontinuierlich bis zu rein lochartig ( $k \ll k_F$ ) ändert.

Im normalleitenden Zustand ( $\Delta = 0$ ) entkoppeln die Differentialgleichungen für  $u$  und  $v$ . Dies bedeutet, dass ein Loch nicht in ein Elektron und umgekehrt gestreut werden kann.

<sup>37</sup>P. G. deGennes, *Superconductivity of Metals and Alloys*, W. A. Benjamin Inc. New York (1966).

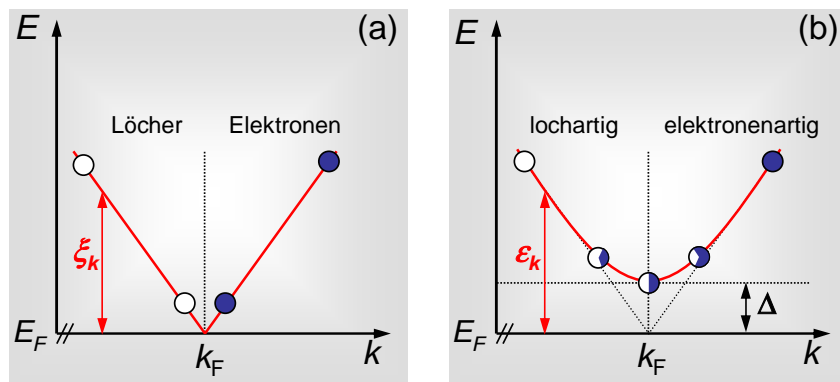


Abbildung 7.20: Anregungsspektrum in einem Normalleiter (a) und einem Supraleiter (b) bei  $T = 0$  in der Nähe von  $k_F$ . Die Energie der Löcher unterhalb von  $E_F$  ist in positiver Richtung aufgetragen. Im Supraleiter ändert sich der Charakter der Quasiteilchen-Anregungen kontinuierlich von elektronen- nach lochartig.

Für ein endliches Paarpotential ist die Matrix in der Eigenwertgleichung (7.4.1) jedoch nicht mehr diagonal. Die als Quasiteilchen bezeichneten Eigenzustände dieses Problems sind also nicht mehr  $u$  und  $v$ , sondern Linearkombinationen von diesen. Wir können sagen, dass elektronen- und lochartige Anregungen gemischt werden, wobei der Grad der Mischung durch das Paarpotential  $\Delta$  bestimmt wird. Insbesondere kann es zur Umwandlung von einer elektronen- in eine lochartige Anregung (oder umgekehrt) kommen, was man als Andreev-Reflexion bezeichnet. Da dieser Mechanismus grundlegend für die Interpretation der vorgestellten Leitfähigkeitsspektren sein wird, beschäftigt sich der folgende Abschnitt ausführlich mit Andreev-Prozessen.

### Andreev-Prozesse

Das Prinzip der Andreev-Reflexion<sup>38</sup> lässt sich am Beispiel eines Normalleiter-Supraleiter-Kontakts erläutern, der modellhaft in Abb. 7.21a dargestellt ist. Ein Elektron der Energie  $E - E_F = \epsilon = eU < \Delta$  kann aus dem Normalleiter nicht in den verbotenen Energiebereich des Supraleiters eindringen. Stromtransport über den Kontakt ist jedoch dadurch möglich, dass das Elektron als Loch reflektiert wird, wobei aus Gründen der Ladungserhaltung im Supraleiter ein Cooperpaar kondensiert.

Abb. 7.21b zeigt diesen Prozess etwas genauer: An der Grenze zwischen Normalleiter und Supraleiter steigt der Wert des Paarpotenzials  $\Delta$  von Null im Normalleiter kontinuierlich auf seinen Endwert im Supraleiter an. Dies geschieht auf der Längenskala der Kohärenzlänge  $\xi$ . Ein Elektron der Energie  $\epsilon_0 < \Delta$  nähert sich nun dem Supraleiter, d.h., das Elektron bewegt sich in einem räumlich variierenden Paarpotential. Im Folgenden soll erklärt werden, wie es dadurch zur Umwandlung von einer elektronenartigen in eine lochartige Anregung kommen kann. Nach der BCS-Theorie ergibt sich für die Dispersionsrelation von Anregungen aus dem supraleitenden Kondensat

$$\epsilon(k) = \sqrt{\Delta^2 + \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F\right)^2} = \sqrt{\Delta^2 + \xi_k^2} \quad (7.4.7)$$

<sup>38</sup>A. F. Andreev, Sov. Phys. JETP, **19**, 1228 (1964).



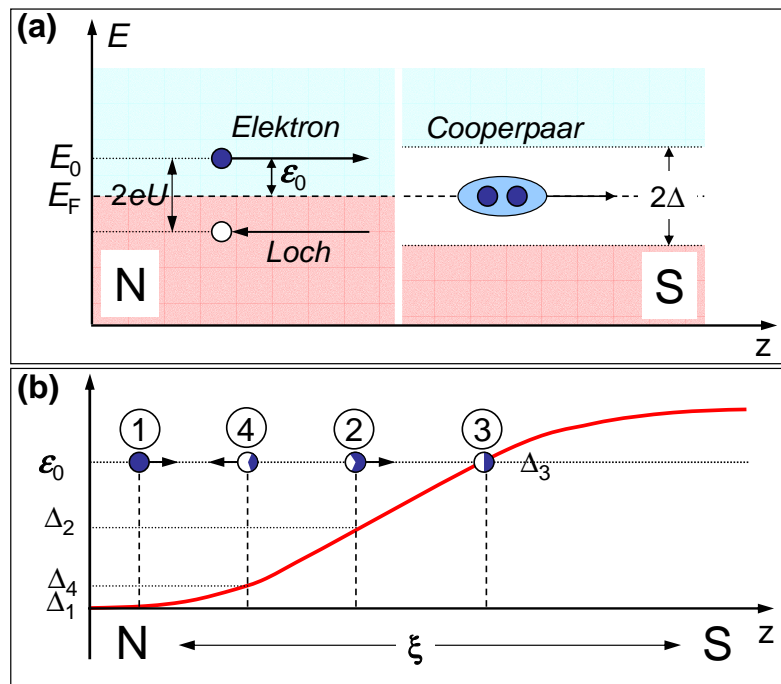


Abbildung 7.21: (a) Schematische Darstellung der Andreev-Reflexion an einer N/S-Grenzfläche. (b) Darstellung der Andreev-Reflexion als Streuung an einem räumlich inhomogenen Paarpotenzial.

In Abb. 7.22 wird eine graphische Darstellung dieser Funktion mit verschiedenen Werten für  $\Delta$  gezeigt. Betrachten wir die Definition der Kohärenzfaktoren (7.4.4), so sehen wir, dass die Anregungen für  $|k| > k_F$  vorwiegend elektronenartig ( $v_k > \frac{1}{2}$ ) und für  $|k| < k_F$  vorwiegend lochartig ( $u_k > \frac{1}{2}$ ) sind. Da das Paarpotenzial  $\Delta$  in die Dispersionsrelation (7.4.7) eingeht, unterliegt ein Elektron, das sich, wie in Abb. 7.21b dargestellt ist, in einem räumlich variierenden Paarpotenzial bewegt, auch verschiedenen Dispersionsrelationen. Die Konsequenzen davon sollen nun am Beispiel der in Abb. 7.21b dargestellten Stationen 1 bis 4 näher erläutert werden. Dabei wird versucht, eine anschauliche Vorstellung der Andreev-Reflexion zu vermitteln (siehe hierzu Abb. 7.22):

1. Das einlaufende Elektron der Energie  $\epsilon_0$  besitze vor der Andreev-Reflexion den Impuls  $\hbar k = \hbar(k_F + \Delta k)$ . Im Normalleiter verschwindet das Paarpotenzial, d.h. die Bewegung des Elektrons unterliegt dem normalleitenden Zweig der Dispersionsrelation.
2. Bei Annäherung an den Supraleiter wird das Paarpotenzial endlich. Das Elektron befindet sich auf dem entsprechenden Zweig der Dispersionsrelation. Wir sehen, dass sowohl der Wellenvektor  $k$  als auch die Gruppengeschwindigkeit ( $v_g = \hbar^{-1} \frac{\partial E}{\partial k}$ ) abnehmen.
3. Das Elektron bewegt sich nun weiter auf den Supraleiter zu, bis es sich bei  $E_0 = \Delta(z)$  im Minimum der zugehörigen Dispersionsrelation befindet. Hierbei ist zu beachten, dass in diesem Punkt (also für  $k = k_F$ ) die Amplituden für eine lochartige wie eine elektronenartige Anregung gleich groß sind ( $u_k = v_k = \frac{1}{2}$ ). Hier wird das Elektron als Loch Andreev-reflektiert. Die Gruppengeschwindigkeit  $v_g = \hbar^{-1} \frac{\partial E}{\partial k}$  verschwindet an diesem Punkt.
4. Schließlich kehrt das Andreev-reflektierte Loch in die normalleitende Elektrode zurück. Zu beachten ist, dass bei dem gesamten Prozess die Energie erhalten bleibt, nicht aber der Impuls (Hinweis: in Abb. 7.21a wird das Elektron oberhalb und das Loch unterhalb

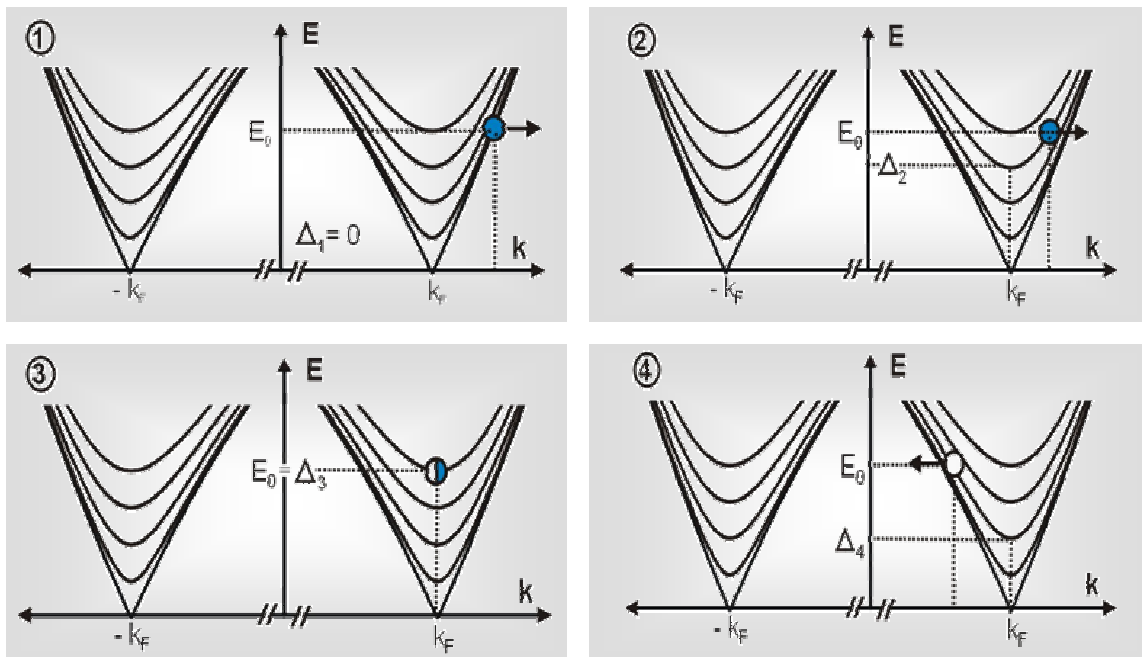


Abbildung 7.22: Dispersionsrelationen für Quasiteilchen an den Punkten 1 bis 4 aus Abb. 7.21b.

des Fermi-Niveaus gezeichnet, beide haben aber die gleiche Anregungsenergie). Besitzt das Elektron vor der Andreev-Reflexion den Wellenvektor  $k_F + \Delta k$ , so ist der Wellenvektor des reflektierten Loches im Normalleiter gegeben durch  $+k_F - \Delta k$ . Die Gruppengeschwindigkeit  $v_g = \hbar^{-1} \frac{\partial E}{\partial k}$  hat das Vorzeichen geändert.

Wir erkennen, dass das einfallende Elektron durch Streuung an dem räumlich variierenden Paarpotenzial kontinuierlich in ein auslaufendes Loch umgewandelt wird. Aus Gründen der Ladungserhaltung und Impulserhaltung muss sich im Supraleiter ein Cooperpaar mit Ladung  $2e$  und Gesamtimpuls  $2\Delta k$  nach rechts bewegen. Das Andreev-reflektierte Loch führt zu einem zusätzlichen Leitfähigkeitskanal, wodurch die Leitfähigkeit der N/S-Grenzfläche gegenüber der des N/N-Kontakts um den Faktor 2 erhöht ist. Dies gilt aber nur für eine ideale Grenzfläche ( $Z = 0$ ). Wir wollen nun kurz den allgemeineren Fall einer nicht-idealen Grenzfläche betrachten, der in Abb. 7.23 gezeigt ist.

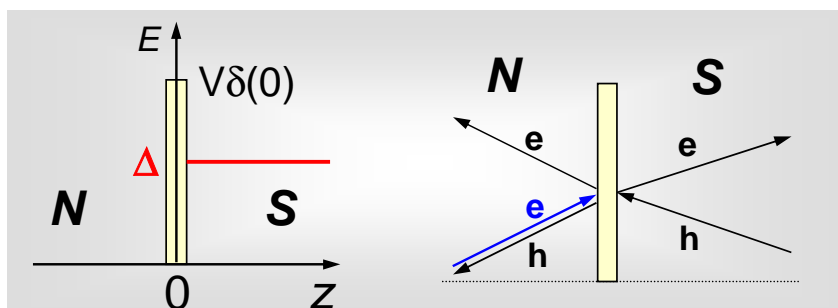


Abbildung 7.23: Mögliche Streuprozesse an einer nicht-idealen Grenzfläche ( $Z \neq 0$ ). Die Barriere wird durch ein  $\delta$  förmiges Potenzial bei  $x = 0$  modelliert.

Ein einlaufendes Elektron kann an der N/S-Grenzfläche sowohl mit den Wahrscheinlichkeiten  $R_A = |r_A|^2$  und  $R_N = |r_N|^2$  Andreev- oder normal-reflektiert werden, bzw. mit den Wahrscheinlichkeiten  $T_A = |t_A|^2$  und  $T_N = |t_N|^2$  Andreev- oder normal-transmittiert werden. Hier-

bei sind  $r_A$  und  $r_N$  die Reflexions- und  $t_A$  und  $t_N$  die Transmissionskoeffizienten. Diese Wahrscheinlichkeiten werden durch das Grenzflächenpotenzial  $V\delta(0)$  und die Fehlanpassung der Fermi-Geschwindigkeiten im Normal- und Supraleiter bestimmt. Die Andreev- und Normal-Reflexionskoeffizienten müssen durch Lösung der aus (7.4.2) folgenden Andreev-Gleichungen mit geeigneten Rand- und Anpassungsbedingungen bestimmt werden. Theoretisch wird dies durch die BTK-Theorie behandelt.

Bei bekannten Reflexions- ( $r_A$  und  $r_N$ ) und Transmissionskoeffizienten ( $t_A$  und  $t_N$ ) können wir die Wellenfunktionen  $\Psi_I$  und  $\Psi_{II}$  links und rechts der N/S-Grenzfläche folgendermaßen schreiben:

$$\Psi_I(z) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{iq_+z} + r_N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-iq_+z} + r_A \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{iq_-z} \quad (7.4.8)$$

$$\Psi_{II}(z) = t_N \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} e^{ik_+z} + t_A \begin{pmatrix} v_k \\ -u_k \end{pmatrix} e^{-ik_-z} \quad (7.4.9)$$

mit

$$q_{\pm} = |k_F^N| \pm \frac{m\epsilon}{\hbar|k_F^N|} \quad (7.4.10)$$

$$k_{\pm} = |k_F^S| \pm \frac{m\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}}{\hbar|k_F^S|}. \quad (7.4.11)$$

Hierbei ist die Wahrscheinlichkeit für die Andreev-Reflexion durch  $R_A = |r_A|^2$  und diejenige für Normalreflexion durch  $R_N = |r_N|^2$  gegeben. Gleiches gilt für die Transmissionswahrscheinlichkeiten.

Die Transmissions- und Reflexionswahrscheinlichkeiten an einer N/S-Grenzfläche sind in Abb. 7.24 für verschieden starke Grenzflächenpotenziale gezeigt. Wir sehen, dass für  $\epsilon < \Delta(T)$  für die ideale Grenzfläche ( $Z = 0$ )  $R_N = 0$  und  $R_A = 1$  gilt. Für  $\epsilon > \Delta(T)$  sinkt  $R_A$  mit steigender Energie auf Null ab, wogegen  $T_N$  auf Eins ansteigt. Wichtig ist, dass  $R_A$  auch für  $\epsilon > \Delta(T)$  endlich ist. Für  $Z \gg 1$  sieht die Situation anders aus. Hier sind  $R_A$  und  $T_A$  für alle Energien  $\epsilon \neq \Delta(T)$  sehr klein, wogegen  $R_N$  für alle Energien  $\epsilon \neq \Delta(T)$  dominiert. Nur für  $\epsilon > \Delta(T)$  ist auch  $T_N$  nicht vernachlässigbar klein. Der scharfe Anstieg von  $R_A$  bei  $\epsilon = \Delta(T)$  führt in den  $G(U)$  Kennlinien zu dem für Tunnelkontakte wohlbekannten Peak.

**Beenacker** hat gezeigt, dass die Transparenz  $T^s$  eines N/S-Kontaktes durch die Transparenz  $T^n$  eines N/N-Kontaktes ausgedrückt werden kann. Für Spannungen  $U$  unterhalb der Energielückenspannung  $\Delta/e$  erhielt er<sup>39</sup>

$$T_{\sigma}^s = 2T_{\sigma}^n \frac{1 + \beta^2}{\beta^2(T_{\sigma}^n)^2 + (2 - T_{\sigma}^n)^2}. \quad (7.4.12)$$

Hierbei ist  $\beta = U/\sqrt{|(\Delta/e)^2 - U^2|}$  ist der so genannte Kohärenzfaktor. Einen ähnlichen Ausdruck erhält man für Spannungen  $U$  oberhalb der Energielückenspannung.

<sup>39</sup>C.W.J. Beenacker, Rev. Mod. Phys. **69**, 731 (1997).

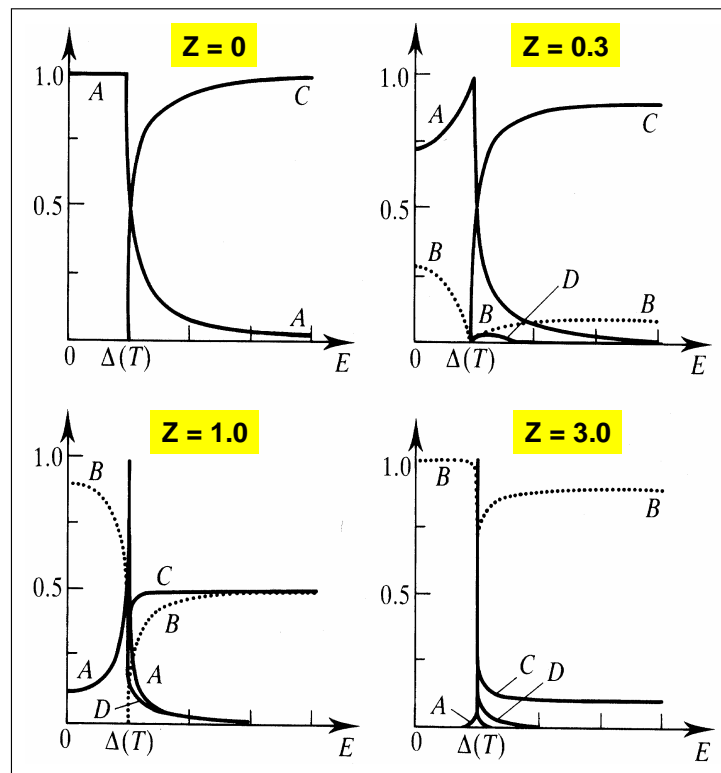


Abbildung 7.24: Transmissions- und Reflexionskoeffizienten an einer N/S-Grenzfläche:  $r_A \equiv A$  (Andreev reflektiertes Loch),  $r_N \equiv B$  (normalreflektiertes Elektron),  $t_N \equiv C$  (transmittiertes Elektron) und  $t_A \equiv D$  (transmittiertes Loch). Aus G. E. Blonder, T. M. Klapwijk, M. Tinkham, Phys. Rev. B 25, 4515 (1982).

### Vertiefungsthema: Gebundene Andreev-Zustände

In der Grenzschicht zwischen zwei supraleitenden Elektroden können sich durch Andreev-Reflexion gebundene Zustände ausbilden (kurz: ABS: Andreev Bound States). Abb. 7.25 zeigt ein eindimensionales Modell dieser Situation. Hier koppelt eine normalleitende Grenzschicht der Dicke  $d_N$  zwei Supraleiter, deren Paarpotenziale sich um eine Phase  $\Delta\theta = \theta_2 - \theta_1$  unterscheiden. Ein Elektron der Energie  $E_0 < \Delta_0$  kann in keine der beiden supraleitenden Elektroden eindringen, jedoch wiederholt an den Grenzflächen 1 und 2 Andreev-reflektiert werden. Die Quantenmechanik zeigt, dass sich bei diesem Prozess genau dann ein gebundener Zustand ausbildet, wenn die gesamte Phasendifferenz, die das Teilchen bei einem vollständigen Durchlauf erfährt, ein ganzzahliges Vielfaches von  $2\pi$  annimmt. In diesem Fall überlagern sich einfallendes und reflektiertes Wellenpaket zu einer stehenden Welle. Betrachten wir die einzelnen Beiträge zur Phasendifferenz, so erhalten wir für die Bohr-Sommerfeld-Quantisierungsbedingung<sup>40</sup>

$$\Delta\varphi_{ges} = -2\phi(\epsilon) + (\theta_1 - \theta_2) + 2\theta_d(\epsilon) = 2\pi n \quad (7.4.13)$$

mit

$$\theta_d(\epsilon) = \frac{d_N \epsilon}{\hbar v_F} \quad (7.4.14)$$

<sup>40</sup>P. F. Bagwell, Phys. Rev. B 46, 12573 (1992).

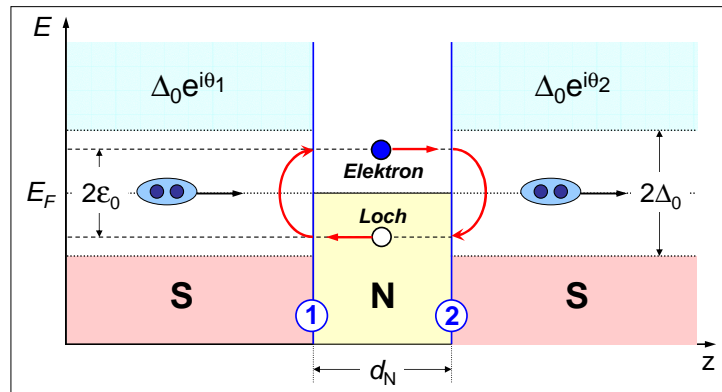


Abbildung 7.25: Schematische Darstellung der Entstehung eines gebundenen Andreev-Zustands.

und

$$\phi(\epsilon) = \arctan \left( \sqrt{\left(\frac{\Delta}{\epsilon}\right)^2 - 1} \right). \quad (7.4.15)$$

Hierbei ist  $\phi(\epsilon)$  die Phasenverschiebung bei der Andreev-Reflexion an den Grenzflächen und  $\theta_d$  diejenige, die das Teilchen beim Durchlauf der normalleitenden Schicht erfährt. An der Fermienergie, also für  $\epsilon = 0$ , verschwindet der Beitrag  $\theta_d$  der normalleitenden Grenzschicht, der Beitrag für eine Andreev-Reflexion konvergiert gegen  $\frac{\pi}{2}$ . Insgesamt gilt also:

$$\Delta\varphi_{ges}(\epsilon = 0) = -\pi + \Delta\theta. \quad (7.4.16)$$

Insbesondere für einen Phasenunterschied von  $\pi$  zwischen den beiden supraleitenden Elektroden ist die Quantenbedingung für einen gebundenen Zustand also stets erfüllt.

$$\Delta\varphi_{ges}(\epsilon = 0, \Delta\theta = \pi) = 0 = 2\pi n. \quad (7.4.17)$$

Dies gilt unabhängig von der Dicke  $d_N$  der normalleitenden Grenzschicht, also auch für  $d_N = 0$ .

## 7.4.2 Andreev-Streuung an Ferromagnet/Supraleiter-Grenzflächen

Wir betrachten nun eine FM/S-Grenzfläche. Um uns die Auswirkung der endlichen Spinpolarisation im Ferromagneten auf die Andreev-Streuung klar zu machen, betrachten wir zunächst Abb. 7.26. Da ein Paarzustand in einem Supraleiter<sup>41</sup> aus einem  $\uparrow$  und einem  $\downarrow$  Elektron gebildet wird, benötigt ein einlaufendes  $\uparrow$  Elektron an der Ferromagnet/Supraleiter-Grenzfläche ein  $\downarrow$  Elektron zur Bildung eines Cooper-Paares. Das heißt, es fehlt dann ein  $\downarrow$  Elektron im Ferromagneten. Aus Ladungs- und Spinerhaltungsgründen muss ein  $\uparrow$  Loch an der Grenzfläche Andreev reflektiert werden. Wir müssen dabei beachten, dass das  $\uparrow$  Loch aus Konvention dem Fehlen eines  $\downarrow$  Elektrons in der  $\downarrow$  Zustandsdichte entspricht, wie in Abb. 7.26a gezeigt ist. Betrachten wir den Spin bei der Andreev-Reflexion, so sehen wir, dass der Andreev-Prozess einem kohärenten Interspinsubband-Transfer entspricht, der empfindlich auf die relativen Zustandsdichten der Spinsubbänder, also auf die Spinpolarisation  $P$ , ist. Dies können wir nun ausnutzen, um die Spinpolarisation zu bestimmen.

Für  $P = 0$  wird die Wahrscheinlichkeit für Andreev-Streuung nicht durch das Fehlen von Minoritätsladungsträgern reduziert. Nehmen wir allerdings an, dass  $P = 100\%$  ist (siehe

<sup>41</sup>Wir betrachten hier nur den einfachsten Fall eines  $s$ -Wellen-Supraleiters mit Spin-Singulett Cooper-Paaren.

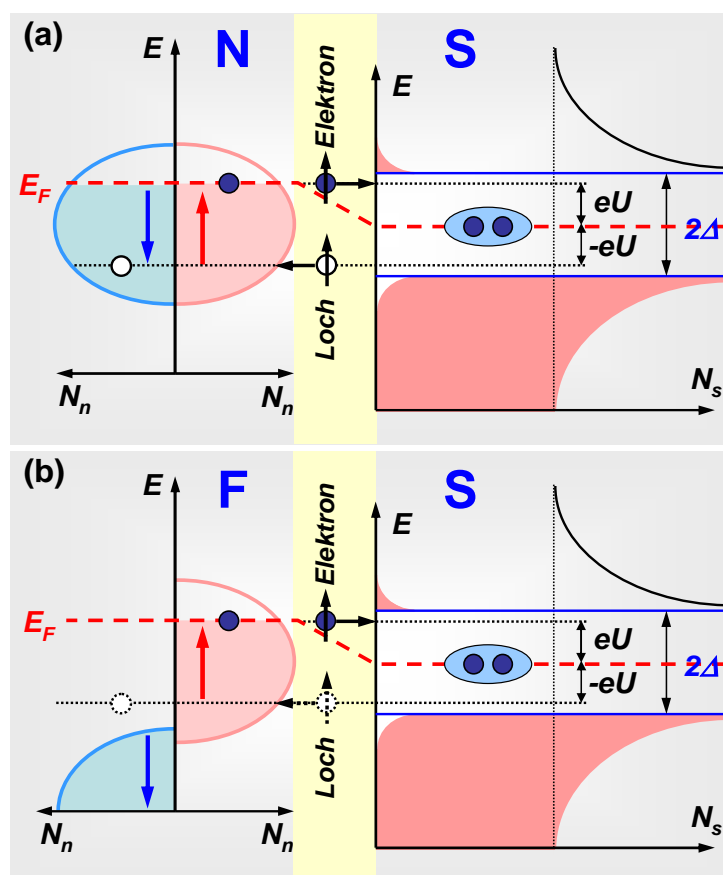


Abbildung 7.26: Andreev-Streuung an einer N/S (a) und einer F/S-Grenzfläche (b) für einen Ferromagneten mit  $P = 100\%$ . Links ist die Zustandsdichte für  $\uparrow$  und  $\downarrow$  Elektronen im nichtmagnetischen Metall bzw. Ferromagneten, rechts die Zustandsdichte im Supraleiter gezeigt. Die gefüllten Kreise repräsentieren Elektronen, die offenen Löcher. In (b) ist die Andreev-Streuung verboten, da in der Spin-aufgespaltenen Zustandsdichte des Ferromagneten keine adäquaten Spin- $\downarrow$ -Zustände vorhanden sind. Hinweis: Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist die Energielücke des Supraleiter im Vergleich zur Breite der Bänder in N bzw. F viel zu groß gezeichnet.

Abb. 7.26c), dann gibt es keine  $\downarrow$  Zustände im Ferromagneten bei der Fermi-Energie. Das bedeutet, dass ein einlaufendes  $\uparrow$  Elektron keinen Partner (fehlendes  $\downarrow$  Elektron aus dem Ferromagneten bzw. Andreev-reflektiertes  $\uparrow$  Loch) zur Bildung eines Cooper-Paares finden kann (siehe Abb. 7.26b). Das heißt, die Andreev-Streuung ist nicht möglich. Bei  $T = 0$  wird dadurch die Leitfähigkeit für  $E < \Delta(T)$  auf Null reduziert.

In Fig. 7.27 sind typische experimentelle  $G(U)$  Kurven für einen N/S- und einen F/S-Kontakt gezeigt. Wir sehen, dass für den N/S-Kontakt für  $E < \Delta(T)$  die Leitfähigkeit durch die hier mögliche Andreev-Streuung um etwa den Faktor 2 gegenüber dem N/N-Kontakt erhöht wird ( $G(U)/G_{NN} = 2$ ), während für den F/S-Kontakt die Leitfähigkeit aufgrund der endlichen Spinpolarisation stark reduziert ist ( $G(U)/G_{NN} \rightarrow 0$ ). Dies macht deutlich, dass wir durch die Messung der Leitfähigkeitsspektren  $G(U)$  von F/S Andreev-Kontakten die Spinpolarisation von Ferromagneten bestimmen können.

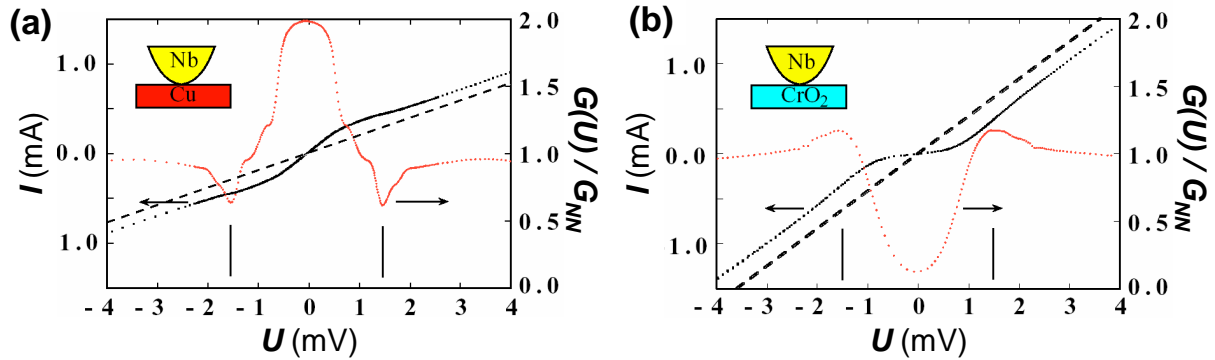


Abbildung 7.27: Strom-Spannungs-Charakteristiken und auf  $G_{NN}$  normierte  $G(U)$  Kennlinien (nach R. J. Soulen *et al.*, Science 282, 85 (1998)).

### Bestimmung der Spinpolarisation

Die Spinpolarisation eines Ferromagneten ist definiert als (vergleiche (7.3.3))

$$P \equiv \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} = a - (1 - a) = 2a - 1 . \quad (7.4.18)$$

Diese theoretisch definierte Spinpolarisation wird allerdings in Experimenten meist nicht direkt gemessen (siehe hierzu die ausführliche Diskussion in Abschnitt 7.10).

In Andreev-Experimenten messen wir die so genannte "Kontakt"- oder "Strom"-Polarisation

$$P_C = \frac{I_{\uparrow} - I_{\downarrow}}{I_{\uparrow} + I_{\downarrow}} . \quad (7.4.19)$$

Da  $I_{\sigma} \propto v_{F\sigma} N_{\sigma}(E_F)$ , wobei  $v_{F\sigma}$  die Fermi-Geschwindigkeit des jeweiligen Spinbandes ist, können wir die Spinpolarisation wie folgt ausdrücken:

$$P_C = \frac{N_{\uparrow}(E_F) v_{F\uparrow} - N_{\downarrow}(E_F) v_{F\downarrow}}{N_{\uparrow}(E_F) v_{F\uparrow} + N_{\downarrow}(E_F) v_{F\downarrow}} . \quad (7.4.20)$$

Das Auftauchen der Fermi-Geschwindigkeit im Ausdruck für die Spinpolarisation erwartet man im Rahmen der Theorie von Punktkontakten, die hier nicht näher diskutiert werden soll.<sup>42</sup>

Es sei hier darauf hingewiesen, dass Tunnelexperimenten auch nicht  $P$  sondern genau genommen eine "Tunnel"-Polarisation

$$P_T = \frac{N_{\uparrow}(E_F) |M_{\uparrow}|^2 - N_{\downarrow}(E_F) |M_{\downarrow}|^2}{N_{\uparrow}(E_F) |M_{\uparrow}|^2 + N_{\downarrow}(E_F) |M_{\downarrow}|^2} \quad (7.4.21)$$

gemessen wird, wobei  $M_{\uparrow}$  und  $M_{\downarrow}$  die Tunnelmatrixelemente für Spin  $\uparrow$  und Spin  $\downarrow$  Elektronen sind. In Abschnitt 7.3.2 wurde stillschweigend vorausgesetzt, dass diese Matrixelemente für beide Spinrichtungen gleich sind, woraus  $P_T = P$  folgt. Dies ist in den meisten Fällen aber nicht zutreffend, da die Matrixelemente durch den Überlapp der Wellenfunktionen an der Grenzfläche bestimmt sind und generell für Spin  $\uparrow$  und Spin  $\downarrow$  unterschiedlich sein sollten (siehe hierzu Abschnitt 7.10). Wichtig ist, dass die Größen  $P_T$  und  $P_C$  für den spinabhängigen Transport oder magnetoelektronische Bauelemente eine größere Relevanz besitzen als die theoretische Spinpolarisation  $P$ .

<sup>42</sup>Yu. V. Sharvin, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 48, 984 (1965); Sov. Phys. JETP 21, 655 (1965).

### Bestimmung der Spinpolarisation durch Andreev-Streuung

Um die  $G(U)$  Charakteristiken von F/S-Kontakten auszuwerten und daraus  $P_C$  zu bestimmen, müssen wir das BTK-Modell entsprechend erweitern. Wie oben bereits diskutiert wurde, erlaubt das BTK-Modell mit Hilfe des Parameters  $Z$  auch die Behandlung von normaler Grenzflächenstreuung. Bei Punktkontakten sprechen wir für  $Z = 0$  von einem ballistischen Punktkontakt, bei  $Z \gg 1$  von einem Tunnelkontakt. Wir wollen uns im Folgenden zunächst nur auf Kontakte konzentrieren, für die  $Z$  sehr klein ist.

Wir teilen den Gesamtstrom  $I$  in zwei Komponenten

$$I = I_{\uparrow} + I_{\downarrow} = 2I_{\downarrow} + (I_{\uparrow} - I_{\downarrow}) = I_{\text{unpol}} + I_{\text{pol}} \quad (7.4.22)$$

auf. Hierbei trägt der unpolarisierte Strom  $I_{\text{unpol}}$  keine Netto-Spinpolarisierung und kann durch die bekannte BTK-Theorie beschrieben werden. Der verbleibende Strom  $I_{\text{pol}}$  trägt die gesamte Polarisation und ist damit ein reiner Quasiteilchenstrom, da der Suprastrom keine Netto-Polarisation tragen kann. Dieser Strom kann berechnet werden, indem nur Normal-Streuprozesse an der Grenzfläche zugelassen werden. Innerhalb des BTK-Modells bedeutet dies, dass wir den Andreev-Streukoeffizienten  $r_A = 0$  setzen und die restlichen Prozesse auf eins normieren, um Stromerhaltung zu gewährleisten. Dann kann  $P_C$  aus den gemessenen  $G(V)$  Kurven bestimmt werden, wenn wir berücksichtigen, dass

$$G(U, T, P_C, Z) = (1 - P_C) \frac{d}{dU} I_{\text{unpol}}(U, T, Z) + P_C \frac{d}{dU} I_{\text{pol}}(U, T, Z). \quad (7.4.23)$$

Für  $Z \simeq 0$  und  $eU \ll \Delta(T)$  sowie  $k_B T \ll \Delta(T)$  können wir gemäß obiger Diskussion

$$\frac{1}{G_{\text{NN}}} \frac{d}{dU} I_{\text{unpol}} = 2 \quad \text{und} \quad \frac{1}{G_{\text{NN}}} \frac{d}{dU} I_{\text{pol}} = 0 \quad (7.4.24)$$

setzen, womit wir dann für den Grenzfall  $eV \rightarrow 0, T \rightarrow 0, Z = 0$

$$\frac{1}{G_{\text{NN}}} \frac{dI}{dU} = \frac{G(U)}{G_{\text{NN}}} = 2(1 - P_C) \quad (7.4.25)$$

erhalten. Diese Ergebnis wurde erstmals von **de Jong** und **Beenakker** vorhergesagt.<sup>43</sup>

Auf der Basis von (7.4.25) ist die experimentelle Bestimmung von  $P_C$  sehr einfach. Wir messen  $G(U)$  und  $G_{\text{NN}}$  und haben damit  $P_C$  bestimmt. Falls die Bedingungen  $eU \rightarrow 0, T \rightarrow 0, Z = 0$  nicht strikt erfüllt sind, müssen wir die gemessenen  $G(V)$  Kurven an das BTK-Modell anpassen und dadurch  $P_C$  bestimmen. Abb. 7.28 zeigt experimentelle  $G(U)$  Kurven für verschiedene Proben mit unterschiedlichen Werten für  $P_C$ . Die supraleitende Elektrode bestand jeweils aus Niob. Insbesondere sind die Kurven für Cu/Nb ( $P = 0$ ) und CrO<sub>2</sub>/Nb Kontakte ( $P = 100\%$ ) gezeigt, sowie F/Nb Kontakte für ferromagnetische Materialien mit mittlerer Spinpolarisation wie NiFe oder Co.

Die Werte für  $P_C$ , die mit Hilfe der Andreev-Streuung bestimmt werden, differieren von denen, die mit Hilfe von FIS-Tunnelkontakten bestimmt wurden. Die genauen Gründe dafür

<sup>43</sup>M. J. M. de Jong, C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **74**, 1657 (1995).



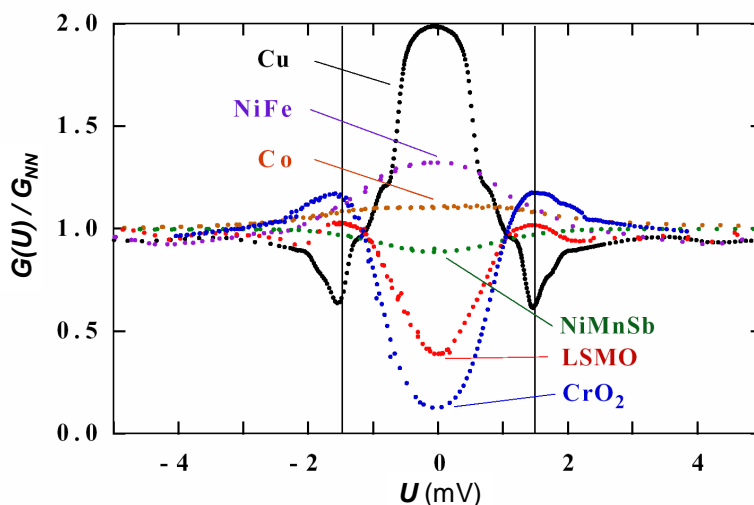


Abbildung 7.28:  $G(U)$  Abhängigkeiten für Punktkontakte zwischen Niob und mehreren ferromagnetische Materialien. Die senkrechten Linien markieren die Energielückenspannung von Niob (nach R. J. Soulen et al., Science 282, 85 (1998)).

sind allerdings noch nicht völlig klar, da Differenzen auch auf unterschiedliche Probenqualität zurückgeführt werden können. In Tabelle 7.2 sind die Werte für die "Tunnel"- und "Kontakt"-Spinpolarisation gegenübergestellt. Man sieht, dass immer  $P_C > P_T$  ist. Wir erkennen ferner, dass mit Hilfe der Andreev-Streuung viele Materialien untersucht werden konnten, für die die Herstellung von Tunnelkontakten mit erheblichen präparativen Schwierigkeiten verbunden ist (z.B. Heusler-Verbindungen: NiMnSb, die dotierten Manganate: LaSrMnO oder CrO<sub>2</sub>). Es sei hier noch angemerkt, dass die in Tabelle 7.2 angegebenen Werte für  $P_T$  in der neueren Literatur bereits revidiert wurden (vergleiche Tabelle 7.1).<sup>44,45</sup> So werden dort  $P_T = 42\%$  für Co,  $44\%$  für Fe,  $33\%$  für Ni und  $48\%$  für Ni<sub>80</sub>Fe<sub>20</sub> angegeben, d.h. wesentlich höhere Werte, die mit den aus Andreev-Streuexperimenten bestimmten Werten für  $P_C$  weitaus besser übereinstimmen. Daraus können wir folgern, dass die ursprünglich gemessenen kleineren Werte wohl auf eine mangelnde Probenqualität zurückzuführen sind.

<sup>44</sup>Moodera et al., Annu. Rev. Mater. Sci. 29, 381 (1999).

<sup>45</sup>J.M.D. Coey, J.J. Versluijs, M. Venkatesan, J. Phys. D: Appl. Phys. 35, 2457 (2002).

Material	Spitze	Gegenelektrode	$N$	$P_T$ (%)	$P_C$ (%)
Co	Nb	Co-Folie	7	$35 \pm 3$	$42 \pm 2$
Fe	Nb	Fe-Film	4		$42 \pm 2$
Fe	Ta	Fe-Film	12	$40 \pm 2$	$45 \pm 2$
Fe	Fe	Ta-Folie	14		$46 \pm 2$
Fe	Fe	V-Kristall	10		$45 \pm 2$
Ni	Nb	Ni-Folie	4	$23 \pm 3$	$46.5 \pm 1$
Ni	Nb	Ni-Film	5		$43 \pm 2$
NiFe	Nb	Ni <sub>0.8</sub> Fe <sub>0.2</sub> -Film	14	$25 \pm 2$	$37 \pm 5$
NiMnSb	Nb	NiMnSb-Film	9		$58 \pm 2.3$
La <sub>0.7</sub> Sr <sub>0.3</sub> MnO <sub>3</sub>	Nb	LSMO-Film	14		$78 \pm 42$
CrO <sub>2</sub>	Nb	CrO <sub>2</sub> -Film	9		$90 \pm 3.6$

Tabelle 7.2: Vergleich experimenteller Ergebnisse zur Spinpolarisation, die mittels Andreev-Streuung in F/S-Kontakten ( $P_C$ ) und spinpolarisiertem Tunneln in FIS-Tunnelkontakten ( $P_T$ ) gewonnen wurden. Für die Punktkontakte ist angegeben, welches Material für die Spitze und welches für die planare Gegenelektrode verwendet wurde,  $N$  gibt die Anzahl von Punktkontakt-Experimenten an. (Daten aus R. J. Soulen et al., Science 282, 85 (1998)).

## 7.5 Ferromagnet/Isolator/Ferromagnet-Kontakte

Wir diskutieren in diesem Abschnitt das Tunneln von spinpolarisierten freien Elektronen durch eine rechteckförmige Tunnelbarriere. Wir verwenden dabei den in Abschnitt 7.1 eingeführten Wave-Matching Ansatz. Wir vergleichen dann das mit diesem Ansatz erhaltene allgemeine Ergebnis mit einem einfachen, von **Jullière** bereits im Jahr 1975 entwickelten Modell und einigen Weiterentwicklungen dieses Modells.<sup>46</sup>

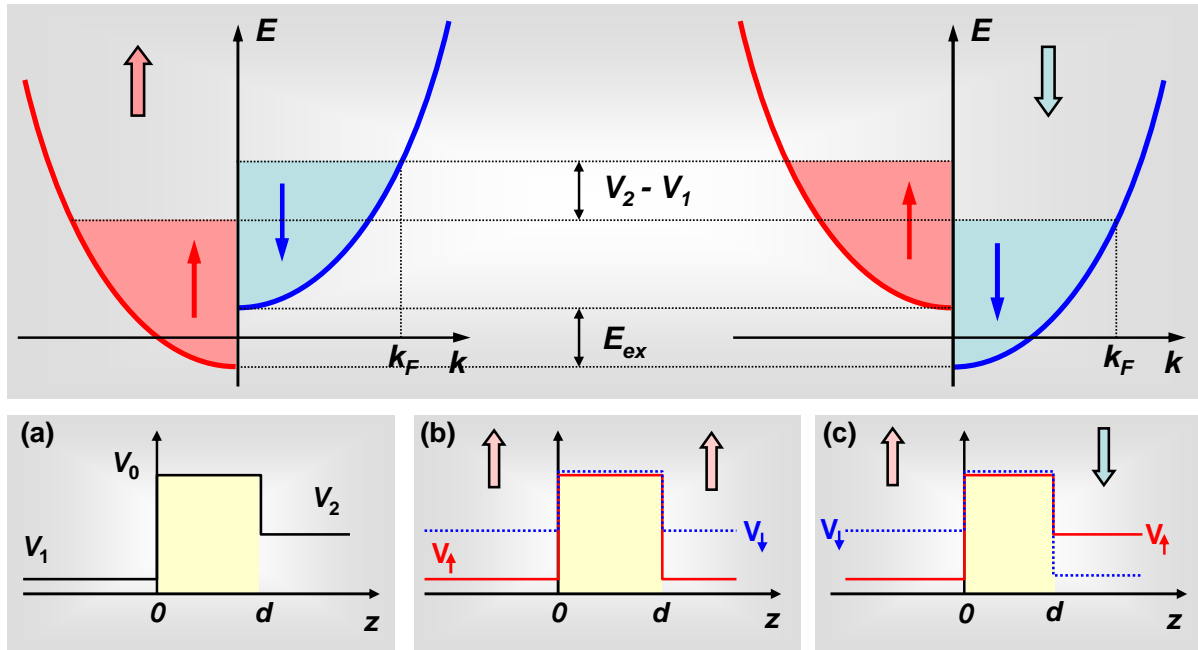


Abbildung 7.29: Potenzialverlauf für einen ferromagnetischen Tunnelkontakt auf der Basis des freien Elektronenmodells. Oben:  $E(k)$  für das Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Band für unterschiedliche Magnetisierungsrichtungen. Unten: (a) Stückweise konstantes Potenzial ( $V_0$ : Barrierenhöhe); (b) parallele Magnetisierungskonfiguration ( $V_\uparrow = V_1$  für  $z < 0$ ,  $V_\downarrow = V_2$  für  $z > d$ ); (c) antiparallele Magnetisierungskonfiguration ( $V_\uparrow = V_1$  für  $z < 0$ ,  $V_\downarrow = V_2$  für  $z > d$ ).

Für einen einzelnen Spinkanal sind die Potentiale für freie Elektronen in den beiden Elektroden und der Tunnelbarriere  $V_1$ ,  $V_2$  und  $V_0$ , wobei  $V_1, V_2 \simeq E_F$  und  $V_0 \gg E_F$ . Den Potenzialverlauf im Ferromagnet/Isolator/Ferromagnet (FIF) Kontakt können wir dann mit dem in Abb. 7.29 gezeigten Verlauf, d.h. mit einem stückweise konstanten Potenzial mit den Werten  $V_1$  und  $V_2$  in den beiden Halbräumen und  $V_0$  in der Barriere beschreiben. Im Fall paralleler Magnetisierungsrichtung (Abb. 7.29b) ist  $V_1$  das Potenzial für die Majoritätselektronen ( $\uparrow$ ) und  $V_2$  das Potenzial für die Minoritätselektronen ( $\downarrow$ ), so dass  $V_2 - V_1 = V_\downarrow - V_\uparrow$  die Austauschkopplung  $E_{ex}$  angibt. Der Potenzialverlauf im Fall antiparalleler Magnetisierungsorientierung ist in Abb. 7.29c gezeigt. Analog zu Abschnitt 7.1 lässt sich die Schrödinger-Gleichung durch Ansätze mit ebenen Wellen bzw. Exponentialfunktionen lösen, wobei die Konstanten aus der stetigen Anpassung der Wellenfunktionen und ihrer Ortsableitung bestimmt werden können.

Für dieses Modell mit den Potenzialen  $V_1$  und  $V_2$  ist der Transmissionskoeffizient  $T(\mathbf{k}_\parallel)$  gege-

<sup>46</sup>M. Jullière, Phys. Lett. **54A**, 225 (1975).

ben durch<sup>47</sup>

$$T(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{16k_1\kappa^2k_2 \exp(2\kappa d)}{\{\kappa(k_1 + k_2)[1 + \exp(2\kappa d)]\}^2 + \{(\kappa^2 - k_1k_2)[1 - \exp(2\kappa d)]\}^2} . \quad (7.5.1)$$

Dieser Ausdruck geht im Grenzfall  $\kappa d \gg 1$  über in

$$T(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{16k_1\kappa^2k_2}{[\kappa(k_1 + k_2)]^2 + (\kappa^2 - k_1k_2)^2} \exp(-2\kappa d) . \quad (7.5.2)$$

Hierbei sind  $k_1$  und  $k_2$  die  $z$ -Komponenten der Wellenvektoren beim Fermi-Niveau auf der linken und rechten Seite der Barriere und  $\kappa$  die Abklingkonstante innerhalb der Barriere. Sie sind gegeben durch

$$k_{1,2} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_F - V_{1,2}) - k_{\parallel}^2} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E_F) + k_{\parallel}^2} . \quad (7.5.3)$$

Um den Tunnelleitwert zu erhalten, ist dieses Ergebnis nach Landauer und Büttiker<sup>48</sup> über alle  $k_{\parallel}$ -Werte zu integrieren:

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{1}{(2\pi)^2} \iint d^2k_{\parallel} T(k_{\parallel}) . \quad (7.5.4)$$

Hierbei wird angenommen, dass keine diffusive Streuung an der Barriere stattfindet und deshalb  $k_{\parallel}$  erhalten bleibt. Somit kann jedem  $k_{\parallel}$  ein unabhängiger Transportkanal mit Leitwert  $e^2/h$  zugeordnet werden.

Im freien Elektronenmodell haben die beiden Spinkanäle unterschiedliche Wellenvektoren  $k_{\uparrow} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_F - V_{\uparrow}) - k_{\parallel}^2}$  und  $k_{\downarrow} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_F - V_{\downarrow}) - k_{\parallel}^2}$  beim Fermi-Niveau (siehe Abb. 7.29). Somit finden wir die Leitfähigkeit für parallele Magnetisierungsrichtung mit Hilfe von (7.5.1) und (7.5.4), indem wir  $k_1 = k_2 = k_{\uparrow}$  benutzen. Für die antiparallele Orientierung müssen wir  $k_1 = k_{\uparrow}$  und  $k_2 = k_{\downarrow}$  einsetzen. Mit der in (7.3.3) gegebenen Definition für die Spinpolarisation ist innerhalb eines freien Elektronengasmodells die Spinpolarisation wegen  $N(E) \propto k$  einfach durch

$$P = \frac{k_{\uparrow} - k_{\downarrow}}{k_{\uparrow} + k_{\downarrow}} = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} \quad (7.5.5)$$

gegeben. Betrachten wir den in Abb. 7.29 gezeigten Potenzialverlauf, so müssen wir die  $G$ -Werte für die parallele ( $G_p$ ) und die antiparallele ( $G_{ap}$ ) Konfiguration berechnen, indem wir jeweils über beide Spinrichtungen der Elektronen summieren. Diese  $G$ -Werte erhalten wir dann zu

$$G_p = G(V_1, V_1) + G(V_2, V_2) \quad (7.5.6)$$

$$G_{ap} = G(V_1, V_2) + G(V_2, V_1) . \quad (7.5.7)$$

<sup>47</sup>J. M. MacLaren, X.-G. Zhang, W. H. Butler, Phys. Rev. **B 56**, 11827 (1997).

<sup>48</sup>R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957); IBM J. Res. Dev. **32**, 317 (1988).

Hierbei geben die Argumente  $V_i, V_j$  an, welche Potenzialwerte  $V$  wir entsprechend Abb. 7.29 im linken und im rechten Halbraum verwenden müssen. Von zentralem Interesse ist dabei die normierte Änderung der Leitwerte

$$\text{TMR} \equiv \frac{G_p - G_{\text{ap}}}{G_{\text{ap}}} = \frac{R_{\text{ap}} - R_p}{R_p} \quad (7.5.8)$$

$$\text{JMR} \equiv \frac{G_p - G_{\text{ap}}}{G_p} = \frac{R_{\text{ap}} - R_p}{R_{\text{ap}}} \quad (7.5.9)$$

Hierbei bezeichnet TMR den so genannten *Tunneling Magnetoresistance* und JMR den so genannten *Junction Magnetoresistance*.

### 7.5.1 Jullière – Modell

Von **Jullière**<sup>49</sup> stammt ein sehr einfacher Ansatz für die Bestimmung der im letzten Abschnitt diskutierten Leitwerte. Das *Jullière-Modell* macht folgende Annahmen:

- Spin-Erhaltung beim Tunnelprozess.
- die Tunnelleitfähigkeit für jede Spinrichtung ist proportional zur effektiven Zustandsdichte der jeweiligen Spinrichtung in beiden Elektroden.<sup>50</sup>

Aufgrund dieser Annahmen erwartet man eine größere Tunnelleitfähigkeit bei paralleler Ausrichtung der Magnetisierung beider Elektroden im Vergleich zur antiparallelen Ausrichtung. Im einfachen Bandschema der  $3d$ -Elektronen von Übergangsmetallen ist dieser Effekt leicht zu verstehen (siehe Abb. 7.30). Bei paralleler Ausrichtung führt eine Spannung  $U$  zwischen den Elektroden zu einer hohen Zahl von besetzten Minoritätsladungsträgern, die einer hohen Zahl von freien Zuständen derselben Spinrichtung in der anderen Elektrode gegenübersteht. Im Fall der antiparallelen Ausrichtung dreht sich die Spinorientierung der Majoritäts- bzw. Minoritätsladungsträger in einer Elektrode gerade um, so dass bei endlicher Spinpolarisation die Tunnelleitfähigkeit reduziert wird. Im Fall von 100% Spinpolarisation, wie in Abb. 7.30 gezeigt ist, sollte in diesem Bild die Tunnelleitfähigkeit bei antiparalleler Magnetisierungsausrichtung sogar gegen Null, bzw. der Tunnelwiderstand gegen Unendlich gehen.

Mit den oben gemachten Annahmen erhalten wir für die Tunnelleitfähigkeit  $G_p$  bei paralleler Magnetisierungsrichtung

$$G_p \propto a_1 a_2 + (1 - a_1)(1 - a_2) = \frac{1}{2}(1 + P_1 P_2) \quad (7.5.10)$$

<sup>49</sup>M. Jullière, Phys. Lett. **54A**, 225 (1975).

<sup>50</sup>In einem freien Elektronmodell ist diese effektive Tunnelzustandsdichte wohl die Zustandsdichte beim Fermi-Niveau für die jeweilige Spinrichtung. In einem realen Ferromagneten haben allerdings unterschiedliche Zustände unterschiedliche effektive Massen und Geschwindigkeiten. Deshalb ist die Tunnelzustandsdichte hier ein geeignet gewichteter Mittelwert.

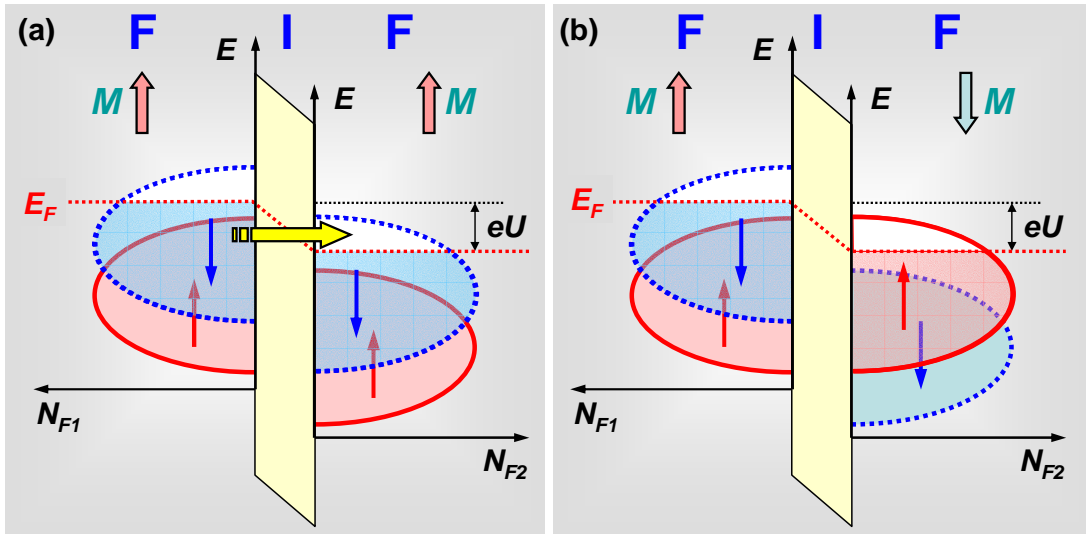


Abbildung 7.30: Schematisches Bandschema eines Ferromagneten mit vollständiger Spinpolarisation zur Ableitung des Tunnelmagnetowiderstands nach dem Jullière-Modell: (a) Parallele und (b) antiparallele Magnetisierungsausrichtung. Das Spin-↓ Band ist gepunktet, das Spin-↑ Band durchgezogen gezeichnet. Nur bei paralleler Magnetisierungsorientierung kann ein endlicher Tunnelstrom fließen.

und für die Tunnelleitfähigkeit  $G_{\text{ap}}$  bei antiparalleler Magnetisierungsrichtung

$$G_{\text{ap}} \propto a_1(1 - a_2) + (1 - a_1)a_2 = \frac{1}{2}(1 - P_1P_2) \quad (7.5.11)$$

Hierbei ist  $a_i \equiv N_{i\uparrow}/(N_{i\uparrow} + N_{i\downarrow}) = (1 + P_i)/2$  der Bruchteil der Majoritätsladungsträger und  $1 - a_i \equiv N_{i\downarrow}/(N_{i\uparrow} + N_{i\downarrow}) = (1 - P_i)/2$  der Bruchteil der Minoritätsladungsträger in den beiden ferromagnetischen Elektroden  $i = 1, 2$ .  $P_i$  ist die Spinpolarisation der beiden Elektroden  $i = 1, 2$ .

Mit Hilfe von (7.5.8) und (7.5.9) erhalten wir für den JMR und den TMR

$$\text{JMR} \equiv \frac{G_p - G_{\text{ap}}}{G_p} = \frac{R_{\text{ap}} - R_p}{R_{\text{ap}}} = \frac{2P_1P_2}{1 + P_1P_2} \quad (7.5.12)$$

$$\text{TMR} \equiv \frac{G_p - G_{\text{ap}}}{G_{\text{ap}}} = \frac{R_{\text{ap}} - R_p}{R_p} = \frac{2P_1P_2}{1 - P_1P_2} \quad (7.5.13)$$

Der JMR- und TMR-Effekt werden üblicherweise in Prozent angegeben. Wir sehen, dass der JMR für eine vollständige Spinpolarisation beider Tunnelelektroden ( $P_1 = P_2 = 1$ ) den maximalen Wert von 100% erreicht, während der TMR unendlich wird. Wir sehen, dass wir für Tunnelkontakte mit gleichem Elektrodenmaterial durch Messung von  $G_p$  und  $G_{\text{ap}}$  die Spinpolarisation des Elektrodenmaterials bestimmen können. Das gleiche trifft zu, wenn wir einen Kontakt mit zwei unterschiedlichen Elektroden vorliegen haben, und den Wert der Spinpolarisation eines Materials bereits wissen. Die so bestimmte Spinpolarisation ist wiederum eine "Tunnel"-Spinpolarisation (siehe Abschnitt 7.10).

## 7.5.2 Vertiefungsthema: Weiterentwicklungen des Jullière-Modells

### Modell von Slonczewski

Das Jullière-Modell basiert auf der vereinfachenden Annahme, dass die Tunnelleitfähigkeit nur von der Dichte der Anfangs- und Endzustände und einem Tunnelmatrixelement abhängt, das spinunabhängig ist. Diese Vereinfachung führt zu vernünftigen Ergebnissen, wenn die Barriere sehr hoch oder sehr dick ist. In diesem Fall kann die Überlappung der Wellenfunktionen auf beiden Seiten der Tunnelbarriere vernachlässigt werden. Für sehr transparentere Barrieren müssen wir aber die Anpassung der Wellenfunktionen durchführen, wie wir dies bereits in Abschnitt 7.5 getan haben. Die Wave-Matching Methode wurde auf FIF-Kontakte mit rechteckförmiger Barriere erstmals von **Slonczewski**<sup>51</sup> angewendet. Er hat dabei die Ferromagneten mit einfachen parabolischen Bändern ( $E(k) \propto k^2$ , freies Elektronenmodell) beschrieben. Er erhielt dann durch Integration von (7.5.4)

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{\kappa(0)}{4\pi d} T(0), \quad (7.5.14)$$

wobei  $\kappa(0)$  der Abklingwellenvektor in der Barriere für  $k_{\parallel} = 0$  ist. Dieses Ergebnis erhalten wir aus (7.5.4), indem wir nur die Terme der Ordnung  $1/d$  berücksichtigt und höhere Ordnungen vernachlässigt. Man entwickelt dazu (7.5.3), wodurch  $\kappa(k_{\parallel}) \simeq \kappa(0) + \frac{1}{2} \frac{k_{\parallel}^2}{\kappa(0)}$  erhalten wird (vergleiche hierzu (7.1.17)).

Das wesentliche Ergebnis von Slonczewski liegt in der Aussage, dass die effektive Polarisation  $P_{\text{eff}}$  nun von der Barrierenhöhe  $V_0$  abhängig ist, und zwar über den Abklingwellenvektor  $\kappa = \sqrt{[2m(V_0 - E_F)]/\hbar^2}$

$$P_{\text{eff}} = \frac{k_{\uparrow} - k_{\downarrow}}{k_{\uparrow} + k_{\downarrow}} \frac{\kappa^2 - k_{\uparrow}k_{\downarrow}}{\kappa^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow}} = P \cdot \frac{\kappa^2 - k_{\uparrow}k_{\downarrow}}{\kappa^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow}}. \quad (7.5.15)$$

Hierbei sind  $k_{\uparrow}, k_{\downarrow}$  die Fermi-Wellenvektoren für die Spin-Up und Spin-Down Bänder. Im Fall von parabolischen Bändern gilt  $k_{\uparrow} \propto N_{\uparrow}(E_F)$ ,  $k_{\downarrow} \propto N_{\downarrow}(E_F)$ . In diesem Fall liefert der erste Faktor in (7.5.15) gerade die klassische Definition für  $P$ , d.h. der erste Faktor in (7.5.15) entspricht dem obigen Ergebnis (7.5.5). Der zweite Faktor in (7.5.15)  $A \equiv \frac{\kappa^2 - k_{\uparrow}k_{\downarrow}}{\kappa^2 + k_{\uparrow}k_{\downarrow}}$  ist neu.  $A$  kann Werte von -1 (niedrige Barriere:  $\kappa \rightarrow 0$ ) bis +1 (hohe Barriere:  $\kappa \rightarrow \infty$ ) annehmen. Während wir also, wie erwartet, für hohe Barrieren das Jullière-Ergebnis reproduzieren, kann für niedrige Barrieren sogar das Vorzeichen von  $P_{\text{eff}}$  wechseln.

Zudem zeigte **Bratkovsky**,<sup>52</sup> dass die Berücksichtigung einer normierten effektiven Masse  $m^*$  in der Barriere ebenfalls in die effektive Polarisation eingeht, und zwar gemäß

$$P_{\text{eff}} = \frac{k_{\uparrow} - k_{\downarrow}}{k_{\uparrow} + k_{\downarrow}} \frac{\kappa^2 - (m^*)^2 k_{\uparrow}k_{\downarrow}}{\kappa^2 + (m^*)^2 k_{\uparrow}k_{\downarrow}}. \quad (7.5.16)$$

<sup>51</sup>J. C. Slonczewski, Phys. Rev. **B 39**, 6995 (1989).

<sup>52</sup>A. M. Bratkovsky, Phys. Rev. **B 56**, 2344 (1997).

Ein Problem des Modells von Slonczewski ist die Tatsache, dass es auf dem Wave-Matching Ansatz basiert und deshalb die direkte Berechnung der Wellenfunktionen erfordert. Dies ist zwar für einfache parabolische Bänder möglich, eine Verallgemeinerung auf komplexe Bandstrukturen ist aber schwierig. Ferner können innerhalb dieses Modells nur schwierig Unordnungseffekte in der Barriere berücksichtigt werden. Neuere Theorien benutzen deshalb den flexibleren Kubo/Landauer Ansatz (siehe unten) zur Berechnung der Leitfähigkeit.

### Numerische Rechnungen von MacLaren

Wir haben bisher verschiedene theoretische Modelle für die Beschreibung des spinabhängigen Tunnelns zwischen zwei Ferromagneten kennengelernt. Das einfache Jullière-Modell charakterisiert dabei den Magnetowiderstand einfach durch das Tunneln einer Spinpolarisation. Das Modell von Slonczewski stellt einen Näherungsausdruck für den Magnetwiderstand von freien Elektronen, die durch eine Barriere tunneln, zur Verfügung. Bratkovsky hat dies auf Bandelektronen erweitert. In einer Arbeit von **MacLaren, Zhang** und **Butler** aus dem Jahr 1997 wurde dann ein exakter Ausdruck für den Magnetwiderstand von freien Elektronen, die durch eine rechteckförmige Barriere tunneln, abgeleitet.<sup>53</sup> Ferner führten diese Autoren eine numerische Berechnung des Magnetwiderstands von Bandelektronen in Fe durch, auf die hier nicht eingegangen werden soll.

MacLaren und Mitarbeiter haben Gleichung (7.5.4) numerisch für unterschiedliche Barrierenhöhen und -dicken ausgewertet. Die Ergebnisse dieser Rechnungen wurden mit den Vorhersagen des Jullière-Modells (Gleichung (7.5.5)) und des Modells von Slonczewski (Gleichung (7.5.15)) verglichen. Das Ergebnis ist in Abb. 7.31 gezeigt. Man erkennt, dass das Jullière-Modell die normierte Leitfähigkeitsänderung  $\Delta G/G_p$  für alle Barrierendicken nicht gut beschreibt. Das Modell von Slonczewski beschreibt die Realität dagegen wesentlich besser. Der Ausdruck des Slonczewski-Modells beschreibt das Tunneln freier Elektronen am besten für dicke Barriere und kleine Barrierenhöhen. Die Fehler resultieren aus der Tatsache, dass im Modell von Slonczewski nur Terme in  $1/d$  bei der Entwicklung des Integrals in (7.5.4) berücksichtigt wurden. Die vernachlässigten Terme werden signifikant, falls  $\kappa$  groß wird, die Barrierendicke aber noch zu klein ist, damit der Exponentialfaktor dominant wird.

### Linear-Response-Theorien

Landauer konnte zeigen, dass die Leitfähigkeit für jeden Spinkanal  $\sigma$  ( $\sigma = \uparrow$  und  $\downarrow$ ) in einer (metallischen oder isolierenden) Schicht zwischen zwei Elektroden durch ihren jeweiligen Transmissionskoeffizienten  $T^\sigma$  ausgedrückt werden kann:

$$G^\sigma = \frac{e^2}{h} T^\sigma \quad (7.5.17)$$

Dieser Ausdruck ist exakt im Rahmen der linearen Antworttheorie, d.h. bei kleinen Spannungen.

Der einfachste Fall, auf den die obige *Landauer-Formel* anwendbar ist, ist der Fall für kohärentes Tunneln, d.h. wenn der Wellenvektor  $\mathbf{k}_\parallel$  beim Tunnelprozess erhalten bleibt. Erhaltung von  $\mathbf{k}_\parallel$  und des Spins bedeutet, dass alle Beiträge der Kanäle  $(\sigma, \mathbf{k}_\parallel)$  additiv sind. Die

<sup>53</sup>J. M. MacLaren, X.-G. Zhang, W. H. Butler, Phys. Rev. **B56**, 11827 (1997).



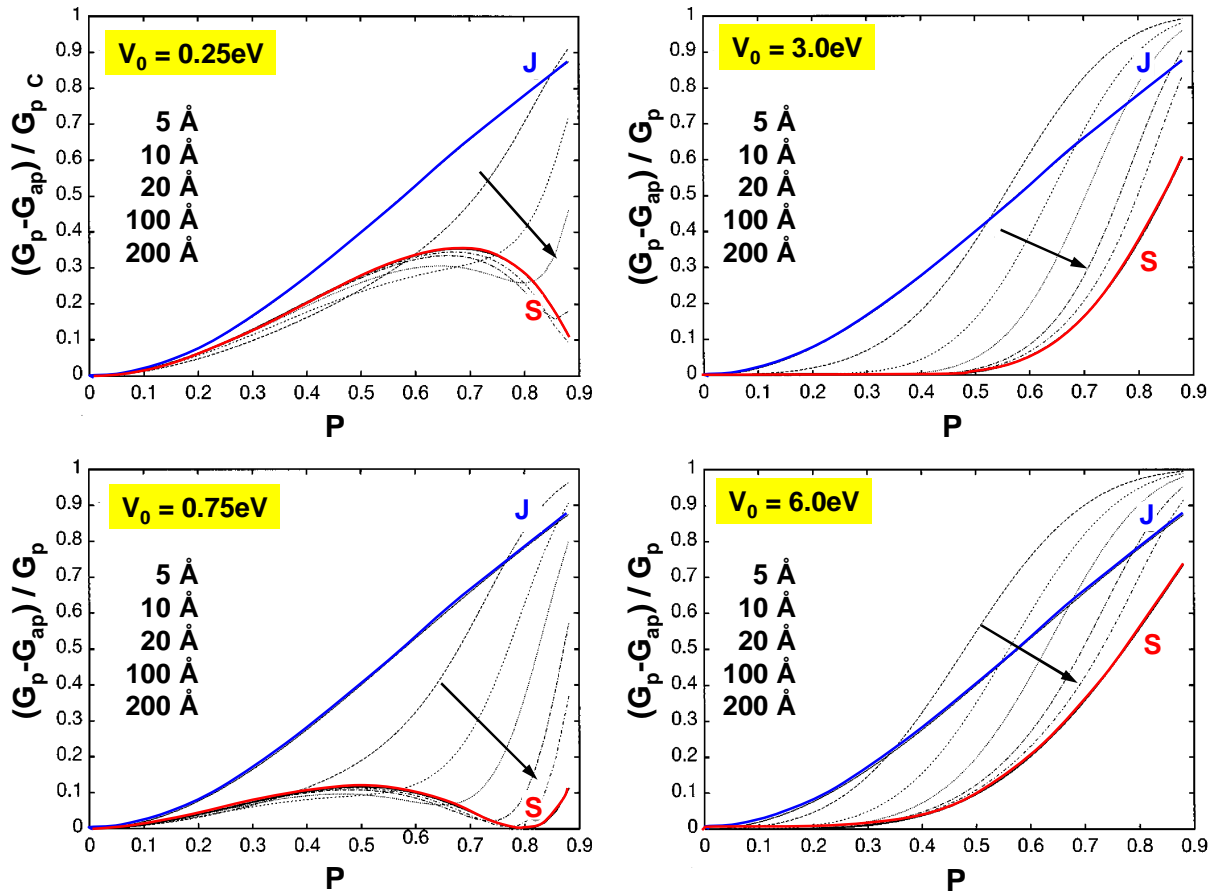


Abbildung 7.31:  $\Delta G/G_p$  für das spinabhängige Tunneln freier Elektronen für unterschiedliche Barrierenhöhen und -breiten. Zum Vergleich sind die Ergebnisse des Jullière- (J) und des Slonczewski-Modells (S) gezeigt. Die Pfeile geben die Richtung abnehmender Barrierendicke an (nach J. M. MacLaren, X.-G. Zhang, W. H. Butler, Phys. Rev. **B56**, 11827 (1997)).

Gesamtleitfähigkeit eines Spinkanals ergibt sich daher durch eine Summation über alle  $\mathbf{k}_{\parallel}$  in der 2-dimensionalen Brillouin-Zone zu

$$G^{\sigma} = \frac{e^2}{h} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} T^{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel}). \quad (7.5.18)$$

Zur Berechnung der Transmissionskoeffizienten  $T^{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel})$  wird oft die zur (7.5.18) äquivalente *Kubo-Formel* verwendet.<sup>54</sup> Demnach gilt für die frequenzabhängige Leitfähigkeit (bei  $T = 0$ ):

$$G^{\sigma}(\omega) = \frac{\pi}{\omega N^2} \int dE \sum_r \sum_{n,m} |\langle n | j_r^{\sigma} | m \rangle|^2 \quad (7.5.19)$$

$$\delta(E + \hbar\omega - E_m) \delta(E - E_n) \lim_{T \rightarrow 0} f(E) [1 - f(E + \hbar\omega)]. \quad (7.5.20)$$

Hierbei ist  $j_r^{\sigma}$  der Operator für den Stromfluss von einer atomaren Ebene  $r$  (parallel zu den Elektroden) zur nächsten Ebene. Die Summation über  $r$  geht über alle  $N$  atomaren Ebenen im Kontakt. Die Summation über  $n, m$  geht über alle Energie-Eigenzustände  $|n\rangle, |m\rangle$  des Systems

<sup>54</sup>J. Mathon, Phys. Rev. **B 56**, 11810 (1997).

mit Energien  $E_n$ ,  $E_m$ , und  $f$  ist die Fermi-Verteilung. Die Auswertung der Kubo-Formel erfordert lediglich die Bestimmung der lokalen Greensfunktionen von zwei benachbarten atomaren Ebenen (0,1). Damit ist die numerische Berechnung der Leitfähigkeit für realistische Bandstrukturen möglich.<sup>55,56,57</sup>

(a) *Vakuum-Tunneln:*

Der physikalische Hintergrund des Kubo/Landauer-Formalismus lässt sich am einfachsten am Beispiel des Tunnelns durch eine Vakuum-Lücke zwischen zwei Elektroden verstehen: Im Modell von Mathon<sup>58</sup> werden zwei ferromagnetische Elektroden durch einen *tight-binding, single orbital* Hamiltonian mit einem Hüpfintegral  $t_{bulk}$  für den Ladungstransport zwischen zwei benachbarten atomaren Ebenen beschrieben. Die Elektroden seien parallel zur (001)-Ebene (kubisches Gitter) und die Oberfläche der linken Elektrode (0) sei über das Hüpfintegral  $t_{01}$  an die Oberfläche der rechten Elektrode (1) gekoppelt. Das Hüpfintegral  $t_{01}$  ist durch den Überlapp der Wellenfunktionen in (0) und (1) bestimmt. Vakuumtunneln kann daher durch den graduellen Übergang von  $t_{01} = t_{bulk}$  (keine Lücke) nach  $t_{01} = 0$  (unendlich breite Lücke) beschrieben werden.

Die statische ( $\omega = 0$ ) Leitfähigkeit für den Spinkanal  $\sigma$  ergibt sich damit aus (7.5.20) zu

$$G^\sigma = \frac{4e^2}{h} t_{01}^2 \sum_{\mathbf{k}_\parallel} \frac{\text{Im}g_L^\sigma(E_F, \mathbf{k}_\parallel) \text{Im}g_R^\sigma(E_F, \mathbf{k}_\parallel)}{|1 - t_{01}^2 g_L^\sigma(E_F, \mathbf{k}_\parallel) g_R^\sigma(E_F, \mathbf{k}_\parallel)|^2}. \quad (7.5.21)$$

Hierbei sind  $g_L^\sigma(E_F, \mathbf{k}_\parallel)$  und  $g_R^\sigma(E_F, \mathbf{k}_\parallel)$  die Oberflächen-Greensfunktionen der linken und rechten isolierten Elektroden. Zur Berechnung des JMR (bzw. des TMR) müssen aus (7.5.21) die Leitfähigkeiten  $G^\uparrow$  und  $G^\downarrow$  für Spin-Up und Spin-Down Elektronen in der Konfiguration mit paralleler bzw. antiparalleler Elektrodenmagnetisierung bestimmt werden. Bei paralleler Magnetisierungsausrichtung gilt dann für die Gesamtleitfähigkeit  $G_p = G^\uparrow + G^\downarrow$ . Bei antiparalleler Magnetisierungsausrichtung gilt hingegen bei identischen Elektrodenmaterialien  $G_{ap} = 2G^{\uparrow,\downarrow}$ . Daraus lassen sich dann die Werte für den magnetoresistiven Effekt JMR, bzw. TMR bestimmen.

Eine einfache physikalische Interpretation von (7.5.21) folgt mit der Tatsache, dass  $-(1/\pi)\text{Im}g_L^\sigma(E_F, \mathbf{k}_\parallel)$  und  $-(1/\pi)\text{Im}g_R^\sigma(E_F, \mathbf{k}_\parallel)$  die 1-dimensionale Oberflächen-Zustandsdichte im Kanal  $(\sigma, \mathbf{k}_\parallel)$  für die isolierte linke bzw. rechte Elektrode sind. Der Strom in jedem Kanal  $(\sigma, \mathbf{k}_\parallel)$  ist gegeben durch das Produkt dieser Zustandsdichten, allerdings skaliert mit dem Nenner in (7.5.21). Genauso wie im Modell von Slonczewski beschreibt dieser Nenner die gegenseitige Wechselwirkung der beiden Elektroden als Folge des Überlapps der beiden Wellenfunktionen.

Damit wird auch die Verknüpfung zwischen der linearen Antworttheorie und der klassischen Tunneltheorie klar: Wenn die Vakuumlücke groß ist, gilt  $t_{01} \approx 0$  und der Nenner in (7.5.21) nimmt den Wert 1 an. Damit ist die Gesamtleitfähigkeit wie im Fall der klassischen Tunneltheorie gegeben. Außerdem fällt der Faktor  $t_{01}^2$  (im Zähler) bei der Bildung von TMR bzw. JMR weg. Dies bedeutet, dass in diesem Grenzfall der magnetoresistive Effekt unabhängig von der Größe der Lücke zwischen den beiden Elektroden wird. Zudem ist wie im Jullière-Modell die

<sup>55</sup>P. A. Lee, D. S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **47**, 882 (1981).

<sup>56</sup>T. N. Todorov, Phys. Rev. **B 54**, 5801 (1996).

<sup>57</sup>J. Mathon, Phys. Rev. **B 56**, 11810 (1997).

<sup>58</sup>J. Mathon, Phys. Rev. **B 56**, 11810 (1997).

Tunnelleitfähigkeit nun als Produkt der Zustandsdichten gegeben – allerdings in diesem Fall mit den 1-dimensionalen Zustandsdichten. Das Ergebniss von Jullière (beinhaltet 3-dim Zustandsdichten) folgt hieraus erst wenn, z.B. durch Einführung von Unordnung, die Kohärenz des Tunnelprozesses zerstört wird (was die Erhaltung von  $k_{||}$  bricht).

**(b) Tunneln durch eine Potenzialbarriere:**

In einem etwas realistischeren Modell betrachten wir nun einen Kontakt mit zwei ferromagnetischen Elektroden (immer noch mit single-orbital, tight-binding Bandstruktur), die durch eine *isolierende Barriere* aus  $N$  atomaren Ebenen mit Potential  $V_0$  getrennt sind. Hierbei ist  $V_0$  so gewählt, dass die Fermi-Energie  $E_F$  in der Bandlücke des Isolators liegt. Ein solches Modell erlaubt die Bestimmung der Abhängigkeit des JMR von Barrierenhöhe und -dicke. Zudem können damit Effekte von Unordnung an der F/I-Grenzfläche und von Verunreinigungen in der Barriere berücksichtigt werden.

*(i) Abhängigkeit von Barrierendicke und -höhe:*

Im Grenzfall einer hohen Barriere und für kohärentes Tunneln ( $k_{||}$ -Erhaltung) folgt aus (7.5.20)<sup>59</sup>

$$G^\sigma \approx \frac{4e^2}{h} e^{-2\kappa_0 a N} \sum_{k_{||}} \frac{\text{Im}g_L^\sigma \text{Im}g_R^\sigma}{|1 - (g_L^\sigma + g_R^\sigma)e^{-\kappa_0 a} + g_L^\sigma g_R^\sigma e^{-2\kappa_0 a}|^2} . \quad (7.5.22)$$

Hierbei ist  $\kappa_0$  der Wert des Abkling-Wellenvektors in der Barriere, gemittelt über die 2-dimensionale Brillouin-Zone, und  $a$  ist die Gitterkonstante, d.h.  $Na$  ist die Barrierendicke. Gleichung (7.5.22) gilt im Grenzfall  $\kappa_0 a \gg 1$ , d.h. wenn die Wellenfunktion in der Barriere über eine Distanz von wenigen Gitterkonstanten stark gedämpft wird.

Die Struktur von (7.5.22) ist quasi identisch zu der von (7.5.21). Der multiplikative Faktor  $e^{-2\kappa_0 a N}$  fällt wiederum bei der Bildung des JMR-Verhältnisses weg. Da der Nenner in (7.5.22) im Grenzfall einer hohen Barriere ( $e^{-\kappa_0 a} \ll 1$ ) gegen 1 geht, erreicht das JMR-Verhältnis denselben Sättigungswert wie in (7.5.21) für eine große Lücke ( $t_{01}/t_{bulk} \ll 1$ ).

Aus (7.5.22) folgt also die Unabhängigkeit des JMR von der Barrierenhöhe. Zudem folgt auch die Unabhängigkeit des JMR von der Barrierendicke. Beides trifft nicht mehr zu, wenn die Barriere niedrig ist. Aus (7.5.20) erhalten wir die in Abb.7.32 dargestellte Abhängigkeit des TMR von der normierten Barrierenhöhe  $V_0/W$  ( $W$  ist die Bandbreite des Isolator-Leitungsbandes) bzw. von der Barrierendicke  $N$ . Für diese Berechnungen wurde die Bandstruktur von Co zugrundegelegt. Mit steigender Barrierenhöhe steigt auch der TMR an und geht für große Barrierenhöhen in einen Sättigungswert über. Abb.7.32a zeigt, dass für kleinere Barrierendicken diese Sättigung des TMR schneller erreicht wird. In Abb.7.32b wird deutlich, dass für kleine Barrierenhöhen ein drastischer Abfall des TMR mit steigender Barrierendicke auftritt. Im Fall einer hohen Barriere hingegen ist die Abhängigkeit des TMR von der Barrierendicke nur schwach ausgeprägt. In vielen Experimenten wird nur eine schwache Abhängigkeit des TMR von der Barrierendicke beobachtet. Daraus lässt sich schließen, dass die untersuchten Kontakte im Limes hoher Barrieren liegen.

*(ii) Einfluss von Unordnung:*

<sup>59</sup>J. Mathon, Phys. Rev. **B 56**, 11810 (1997).

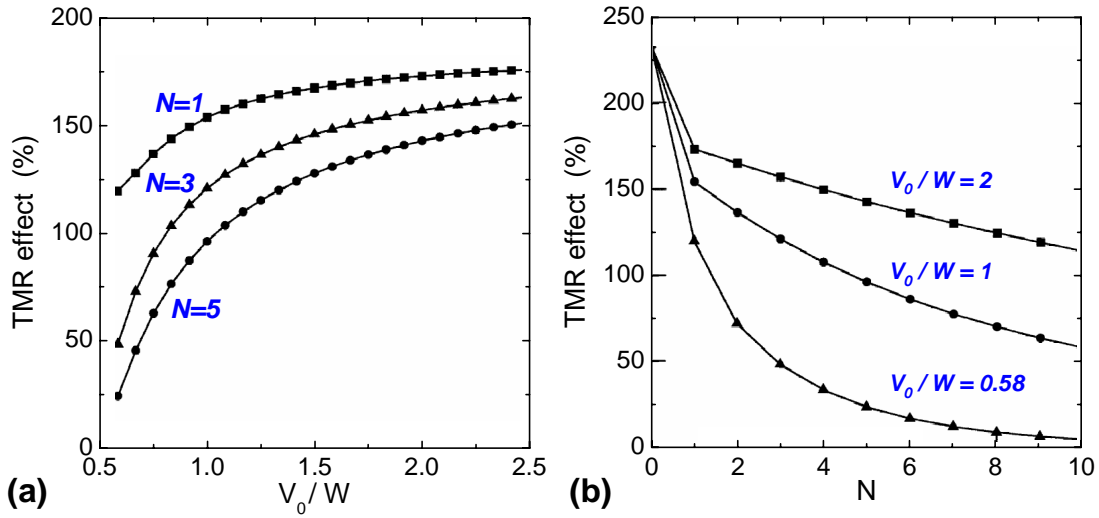


Abbildung 7.32: (a) TMR vs normierte Barrierenhöhe  $V_0/W$  für drei verschiedene Barrierendicken  $N$ ; (b) TMR vs Barrierendicke  $N$  für drei verschiedene Barrierenhöhen  $V_0/W$  (nach J. S. Moodera, G. Mathon, J. Magn. Magn. Mat. 200, 248 (1999)).

Bislang wurden in den theoretischen Betrachtungen nur kohärente Tunnelprozesse (Erhaltung von  $\mathbf{k}_{\parallel}$ ) betrachtet. Diese Annahme ist jedoch für reale Tunnelbarrieren (z.B. für die typischerweise durch die Oxidation von Al hergestellten  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Barrieren) wohl kaum zutreffend.

Wenn die Barriere hoch ist, kann davon ausgegangen werden, dass selbst bei nur geringer Unordnung die Kohärenz beim Tunnelprozess verloren geht, da der Überlapp der Wellenfunktionen der beiden Elektroden vernachlässigbar wird. In diesem Fall würde die Tunnelwahrscheinlichkeit für einen Zustand  $\mathbf{k}_{\parallel}$  in Elektrode (1) unabhängig vom Endzustand  $\mathbf{k}'_{\parallel}$  in Elektrode (2) werden. Die 1-dimensionalen Zustandsdichten  $g_L^{\sigma}(E_F, \mathbf{k}_{\parallel})$  und  $g_R^{\sigma}(E_F, \mathbf{k}_{\parallel})$  entkoppeln damit und aus (7.5.22) folgt damit, dass die Leitfähigkeit proportional zum Produkt der Summe über die 1-dimensionalen Zustandsdichten wird

$$G^{\sigma} \propto \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \text{Im} g_L^{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel}) \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel}} \text{Im} g_R^{\sigma}(\mathbf{k}'_{\parallel}) . \quad (7.5.23)$$

Da  $-(1/\pi) \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \text{Im} g^{\sigma}(\mathbf{k}_{\parallel})$  gerade die 3-dimensionale Zustandsdichte  $N^{\sigma}$  ist, liefert (7.5.23) gerade das Ergebnis von Jullière.

Dem einfachen Argument, das zu (7.5.23) führt, stehen aber mindestens zwei Argumente entgegen:

- Eine einfache Faktorisierung in ein Produkt von Zustandsdichten ist nur dann möglich, wenn die Matrixelemente, welche die beiden Elektroden verknüpfen, unabhängig von  $\mathbf{k}_{\parallel}$  sind (hohe Barriere in (7.5.22) bzw. große Lücke in Gl.(7.5.21)). Für eine realistische Multi-Orbital Bandstruktur trifft diese Annahme wohl kaum zu. Eine effektive Faktorisierung könnte zwar auch für realistische Bandstrukturen immer noch möglich sein. Allerdings wird davon ausgegangen, dass dies nicht mit den einfachen Zustandsdichten der beiden Elektroden geht, sondern dass hierbei eine gewichtete Mittelung über Tunnelmatrixelemente eingeht. Damit würde die Tunnelleitfähigkeit eine Mischung der Elektroden- und der Barriereneigenschaften reflektieren.

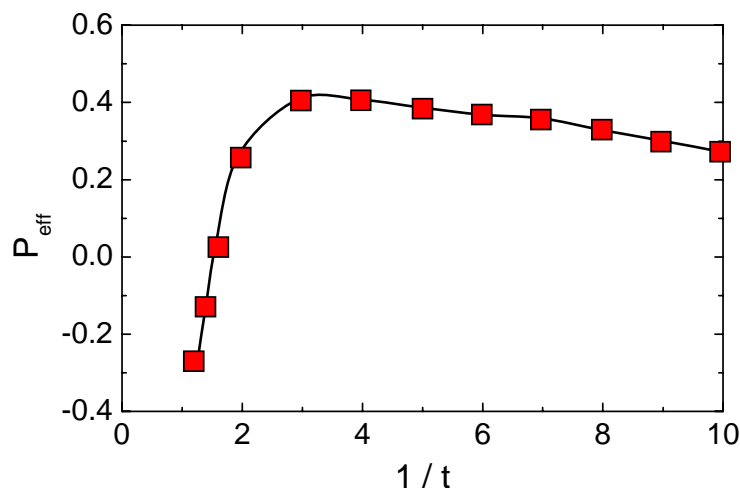


Abbildung 7.33: Abhängigkeit der effektiven Spinpolarisation  $P$  von dem reziproken Hüpfintegral ( $t \equiv t_{01}/t_{bulk}$ ) berechnet für Vakuumtunneln zwischen Co-Elektroden (nach J. S. Moodera, G. Mathon, J. Magn. Magn. Mat. 200, 248 (1999)).

- Die Berücksichtigung von Unordnung beim Tunnelprozess führt nicht nur zu einer Mischung der  $\mathbf{k}_{||}$ -Kanäle, sondern auch zu resonantem Tunneln über lokalisierte elektronische Zustände. Diese bilden sich in der Barriere aufgrund von Verunreinigungen oder Defekten. Resonantes Tunneln führt zu quasi-eindimensionalen Kanälen mit hoher Leitfähigkeit. Diese dominieren das Tunneln, wenn die Unordnung groß und die Barriere dick ist. Damit folgt, dass die Spinpolarisierung des Tunnelstroms nicht nur eine intrinsische Eigenschaft der ferromagnetischen Elektroden widerspiegelt, sondern auch von der Art und dem Grad der Unordnung in der Tunnelbarriere bestimmt wird.

(iii) Einfluss der Bandstruktur der Elektroden:

Das Modell von Jullière und die lineare Antworttheorie auf der Basis von Ein-Band-Modellen liefern zwar nützliche Einsichten. Allerdings ist damit keine Vorhersage der absoluten Größe und des Vorzeichens des JMR möglich. Das entscheidende Problem hierbei liegt in der **multiorbitalen Bandstruktur** der verwendeten ferromagnetischen Elektroden. Hierbei ist wichtig, sich klar zu machen, dass die Leitungselektronen und nicht die  $d$ -Elektronen in ferromagnetischen Übergangsmetallen tunneln. Da die effektive Masse  $m^*$  von  $s$ -Elektronen wesentlich kleiner ist als die von  $d$ -Elektronen, wird der Tunnelstrom wegen  $J \propto \exp(-2\kappa d)$  und  $\kappa \propto \sqrt{m^*}$  von den  $s$ -Elektronen dominiert. Wir müssen deshalb nicht die gesamte Zustandsdichte, die von  $d$ -Elektronen dominiert wird, betrachten, sondern nur diejenigen Teile der Fermi-Fläche, die  $s$ -Charakter besitzen. Zur Klärung des Einflusses der Bandstruktur wurden numerische Analysen der Kubo-Formel durchgeführt, wobei realistische Näherungen für die Bandstruktur von Ferromagneten verwendet wurden. Es wurde insbesondere das Tunneln zwischen Co-Elektroden über eine Vakuumlücke,<sup>60</sup> das Tunneln zwischen Fe-Elektroden über eine rechteckförmige Barriere<sup>61</sup> und das Tunneln zwischen Fe bzw. Co in ein  $s$ -Band über eine Tunnelbarriere, die durch zwei  $s$ -Bänder getrennt durch eine Bandlücke moduliert wurde.<sup>62</sup>

Abb.7.33 zeigt das Ergebnis für Vakuumtunneln zwischen Co-Elektroden. Hierbei ist die mit  $P_{\text{eff}} = (G^\uparrow - G^\downarrow)/(G^\uparrow + G^\downarrow)$  berechnete Spinpolarisation gegen die Breite der Vakuumlücke

<sup>60</sup>J. Mathon, Phys. Rev. B 56, 11810 (1997).

<sup>61</sup>J. M. MacLaren, X.-G. Zhang, W. H. Butler, Phys. Rev. B56, 11827 (1997).

<sup>62</sup>Yu. E. Tsybal, D. G. Pettifor, J. Phys. Condens. Matter 9, L 411 (1997).

aufgetragen. Die Breite der Lücke ist dabei durch das reziproke Hüpfintegral  $1/t$  (mit  $t \equiv t_{01}/t_{bulk}$ ) charakterisiert. Ein kleiner Wert von  $1/t$  entspricht also einem großen  $t$  und damit einer kleinen Vakuumücke (verschwindende Lücke im Grenzfall  $1/t \rightarrow 1$ ).

Für eine kleine Vakuumücke von der Größenordnung der Gitterkonstanten ( $1/t \approx 1$ ) ist die Leitfähigkeit durch die  $d$ -Elektronen dominiert. Dies resultiert in einer negativen Polarisation  $P < 0$ . Dieser Fall wird auch mit der klassischen Tunneltheorie basierend auf der Betrachtung der Zustandsdichte beschrieben, der ja im Vergleich zu den Experimenten das falsche Vorzeichen von  $P$  liefert. Mit zunehmender Dicke der Vakuumücke findet jedoch ein rascher Übergang zu  $P > 0$  statt. Im Tunnellimit ( $1/t \gg 1$ ) ist die berechnete Polarisation von 30-40% in guter Übereinstimmung mit dem in Tabelle 7.1 angegebenen Wert ( $P = 42\%$ ). Der Übergang von negativen zu positiven Werten für  $P$  kann damit erklärt werden, dass der Überlapp der  $d$ -Orbitale mit zunehmender Dicke der Vakuumücke aufgrund der größeren effektiven Masse wesentlich schneller abfällt als der Überlapp der  $s$ -Orbitale.

Alternative Berechnungen zum Tunneln von einer Co- oder Fe-Elektrode in ein  $s$ -Band liefern ein ähnliches Ergebnis, falls nur eine  $sp$ -Bindung an der F/I-Grenzfläche berücksichtigt wird. Die berechneten Polarisationen von  $P_{Fe} \approx 45\%$  und  $P_{Co} \approx 35\%$  stimmen gut mit experimentell beobachteten Werten überein. Daraus können wir z.B. folgern, dass wohl nur eine schwache  $sd$ -Kopplung an der F/ $Al_2O_3$ -Grenzfläche vorliegt.

Die Berechnung der Tunnelleitfähigkeit zwischen zwei Fe-Elektroden, die durch eine rechteckförmige Barriere getrennt sind, ergibt auch das richtige Vorzeichen für  $P$ . Die berechneten Werte sind aber höher als die experimentell beobachteten.

## 7.6 Experimente zu FM/I/FM-Tunnelkontakten

Jullière untersuchte bereits 1975 Fe/Ge/Co-Kontakte mit einer Dicke der Ge-Barriere von ca. 10-15 nm.<sup>63</sup> Die  $G(U)$ -Messungen lieferten eine Barrierenhöhe von ca. 100 meV. Die Messung des Tunnelmagnetowiderstands ist in Abb. 7.34 gezeigt. Diese lieferte JMR = 14% bei  $T = 4.2$  K und  $U \simeq 0$  V. Aus der Polarisation  $P_{\text{Co}} = 42\%$  und  $P_{\text{Fe}} = 44\%$  erwartete man nach (7.5.12) einen Wert von 31%. Abb. 7.34 zeigt ferner, dass mit steigender Spannung der JMR bei  $U > 6$  mV verschwindet, was mit Spinstreuung an magnetischen Momenten an den F/I-Grenzflächen bzw. in der Barriere interpretiert wurde.

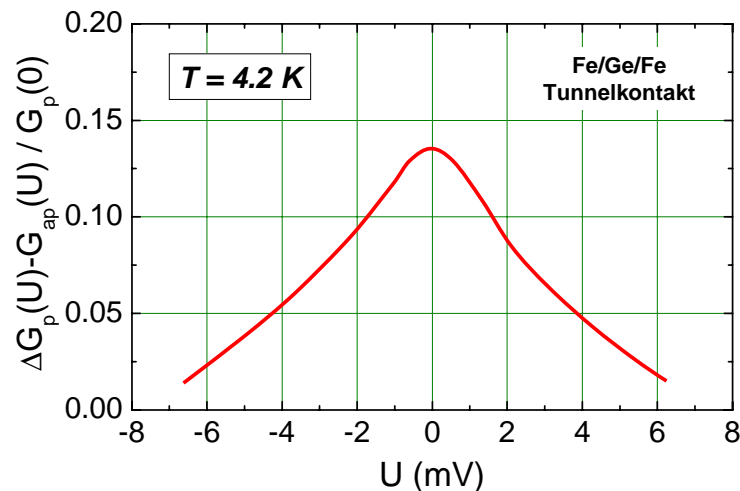


Abbildung 7.34: Relative Leitfähigkeitsänderung  $[G_p(U) - G_{ap}(U)]/G_p(U) = \Delta G(U)/G_p(U = 0)$  eines Fe/Ge/Co-Kontakts bei  $T = 4.2$  K (nach M. Jullière, Phys. Lett. **54A**, 225 (1975)).

In späteren Experimenten konnten Jullière's Ergebnisse sehr lange nicht reproduziert werden. So ergaben Untersuchungen an Fe/Ge (amorph)/Co-Kontakten  $\Delta G/G_p < 0.1\%$ . Insgesamt scheint in Kontakten mit Barrieren aus amorphem Si oder Ge Spin-Streuung beim Tunnelprozess vorzuliegen, was zu einem verschwindenden TMR-Effekt führt. Messungen mit NiO-Barrieren – wobei eine Elektrode aus Ni und die Gegenelektrode aus Fe, Co oder Ni war – lieferten ebenfalls nur kleine TMR-Effekte mit dem größten Wert  $\Delta G/G_p \approx 2\%$  bei 4.2 K.<sup>64</sup> Für NiO-Barrieren wird angenommen, dass inelastische Spin-Streuung eine wichtige Rolle spielt. Diese Annahme geht insbesondere auf die Beobachtung einer verschwindenden Spinpolarisation im System Ni/NiO/Al-Kontakten zurück. In diesem Zusammenhang wurde vermutet, dass insbesondere scheinbar gemessene TMR-Effekte in Tunnelkontakten mit relativ kleinen Widerständen ( $< 1\text{k}\Omega$ ) auf magneto-resistive Effekte in den Zuleitungen – also nicht auf einen Tunneleffekt – zurückzuführen sind. Insgesamt war die experimentelle Situation bis etwa 1995 sehr unbefriedigend, da in verschiedenen Experimenten mit NiO, CoO, GdO<sub>x</sub> und Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Barrieren maximale Effekte von nur 7% bei 4.2 K und 2% bei Raumtemperatur beobachtet werden konnten.

Die grundlegenden Probleme dafür, dass mit Hilfe von Tunneln zwischen ferromagnetischen Elektroden bis 1995 keine großen TMR-Effekte bei Raumtemperatur erzielt werden konnten, hängen mit folgenden Tatsachen zusammen:

- Rauigkeiten der ferromagnetischen Elektroden,

<sup>63</sup>M. Jullière, Phys. Lett. **54A**, 225 (1975).

<sup>64</sup>S. Maekawa et al., IEEE Trans Magn. **MAG-18**, 707 (1982).

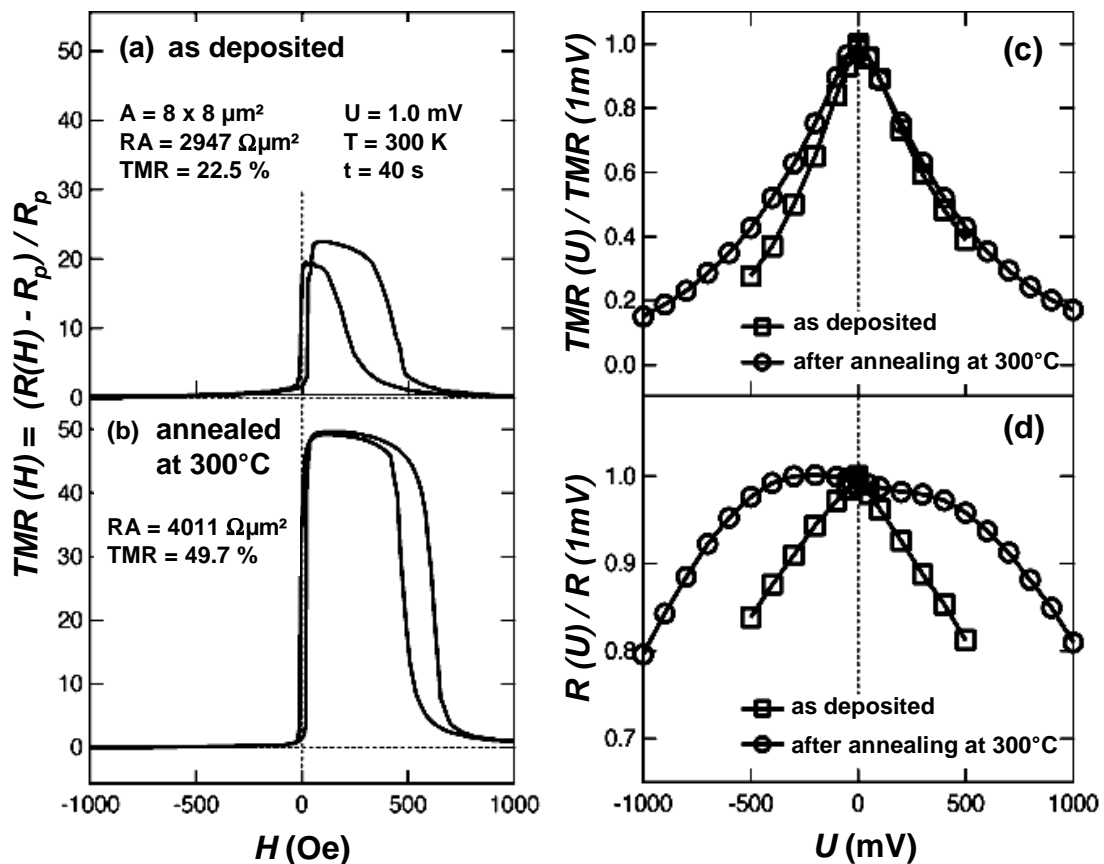


Abbildung 7.35: Magnetwiderstand  $[R(H) - R_p]/R_p$  gegen angelegtes Feld für einen Ta(5nm)/ Ni<sub>79</sub>Fe<sub>21</sub>(3nm)/Cu(30nm)/Ni<sub>79</sub>Fe<sub>21</sub>(3nm)/ Ir<sub>22</sub>Mn<sub>78</sub>(10nm)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0.8nm)/ Co<sub>75</sub>Fe<sub>25</sub>(4nm)/ Ni<sub>79</sub>Fe<sub>21</sub>(20nm)/Ta(5nm) Tunnelkontakt mit Exchange Bias Schichtstruktur. (a) zeigt die Daten nach der Herstellung, (b) nach einem einstündigen Ausheilprozess bei 300°C. Die rechten Bilder zeigen die Spannungsabhängigkeit des normierten Magnetwiderstands und des normierten Tunnelwiderstands (aus X. F. Han et al., Jap. J. Appl. Phys. 39, L439 (2000)).

- fehlerhafte Tunnelbarrieren,
- unzureichende Grenzflächenqualität und
- Beschaffenheit und Domänenstruktur der ferromagnetische Elektroden.

Durch Lösung dieser Probleme wurden erstmals 1995 große TMR-Werte (größer 10%) bei Raumtemperatur von **Moodera** und Mitarbeitern erzielt.<sup>65</sup> Diese Arbeit hat großes Interesse an ferromagnetischen Tunnelkontakten geweckt und eine Vielzahl von Forschungsarbeiten initiiert. Diese Arbeiten zielten (und zielen) vor allem auf die in den folgenden Abschnitten näher diskutierten Fragestellungen zum Einfluss der Barriereneigenschaften, der Spannungs- und Temperaturabhängigkeit des JMR oder zum Einfluss einer Dotierung der Barriere oder zum Effekt von nicht-magnetischen Zwischenschichten ab.

Heute werden (siehe hierzu Abb. 7.35) Rekordwerte von über 50% bei 300 K und 70% bei 4.2 K für den TMR-Effekt erzielt. Bestimmen wir aus dem für Co<sub>75</sub>Fe<sub>25</sub> Tunnelkontakte bei 4.2 K gemessenen TMR-Wert von 70%<sup>66</sup> mit Hilfe des Jullière Modells den Wert für die Spinpolarisation, so stimmt der erhaltene Wert gut mit dem für Co<sub>75</sub>Fe<sub>25</sub> erwarteten Wert überein.

<sup>65</sup>J. S. Moodera et al., Phys. Rev. Lett. 74, 3273 (1995).

<sup>66</sup>X. F. Han et al., Jap. J. Appl. Phys. 39, L439 (2000).



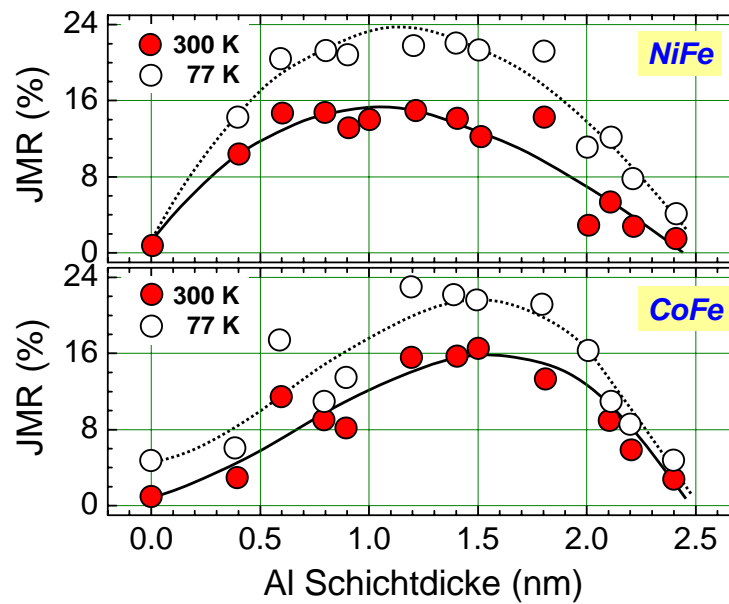


Abbildung 7.36: JMR in Abhängigkeit von der Dicke der Al-Schicht für die Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Barriere bei 77 und 300 K. Unten: Co/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ni<sub>20</sub>Fe<sub>80</sub> Kontakte. Oben: Co/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Co<sub>50</sub>Fe<sub>50</sub> Kontakte (Daten aus J. S. Moodera et al., Appl. Phys. Lett. 70, 3050 (1997)).

### 7.6.1 Untersuchung und Verbesserung der Barriereneigenschaften

Bis heute wurden mehrere Materialsysteme für Tunnelbarrieren untersucht, wobei Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO, AlN und HfO erfolgreich verwendet wurden. Andere Barrierenmaterialien haben sich als magnetisch herausgestellt oder waren nicht-stöchiometrisch. Die bisherigen Experimente zeigen, dass Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> die wohl am besten geeignete Tunnelbarriere darstellt. Dies liegt daran, dass man bei der Herstellung des Tunnelkontaktes zunächst eine dünne Al-Schicht auf die Basiselektrode aufbringen kann, wobei Al fast alle Übergangsmetalle gut benetzt und somit zu einer gleichmäßig dicken Schicht führt. Die Al-Schicht kann dann anschließend oxidiert werden. Dieser Prozess erfordert aber eine sehr genaue Einstellung der Al-Schichtdicke (bzw. der Oxidationsdauer). Zu dünne Al-Schichten führen zu einer Oxidation der Basiselektrode, was häufig zu Spin-Flip Streuern führt, zu dicke führen zu einer metallischen Al-Zwischenschicht, die zu einer Reduktion der Spinpolarisation führt. In beiden Fällen resultiert also eine starke Reduzierung des TMR. Deshalb wurde die optimale Al-Schichtdicke für die Tunnelbarriere intensiv untersucht (siehe hierzu Abb. 7.36). Im Allgemeinen wurde eine optimale Al-Schichtdicke im Bereich von 7 bis 18 Å gefunden, wobei die optimale Schichtdicke von der ferromagnetischen Elektrode und dem verwendeten Oxidationsprozess abhängt.

Um die Barrierenhöhe und Dicke zu bestimmen, wurden meist die gemessenen  $G(U)$  Kurven mit den entsprechenden Vorhersagen der Tunneltheorie gefittet (z.B. mit Gl.(7.1.41) oder Gl.(7.1.46)). Die abgeleitete Barrierendicke stimmte bei Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Barrieren meist gut mit der Dicke überein, die entsprechend der aufgetragenen Dicke der Al-Schicht erwartet wurde. Für die mittlere Barrierenhöhe ergaben sich meist Werte oberhalb von 2,5 eV.<sup>67</sup> Bei der Verwendung von Ni oder NiFe Elektroden wirkt sich allerdings auch die Bandstruktur auf die gemessenen  $G(U)$  Kurven aus. Die bestimmten Barrierenhöhen stellen in diesem Fall nur grobe Schätzwerte dar. Ferner ist hier anzumerken, dass Mikrokurzschlüsse in der Barriere zu einem zusätzlichen, nicht tunnelartigen Transportkanal führen. Die in diesem Fall aus den  $G(U)$  Kurven mit Hilfe

<sup>67</sup>J. S. Moodera, Phys. Rev. Lett. 80, 2941 (1998)

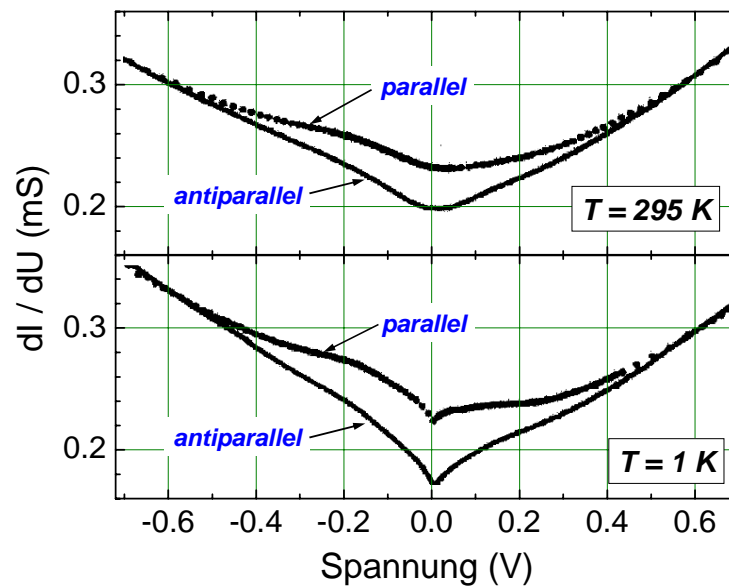


Abbildung 7.37: Differentielle Leitfähigkeit gegen Spannung bei 295 K und 1 K für einen  $\text{Co}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}_{20}\text{Fe}_{80}$  Tunnelkontakt für parallele und antiparallele Magnetisierungsausrichtung (nach J. S. Moodera et al., Phys. Rev. Lett. 80, 2941 (1998)).

von Tunneltheorien bestimmten Barrierenhöhen sind üblicherweise viel zu gering. Dies resultiert einfach aus der Nichtanwendbarkeit der Tunneltheorie.

Mehrere Experimente haben auch gezeigt (siehe z.B. Abb. 7.35), dass die Kontakteigenschaften wesentlich durch einen Ausheilprozess bei Temperaturen im Bereich von einigen  $100^\circ\text{C}$  verbessert werden können. Dies wird mit einer Homogenisierung der Barriere (dies hat vor allem eine Rutherford-Rückstreuunganalyse der Sauerstoffverteilung ergeben) und einer Verbesserung der magnetischen Eigenschaften der ferromagnetischen Elektroden an den Grenzflächen erklärt. Andere Faktoren wie eine Reduzierung der Defektdichte in der Tunnelbarriere oder das Erzielen eines schärferen Übergangs zwischen Barriere und Tunnelelektroden können aber auch eine Rolle spielen. So wird nach dem Ausheilprozess z.B. häufig eine höhere effektive Barrierenhöhe gemessen.

## 7.6.2 Temperatur- und Spannungsabhängigkeit des JMR

Bei der Charakterisierung von ferromagnetischen Tunnelkontakten wird immer eine mehr oder weniger stark ausgeprägte Reduktion des JMR mit zunehmender Spannung und Temperatur festgestellt. Die starke Abnahme des JMR mit zunehmender Spannung wurde bereits in den ersten Experimenten von Jullière beobachtet (siehe hierzu Abb. 7.34). Die Spannungs- und Temperaturabhängigkeit des JMR, die für Anwendungen, bei denen mit relativ hohen Spannungspegeln und bei Raumtemperatur gearbeitet werden soll, extrem störend ist, ist leider bis heute noch nicht ausreichend verstanden.

Um die Spannungsabhängigkeit des JMR zu verstehen, müssen zunächst die Strom-Spannungs-Charakteristiken (IVCs) der Tunnelemente verstanden werden. Die experimentelle Analyse der  $G(U)$  Abhängigkeiten von ferromagnetischen Tunnelkontakten hat gezeigt, dass die gemessenen Kurven stark von denjenigen von Kontakten mit nicht-magnetischen Elektroden (z.B.  $\text{Al}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Au}$ ) abweichen. Ein typisches Beispiel ist in Abb. 7.37 gezeigt. Die leichte Asymmetrie resultiert wahrscheinlich aus den unterschiedlichen Elektrodenmaterialien. Auffallend ist die sich bei tiefen Temperaturen ausbildende scharfe Struktur um  $U = 0$ .

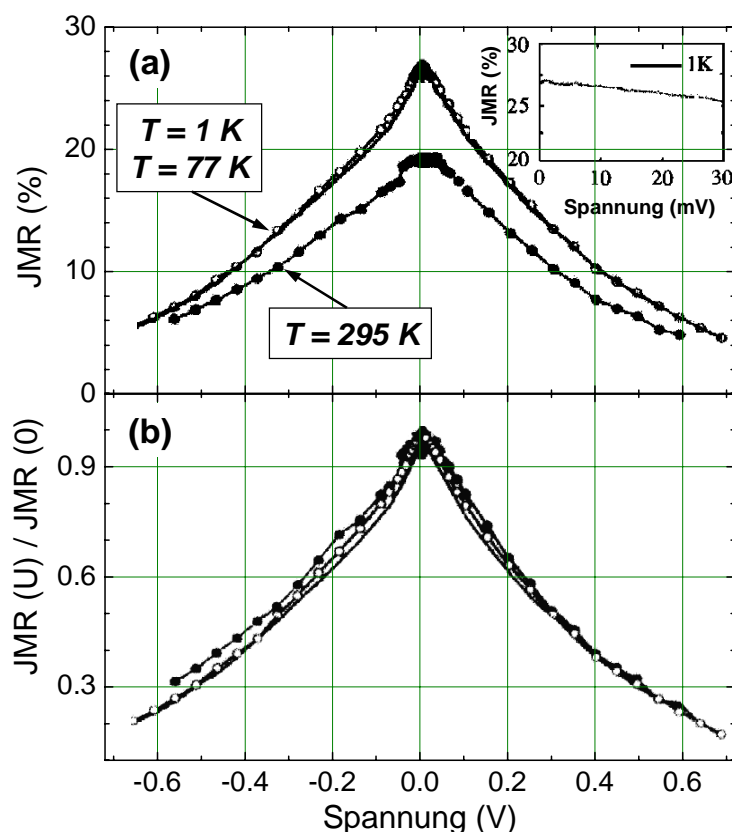


Abbildung 7.38: JMR als Funktion der Spannung bei drei Temperaturen für einen Fe/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Fe Tunnelkontakt. In (b) sind die JMR-Werte auf den Wert bei  $U = 0$  normiert. Das Inset zeigt den JMR bei kleinen Spannungen (nach J. S. Moodera, G. Mathon, J. Magn. Magn. Mat. 200, 248 (1999)).

Diese so genannte *Zero Bias Anomaly (ZBA)* erinnert stark an die Anomalien, die man aufgrund von magnetischen Verunreinigungen in Tunnelbarrieren erhält.<sup>68</sup> Insgesamt beeinflusst das Vorhandensein von metallischen Bereichen zwischen Barriere und ferromagnetischen Elektroden (unoxidiertes Aluminium), die Anregung von Magnonen in den ferromagnetischen Elektroden, das Tunneln über lokalisierte Defektzustände in der Barriere, magnetische Verunreinigungen an den Grenzflächen etc. die gemessenen  $G(U)$  Kennlinien mehr oder weniger stark, so dass eine eindeutige Interpretation der einzelnen Strukturen in den  $G(U)$  Kennlinien in den meisten Fällen nicht möglich ist. Eine nähere Diskussion der Effekte, die mit inelastischen Prozessen zusammenhängen, folgt in Abschnitt 7.7.

Eine sehr interessante Beobachtung ist, dass eine Reduktion des JMR mit zunehmender Spannung für alle Tunnelkontakte unabhängig von ihrer Qualität (Qualität steht hier für die Größe des JMR) vorhanden ist. Ferner ist die Reduktion unabhängig von der Temperatur. Dies erkennt man, wenn man die  $\text{JMR}(U)$ -Werte auf  $\text{JMR}(U = 0)$  normiert, wie es in Abb. 7.38 getan ist. Die Stärke der Reduktion ist abhängig von der Qualität der Tunnelbarriere und der Grenzflächen. So wurde festgestellt, dass Tunnelkontakte mit niedrigen mittleren Barrierenhöhen eine starke Reduktion zeigen. Ferner zeigten Kontakte, bei denen eine Dotierung der Barriere vorgenommen wurde, eine starke Reduktion. Dies deutet darauf hin, dass die starke Reduktion mit einem Mehrstufentunneln über Defektzustände in der Barriere verbunden ist. Eine genaue Diskussion dazu folgt ebenfalls in Abschnitt 7.7.

Betrachtet wir die Temperaturabhängigkeit der gemessenen JMR-Werte von ferromagnetischen

<sup>68</sup>J. Appelbaum, Phys. Rev. 154, 633 (1967)

Tunnelkontakten auf der Basis von Übergangsmetallen, so können wir festhalten, dass in hochwertigen Tunnelkontakten bei tiefen Temperaturen (4.2 K) JMR-Werte erhalten wurden, die den vom Jullière Modell vorhergesagten Werten sehr nahe kommen. Allerdings wurde selbst in den besten Kontakten eine signifikante Abnahme des JMR mit steigender Temperatur gemessen. Neben dem JMR zeigte auch der Tunnelwiderstand eine Abnahme mit zunehmender Temperatur. Eine solche Abnahme wird allerdings häufig auch in Tunnelkontakten mit nicht-magnetischen Elektroden beobachtet.

Um die Temperaturabhängigkeit phänomenologisch zu erklären, wurde das Jullière Modell erweitert. Zusätzlich zum elastischen Tunneln (zwei elastische Tunnelkanäle für die Spin  $\uparrow$  und die Spin  $\downarrow$  Elektronen) wurde ein weiterer Tunnelkanal angenommen, dessen Tunnelleitfähigkeit  $G_{\text{SI}}$  unabhängig von der Spinpolarisation sein sollte. Das **Zwei-Kanal Jullière Modell** wurde also zu einem **Drei-Kanal Jullière Modell** mit einem spinunabhängigen Kanal weiterentwickelt. Die Gesamtleitfähigkeit ergibt sich in diesem Modell zu

$$G(\theta) = G_{\text{el}}(1 + P_1 P_2 \cos \theta) + G_{\text{SI}}, \quad (7.6.1)$$

wobei  $\theta$  der Winkel zwischen den Magnetisierungsrichtungen in den beiden Tunnelelektroden ist ( $\theta = 0^\circ$  für parallel und  $\theta = 180^\circ$  für anti-parallele Orientierung).  $G_{\text{el}}$  ist die Tunnelleitfähigkeit im elastischen Kanal, die nur eine sehr geringe Temperaturabhängigkeit im Prozentbereich aufgrund der thermischen Verschmierung der Fermi-Funktion zeigt.<sup>69</sup> Für den elastischen Beitrag für parallel und antiparallele Magnetisierungsausrichtung gilt  $G_{\text{el}}^{\text{p}} = G_{\text{el}}(1 + P_1 P_2)$  und  $G_{\text{el}}^{\text{ap}} = G_{\text{el}}(1 - P_1 P_2)$ . Damit erhalten wir den JMR zu

$$\text{JMR} = \frac{2P_1 P_2}{(1 + P_1 P_2)} \frac{G_{\text{el}}^{\text{ap}}}{G_{\text{el}}^{\text{ap}} + G_{\text{SI}}}. \quad (7.6.2)$$

Ebenso ergibt sich für den TMR

$$\text{TMR} = \frac{2P_1 P_2}{(1 - P_1 P_2)} \frac{G_{\text{el}}^{\text{ap}}}{G_{\text{el}}^{\text{ap}} + G_{\text{SI}}}. \quad (7.6.3)$$

Wir sehen, dass wir für  $G_{\text{SI}} = 0$  den bekannten Jullière Ausdruck erhalten (vergleiche (7.5.12) und (7.5.13)), dass sich aber bei einer endlichen Leitfähigkeit im spinunabhängigen Kanal eine Reduktion des JMR bzw. TMR unter den Jullière Wert ergibt.

Die Temperaturabhängigkeit des JMR-Wertes kann sich im Rahmen dieses phänomenologischen Modells aus zwei Effekten ergeben, erstens aus einer Temperaturabhängigkeit der Spinpolarisation und zweitens aus einer Temperaturabhängigkeit von  $G_{\text{SI}}$ . Für Übergangsmetalllegierungen wurde z.B. beobachtet, dass die Spinpolarisation proportional zur Magnetisierung  $M$  ist.<sup>70</sup> Da  $M(T)$  gut durch die thermische Anregung von Spinwellen beschrieben wird, erwarten wir genügend weit unterhalb von  $T_C$ , dass  $M(T) \propto (1 - aT^{3/2})$  und somit  $P(T) = P_0(1 - \alpha T^{3/2})$ . In Abb. 7.39 ist die Temperaturabhängigkeit von  $\Delta G(T)/\Delta G(77 \text{ K})$  für zwei ferromagnetische Tunnelkontakte gezeigt. Wir sehen, dass  $\Delta G$  um fast 30% bei einer Erhöhung der Temperatur von 77 auf 400 K abnimmt, was auf eine signifikante Reduktion der Spinpolarisation schließen lässt, und sich gut mit einem theoretischen Modell basierend auf thermischer Spinwellenanregung beschreiben

<sup>69</sup>R. Stratton, J. Phys. Chem. Solids **23**, 1177 (1962).

<sup>70</sup>R. Meservey *et al.*, Phys. Rev. Lett. **37**, 858 (1976).

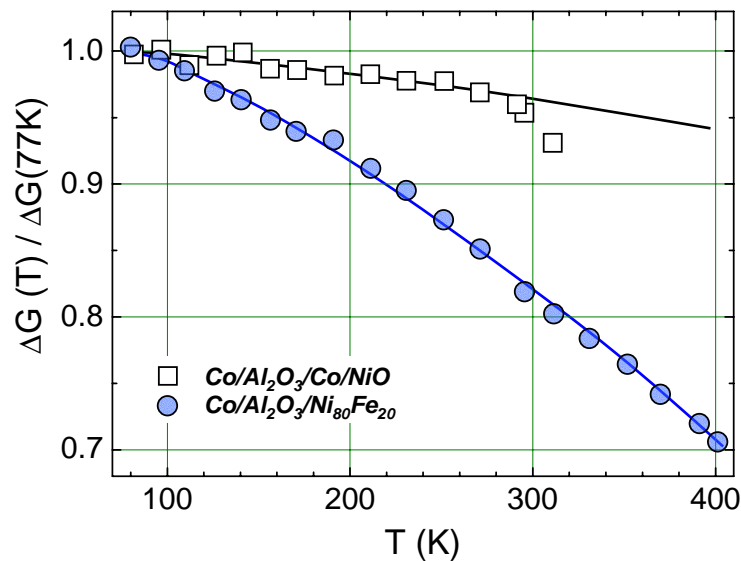


Abbildung 7.39: Temperaturabhängigkeit von  $\Delta G(T)/\Delta G(77K)$  für zwei ferromagnetische Tunnelkontakte. Die Linien zeigen theoretische Fits, die auf der thermischen Anregung von Spinwellen basieren (nach C. H. Shang, J. Nowak, R. Jansen, J. S. Moodera, Phys. Rev. B 58, R2917 (1998)).

lässt. Wir erkennen außerdem, dass für den Co/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Co Kontakt die Reduktion kleiner ist als für den Co/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ni<sub>20</sub>Fe<sub>80</sub> Kontakt. Dies kann durch die niedrigere Curie Temperatur von Ni<sub>20</sub>Fe<sub>80</sub> erklärt werden. Die materialabhängige Konstante  $\alpha$  ist aufgrund einer Schwächung der Austauschkopplung an Oberflächen meist für Oberflächen wesentlich größer als für das Massivmaterial. Es wurde außerdem beobachtet, dass  $P_0$  und  $\alpha$  empfindlich von Oberflächenverunreinigungen abhängen. Verunreinigungen resultieren anscheinend in einer Vergrößerung von  $\alpha$  und damit in einem schnelleren Abfall von  $P$  mit zunehmender Temperatur. Um einen eindeutigen Zusammenhang zwischen  $P(T)$  und der Oberflächenbeschaffenheit der ferromagnetischen Tunnelelektroden zu erhalten, sollten zuverlässige Informationen über die magnetischen Oberflächeneigenschaften vorhanden sein. Dies ist zur Zeit leider nicht der Fall.

Neben der Temperaturabhängigkeit der Polarisation kann auch eine Temperaturabhängigkeit der Tunnelleitfähigkeit des spinunabhängigen Kanals zu einer Temperaturabhängigkeit des JMR führen. Viele Experimente haben gezeigt, dass  $G_{SI}$  meist viel schneller mit zunehmender Temperatur anwächst als  $G_{el}$ . Dies können wir verstehen, wenn wir annehmen, dass  $G_{SI}$  zu einem überwiegenden Anteil durch inelastische Tunnelprozesse bestimmt wird. Es ist bekannt, dass inelastische Tunnelprozesse mit zunehmender Temperatur wahrscheinlicher werden (siehe Abschnitt 7.7) und es ist intuitiv ebenfalls klar, dass bei einem inelastischen Tunnelprozess die Spininformation verloren gehen kann. Inelastische Tunnelprozesse spielen vor allem für "schlechte" Tunnelbarrieren eine große Rolle, die eine hohe Dichte von lokalisierten Defektzuständen besitzen. Der Transport kann dann durch inelastisches Mehrstufentunneln über lokalisierte Zustände dominiert werden. Ein theoretisches Modell zur Beschreibung dieser Tunnelprozesse wird in Abschnitt 7.7 vorgestellt.

### 7.6.3 Vertiefungsthema: Dotierung der Tunnelbarriere

In einigen Experimenten wurden verschiedene Verunreinigungen in die Tunnelbarriere eingebracht, um gezielt Spin-Flip-Streuung zu untersuchen. Es ist hierbei vor allem die Streuung

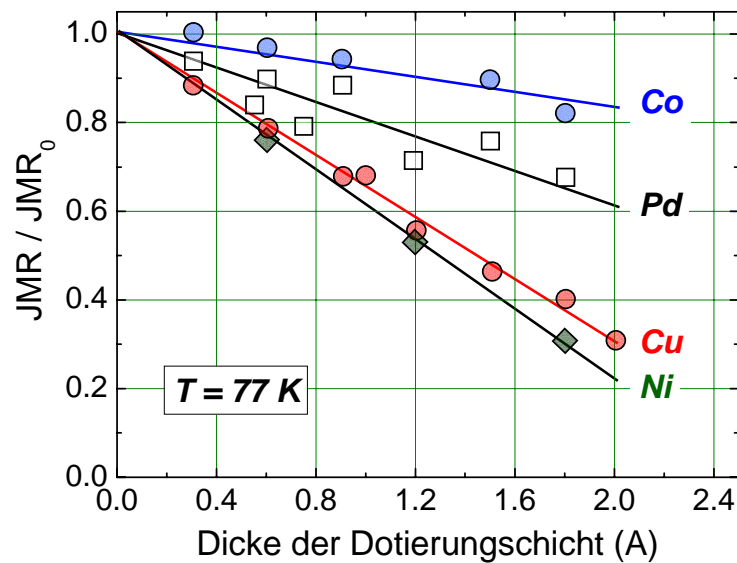


Abbildung 7.40: Normalisierte JMR-Werte von Co/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ni<sub>20</sub>Fe<sub>80</sub> Tunnelkontakten als Funktion der in die Tunnelbarriere eingebrachten Dotierungsschicht. Die Linien zeigen lineare Fits der Daten (Daten aus R. Jansen, J. S. Moodera, J. Appl. Phys. 83, 6682 (1998)).

bei der Fermi-Energie wichtig, da die tunnelnden Elektronen meist aus Zuständen nahe der Fermi-Energie kommen. Experimentell wurden vor allem Co/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Ni<sub>20</sub>Fe<sub>80</sub> Kontakte untersucht, wobei geringe Mengen (sub-monoatomare Schichten) von verschiedenen Dopanden in die Mitte der Tunnelbarriere eingebracht wurden.<sup>71</sup>

Falls ein Spin-Flip Prozess beim Tunneln geschieht, muss ein Spin ↑ aus Elektrode 1 einen leeren Spin ↓ Platz in Elektrode 2 finden. Das heißt, wenn alle Elektronen beim Tunneln ihre Spinrichtung ändern, erhalten wir eine höhere Tunnelstromdichte, wenn die beiden Elektroden eine anti-parallele Magnetisierungsorientierung besitzen. Wir erhalten dann einen *inversen JMR-Effekt*. Bezeichnen wir den Anteil der spin-geflippten Elektronen mit  $s$ , so erhalten wir die Leitfähigkeit  $(1 - s)G_p + sG_{ap}$  für parallele und  $sG_p + (1 - s)G_{ap}$  für die anti-parallele Orientierung. Damit ergibt sich für den JMR

$$\text{JMR} = \frac{(1 - 2s)\text{JMR}_0}{1 - s\text{JMR}_0}, \quad (7.6.4)$$

bzw. für den TMR

$$\text{TMR} = \frac{(1 - 2s)\text{TMR}_0}{1 - s\text{TMR}_0}, \quad (7.6.5)$$

wobei JMR<sub>0</sub> (TMR<sub>0</sub>) der JMR (TMR) Wert bei Abwesenheit von Spin-Flip-Streuung ist. Man erwartet also in erster Näherung, dass der JMR-Wert aufgrund von Spin-Flip-Streuung linear mit zunehmender Spin-Flip-Streuung abnimmt.

Die Untersuchung der Auswirkung einer Ni, Co, Pd, Au und Kupfer Dotierung zeigten in der Tat eine starke Abnahme des JMR mit wachsender Dotierungskonzentration (siehe Abb. 7.40). Interessant ist, dass durch Co-Dotierung die schwächste Abnahme, auch schwächer als die durch Cu oder Au erhalten wird. Die Daten aus Abb. 7.40 zeigen, dass die von den Dotieratomen eingenommene Fläche etwa linear mit der Schichtdicke ansteigt und ebenso der Anteil

<sup>71</sup>R. Jansen, J. S. Moodera, J. Appl. Phys. 83, 6682 (1998).

s der tunnelnden Elektronen, die eine Spin-Flip-Streuung erfahren, linear mit der Dicke der Dotierschicht anwächst. Der schwache Einfluss von Co wurde damit erklärt, dass Co in der Barriere überwiegend als  $\text{Co}^{3+}$  vorliegt, welches kein magnetisches Moment besitzt, wogegen Ni und Cu in einem Oxidationszustand mit magnetischem Moment vorliegen. Insgesamt hat die experimentelle Untersuchung der Dotierung von Tunnelbarrieren gezeigt, dass die Dotierung zu einer starken Reduzierung des JMR aufgrund von Spin-Streuung führt.

#### 7.6.4 Vertiefungsthema: FIF-Tunnelkontakte mit nichtmagnetischen Zwischenschichten

Mit nicht-magnetischen Zwischenschichten zwischen Barriere und ferromagnetischer Tunnel-elektrode kann gezielt der spinabhängige Transport durch nicht-magnetische Metalle untersucht werden, über den noch relativ wenig bekannt ist. Experimente mit ultradünnen metallischen Zwischenschichten aus Ag, Al, Au, Cr, Cu, Pd und Pt haben gezeigt, dass der JMR unabhängig vom jeweils verwendeten Metall stark reduziert wird. Der JMR erreicht bereits für Schichtdicken von wenigen Monolagen verschwindend kleine Werte.<sup>72</sup> Diese Ergebnisse sind konsistent mit Rastertunnelmikroskopie-Untersuchungen der Polarisation von Ferromagneten, auf die dünne nicht-magnetische Schichten aufgebracht wurden.

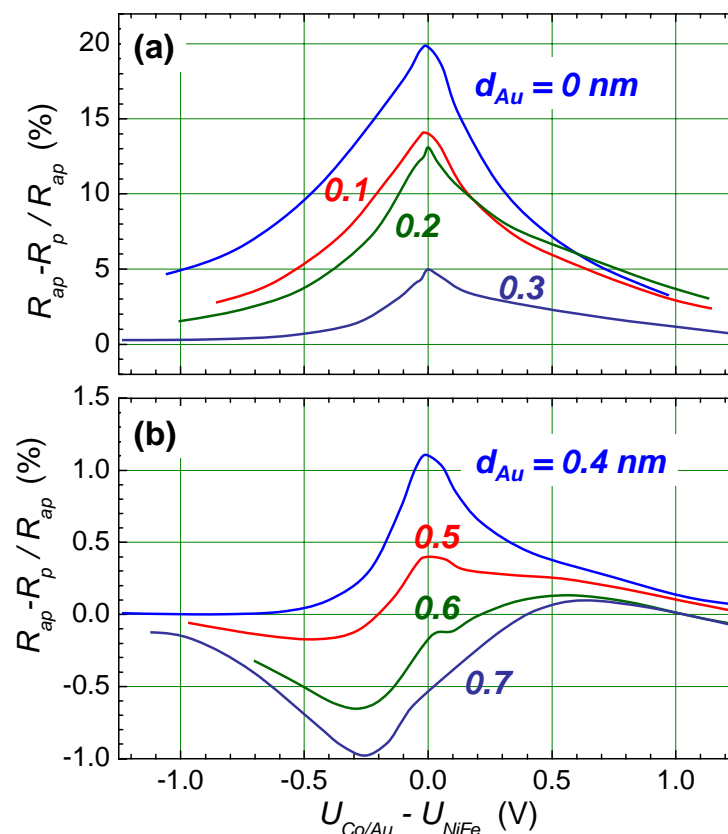


Abbildung 7.41: Spintransport durch ein nicht-magnetisches Metall in einem  $\text{Co}/\text{Au}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}_{20}\text{Fe}_{80}$  Tunnelkontakt bei 77K. Gezeigt ist die Abhängigkeit des JMR von der Spannung für verschiedene Dicken der nicht-magnetischen Au Zwischenschicht (nach J. S. Moodera *et al.*, J. Magn. Magn. Mat. 200, 248 (1999)).

In  $\text{Co}/\text{Au}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}_{20}\text{Fe}_{80}$  Tunnelkontakten mit Au Zwischenschichten von wenige Å Dicke

<sup>72</sup>J. S. Moodera *et al.*, J. Magn. Magn. Mat. 200, 248 (1999).



wurde vor kurzem ein negativer JMR Effekt und eine ungewöhnliche Abhängigkeit von der Kontaktspannung beobachtet (siehe Abb. 7.41).<sup>73</sup> Theoretische Rechnungen sagen für F/N/I/N/F Strukturen (N: nicht-magnetisches Metall, F: Ferromagnet, I: Isolator) ein oszillierendes Verhalten des JMR in Abhängigkeit von der Dicke des nicht-magnetischen Metalls (M) vorher.<sup>74,75</sup> Das oszillatorische Verhalten wird dabei durch die Tatsache verursacht, dass sich die metallische Zwischenschicht wie ein Quantentopf verhält, was zur Ausbildung von Quantum-Well Zuständen führt. Es wurde ferner theoretisch vorhergesagt, dass der JMR nur auf einer recht großen Längenskala in der Größenordnung von 100Å in der N-Schicht abklingt. Allerdings spielen hier Schichtrauigkeiten eine große Rolle. Rauigkeiten unterdrücken die Kohärenz der Elektronen und führen zu einer viel kleineren Abklinglänge. Bei der Interpretation der experimentellen Daten müssen auch Interdiffusionsprozesse berücksichtigt werden, die in theoretische Überlegungen nicht eingehen. Es sei hier noch darauf hingewiesen, dass in N/F-Strukturen auch der so genannte Austausch-Proximity-Effekt berücksichtigt werden muss, der zu einer Spinpolarisation der Leitungselektronen des paramagnetischen Metalls führt. Die physikalischen Grundlagen zu diesem Effekt und Experimente zu dessen Nachweis werden in Abschnitt 7.9 diskutiert.

Insgesamt bietet das Einbringen von nicht-magnetischen Zwischenschichten die Möglichkeit, spezielle Eigenschaften von in M/FM-Schichtsystemen gezielt herzustellen. Dies erfordert aber einen hohen technischen Aufwand, da die M-Schichten sehr dünn und sehr glatt sein müssen.

### 7.6.5 Vertiefungsthema: Grenzflächeneffekte und Vorzeichen der Spinpolarisation

Die Spinpolarisation wurde in Abschnitt 7.3 als

$$P \equiv \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} = a - (1 - a) = 2a - 1 \quad (7.6.6)$$

definiert, d.h. sie ergibt sich aus der unterschiedlichen Zustandsdichte der Majoritäts- und Minoritätselektronen bei der Fermi-Energie. Man nahm lange Zeit an, dass die Spinpolarisation  $P$  von Elektronen, die aus einer ferromagnetischen Elektrode in die andere tunneln, tatsächlich diese intrinsische Spinpolarisation wiedergibt. Wie in Abschnitt 7.3 gezeigt wurde, wird die Spinpolarisation üblicherweise mit FIS-Tunnelkontakten bestimmt. In diesen Experimenten wurde immer eine positive Spinpolarisation für alle ferromagnetischen Übergangsmetalle und Legierungen gefunden.<sup>76,77</sup> Dies ist sehr überraschend, da für Metalle wie Co oder Ni eine negative Spinpolarisation aufgrund der kleineren Zustandsdichte der Majoritätselektronen bei  $E_F$  erwartet wird (vergleiche Abb. 7.16). Dieses generelle Problem wurde leider bis heute noch nicht richtig gelöst und immer mit dem Argument entkräftet, dass die  $s$ -Elektronen eine viel größere Tunnelwahrscheinlichkeit haben und deshalb die gemessene positive Spinpolarisation nur die der  $s$ -artigen Elektronen widerspiegeln kann.<sup>78,79</sup> Eine weitere Rechtfertigung für die positive Spinpolarisation von Co wurde durch ab initio Rechnungen erhalten, die eine positive Spinpolarisation aufgrund einer starken  $sp - d$  Hybridisierung zwischen Al und Co an der Grenzfläche zwischen der Co-Elektrode und der  $Al_2O_3$ -Barriere ergaben.<sup>80</sup> Aufgrund von Hy-

<sup>73</sup>J. S. Moodera *et al.*, unpublished.

<sup>74</sup>A. Vedyayev *et al.*, Europhys. Lett. **39**, 219 (1997).

<sup>75</sup>S. Zhang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 5663 (1998).

<sup>76</sup>siehe z.B. P. M. Tedrow, R. Meservey, Phys. Rev. **B 7**, 318 (1973).

<sup>77</sup>R. Meservey, P. M. Tedrow, Phys. Rep. **238**, 173 (1994).

<sup>78</sup>M. B. Stearns, J. Magn. Magn. Mat. **5**, 187 (1997).

<sup>79</sup>J. A. Hertz, K. Aoi, Phys. Rev. **B 8**, 3252 (1973).

<sup>80</sup>D. Nguyen-Mahn *et al.*, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **492**, 319 (1998).



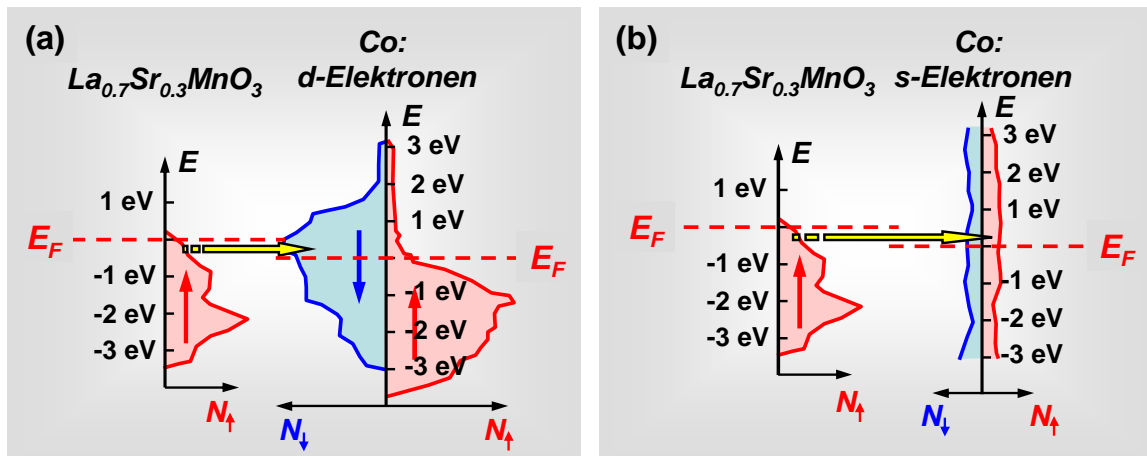


Abbildung 7.42: Zustandsdichten des halbmetallischen  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$  (jeweils links) und der Majoritäts (↑) und Minoritätselektronen (↓) von Co für Elektronen mit  $d$ - (a) und  $s$ -Charakter (b). Die Zustandsdichten für Co wurden für eine (001) Oberfläche berechnet. Die horizontalen Pfeile zeigen die wahrscheinlichsten Tunnelübergänge bei kleiner Kontaktspannung, in (a) aus Spin-↑ Zuständen in LSMO zu Spin-↓ Zuständen in Co bei anti-paralleler Magnetisierungskonfiguration, in (b) aus Spin-↑ Zuständen in LSMO zu Spin-↑ Zuständen in Co bei paralleler Konfiguration (nach J. M. De Teresa *et al.*, Science 286, 507 (1999)).

bridisierungseffekten ist zu erwarten, dass die beobachtete Spinpolarisation (Vorzeichen und Größe) wesentlich von dem gewählten Barrierenmaterial abhängen sollte.

In fast allen ferromagnetischen Tunnelkontakten, die bis heute untersucht wurden (die meisten auf der Basis von  $3d$ -Übergangsmetallen) wurde ein *normaler TMR* bzw. *JMR* gefunden, das heißt, der Tunnelwiderstand ist niedriger für parallele und höher für anti-parallele Magnetisierungsorientierung in den beiden Kontaktelektroden. Dieses Verhalten wird erwartet, wenn das Vorzeichen der Spinpolarisation in den beiden Kontaktelektroden gleich ist. Dies stimmt wiederum gut mit der Tatsache zusammen, dass in den Experimenten mit FIS-Kontakten in der Tat nur positive Spinpolarisationen gefunden wurden. Allerdings zeigten vor kurzem mehrere Experimente, dass sowohl die Größe als auch das Vorzeichen der Spinpolarisation in Experimenten mit ferromagnetischen Tunnelkontakten von der Wahl des Barrierenmaterials abhängt.<sup>81,82,83,84</sup> Bei entgegengesetztem Vorzeichen der Spinpolarisation sprechen wir dann von einem so genannten *inversen TMR* bzw. *inversen JMR*. Insgesamt zeigen diese Experimente, dass die Grenzflächen zwischen ferromagnetischer Elektrode und Oxidbarriere einen wichtigen Einfluss auf die für die Tunnelkontakte relevanten Spinpolarisation haben.

Inverse JMR-Effekte wurden von Sharma *et al.* in Tunnelkontakten mit  $\text{Ni}_{20}\text{Fe}_{80}$  Elektroden und  $\text{Ta}_2\text{O}_5$  oder  $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Al}_2\text{O}_3$  Barrieren gefunden.<sup>85</sup> Ebenso wurde eine starke Abhängigkeit von der angelegten Spannung beobachtet. Insbesondere wurde ein Wechsel des Vorzeichens des JMR als Funktion der Spannung beobachtet. Diese experimentellen Tatsachen wurden Bandstruktureffekten in  $\text{Ta}_2\text{O}_5$  und  $\text{Ni}_{20}\text{Fe}_{80}$  zugeschrieben, die in einer starken negativen Polarisation an der  $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Ni}_{20}\text{Fe}_{80}$  Grenzfläche resultieren. Die genauen Ursachen sind aber zur Zeit noch nicht verstanden. So wurde z.B. auch eine starke Abhängigkeit des Effekts von der Oxidation der Barriere gefunden, was einen erheblichen Einfluss von Barrierendefekten nahe legt,

<sup>81</sup>J. M. De Teresa *et al.*, Phys. Rev. Lett. 82, 4288 (1999).

<sup>82</sup>J. M. De Teresa *et al.*, Science 286, 507 (1999).

<sup>83</sup>M. Sharma *et al.*, Phys. Rev. Lett. 82, 616 (1999).

<sup>84</sup>J. Z. Sun *et al.*, Phys. Rev. B 61, 11244 (2000).

<sup>85</sup>M. Sharma *et al.*, Phys. Rev. Lett. 82, 616 (1999).

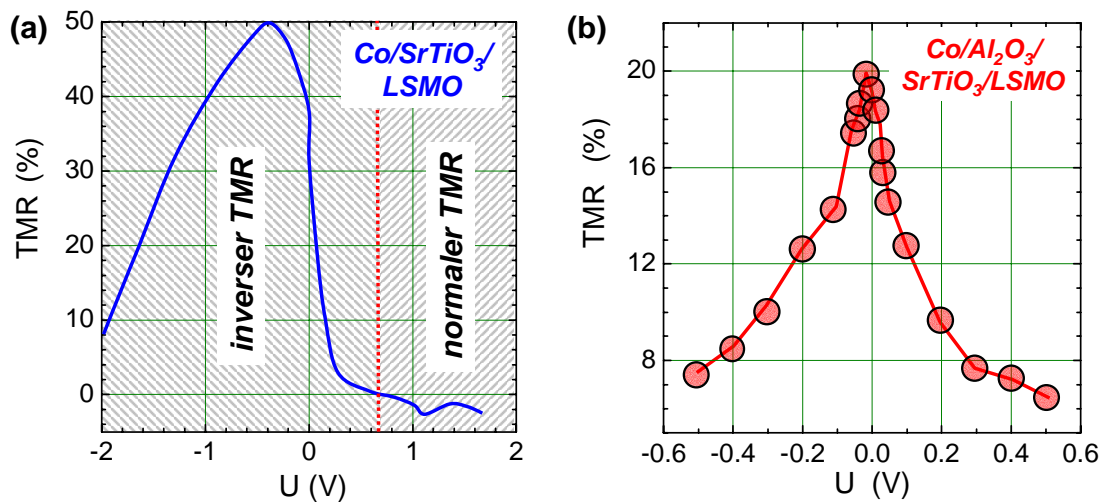


Abbildung 7.43: Abhängigkeit des TMR von der Biasspannung für Co/SrTiO<sub>3</sub>/La<sub>2/3</sub>Sr<sub>1/3</sub>MnO<sub>3</sub> Tunnelkontakte (a) und Co/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub>/La<sub>2/3</sub>Sr<sub>1/3</sub>MnO<sub>3</sub> Tunnelkontakte (b) (nach J. M. De Teresa *et al.*, Science **286**, 507 (1999)).

die z.B. zu Spin-Flip-Streuung führen können.

Vor kurzem beobachteten De Teresa *et al.* einen inversen TMR von mehr als 50% in Co/SrTiO<sub>3</sub>/La<sub>0,7</sub>Sr<sub>0,3</sub>MnO<sub>3</sub> Tunnelkontakten, der auch eine starke Abhängigkeit von der angelegten Spannung zeigte.<sup>86,87</sup> Ein inverser JMR wurde auch bei Verwendung einer Ce<sub>0,69</sub>La<sub>0,31</sub>O<sub>1,84</sub>-Barriere beobachtet. Die experimentellen Ergebnisse konnten insgesamt zufriedenstellend mit den berechneten *d*-Bandeigenschaften von Co erklärt werden, wie sie in Abb. 7.42 gezeigt sind. Abb. 7.42 macht klar, dass wir für kleine Kontaktspannungen einen normalen TMR erwarten, wenn das Tunneln von *s*-Elektronen dominiert wird (b), wogegen wir einen inversen JMR erwarten, wenn das Tunneln von den *d*-Elektronen dominiert wird (b). Letzteres scheint für SrTiO<sub>3</sub>- oder Ce<sub>0,69</sub>La<sub>0,31</sub>O<sub>1,84</sub>-Barrieren der Fall zu sein, wogegen für Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Barrieren das dominante Tunnel der *s*-artigen Elektronen zu einem normalen TMR führt.

Mit der in Abb. 7.42 gezeigten Bandstruktur lässt sich auch die Spannungsabhängigkeit des TMR erklären. Bei großen Spannungen spielt die Feinstruktur der Zustandsdichte des *d*-Bandes eine entscheidende Rolle. Für negative Spannungen liegt das Fermi-Niveau von LSMO über dem von Co und wir erwarten deshalb ein Maximum des inversen TMR, wenn das Fermi-Niveau von LSMO auf Höhe der maximalen Spin-↓ Zustandsdichte liegt. In der Tat wird im Experiment ein maximaler inverser TMR bei etwa -0,4 V beobachtet (siehe Abb. 7.43). Für positive Spannung erwarten wir einen Vorzeichenwechsel des TMR für Spannungen oberhalb von etwa 1 V, wenn das Fermi-Niveau von LSMO in einem Bereich liegt, wo die Zustandsdichte der Spin-↑ Elektronen in der Co-Elektrode dominiert. Für Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Barrieren dominiert anscheinend das Tunneln von *s*-artigen Elektronen und wir bekommen nach Abb. 7.42b den üblichen normalen TMR. Dies stimmt mit den oben bereits diskutierten Vorstellungen zur Erklärung der positiven Spinpolarisation von Co überein.

<sup>86</sup>De Teresa *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82**, 4288 (1999).

<sup>87</sup>J. M. De Teresa *et al.*, Science **286**, 507 (1999).

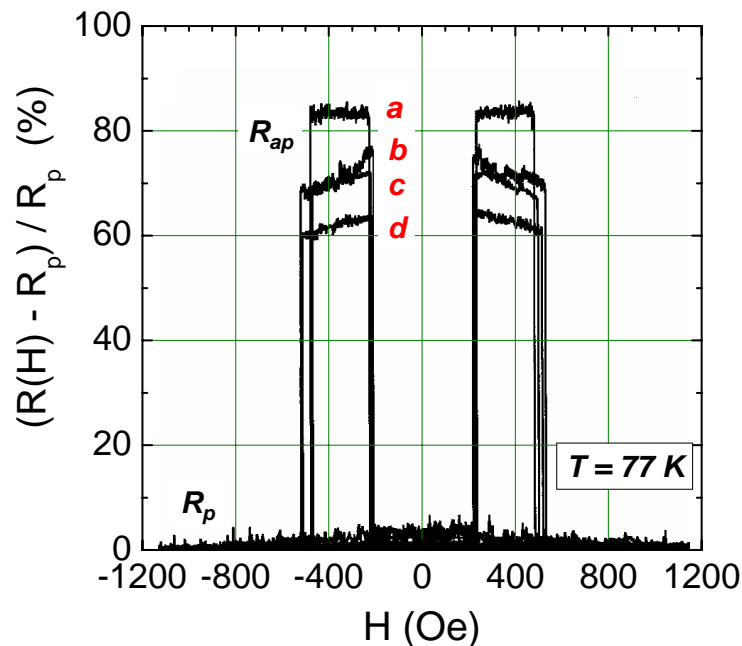


Abbildung 7.44: Magnetwiderstand gegen angelegtes Feld für einen  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{NdGaO}_3/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$  Tunnelkontakt. Es wird eine maximale Widerstandsänderung um einen Faktor 7.3 beobachtet. Die verschiedenen Kurven wurden für verschiedene Kontaktflächen zwischen  $6 \times 6$  und  $20 \times 30 \mu\text{m}^2$  erhalten (aus M. H. Jo *et al.*, Phys. Rev. B 61, R14905 (2000)).

### 7.6.6 Neue Materialsysteme

Die meisten Experimente zu ferromagnetischen Tunnelkontakten wurden mit Übergangsmetallen durchgeführt. Die  $3d$ -Übergangsmetalle, selbst diejenigen, die starke Ferromagnete sind, haben allerdings den Nachteil, dass sie immer eine unvollständige Spinpolarisation der Leitungselektronen besitzen. Dies liegt an den  $4s/3p$  Bändern. Man hat aber sehr bald nach weiteren Materialsystemen mit höherer Spinpolarisation gesucht, die somit auch prinzipiell einen höheren JMR ermöglichen sollten.

Eine günstigere Konstellation kann in Übergangsmetalloxiden vorliegen, da hier durch die Hybridisierung der äußeren Elektronenschalen ( $4s$ -Elektronen) der Metallionen mit den  $2p$  Sauerstoff-Orbitalen eine Lücke von mehreren eV zwischen den  $4s$  und  $3d$  Bändern erzeugt wird. Die  $3d$  Bänder und das Fermi-Niveau fallen meist in diese  $s$ - $p$  Lücke. Wenn das Fermi-Niveau nur eines der spinpolarisierten  $3d$  Bänder schneidet, so erhält man einen halbmetallischen Ferromagneten. Eine interessante Eigenschaft von stöchiometrischen halbmetallischen Ferromagneten ist die Tatsache, dass das Spinmoment immer ein ganzzahliges Vielfaches eines Bohr'schen Magnetons ist. Dies folgt daraus, dass  $n^\uparrow + n^\downarrow$  eine ganze Zahl ist und  $n^\downarrow$  ebenfalls eine ganze Zahl ist (gefülltes Band). Deshalb ist auch  $n^\uparrow - n^\downarrow$  eine ganze Zahl.

Als neue Materialsysteme kommen z.B. die dotierten Manganate in Frage, für die mit Hilfe von spinpolarisierter Photoemissionsspektroskopie eine Spinpolarisation nahe bei 100% bestimmt wurde.<sup>88</sup> Experimente mit Korngrenzenkontakten (siehe hierzu Abb. 2.10) und planaren Tunnelkontakten (siehe hierzu Abb. 7.44) zeigten in der Tat fast ideale  $R(H)$  Kurven mit hohen JMR-Werten (über 95%) bzw. TMR-Werten (bis zu 1800%).<sup>89,90</sup> Aus diesen Messungen können

<sup>88</sup>J.-H. Park, E. Vescovo, H.-J. Kim, C. Kwon, R. Ramesh, and T. Venkatesan, Nature **392**, 794 (1998).

<sup>89</sup>M. H. Jo *et al.*, Phys. Rev. B **61**, R14905 (2000).

<sup>90</sup>M. Bowen, M. Bibes, A. Barthélémy, J.-P. Contour, A. Anane, Y. Lemaître, A. Fert, Appl. Phys. Lett. **82**, 233 (2003).

mit dem Jullière-Ausdruck Werte für die Tunnel-Spinpolarisation abgeleitet werden, die oberhalb von 95% liegen und so den theoretisch erwarteten Werten schon sehr nahe kommen. Da in diesen Kontakten die Tunnelbarrieren noch keineswegs perfekt sind, ist anzunehmen, dass hier ein beträchtlicher Beitrag des spinunabhängigen Kanals vorliegt und deshalb JMR/TMR-Werte signifikant unterhalb des idealen Jullière Wertes erwartet werden.

Die dotierten perowskitischen Manganate haben den Nachteil, dass ihre maximalen Curie-Temperaturen unterhalb von 400 K liegen. Deshalb kommen sie für Raumtemperaturanwendungen kaum in Frage. Man hat deshalb intensiv nach halbmolekularen Oxiden mit höherem  $T_C$  gesucht. Interessante Kandidaten sind  $\text{CrO}_2$ ,<sup>91</sup>  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  und die so genannten Doppelperowskite mit einer Zusammensetzung  $\text{A}_2\text{BB}'\text{O}_6$  mit  $\text{A} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$  und  $\text{BB}' = \text{FeMo}, \text{FeRe}$  oder  $\text{CrW}$ .  $\text{CrO}_2$  ist das einzige einfache Oxid, das ein ferromagnetisches Metall ist. Es besitzt eine Rutil-Struktur, bei der das  $\text{Cr}^{4+}$  Ion von einem fast unverzerrten Sauerstoff-Oktaeder umgeben ist. Durch das Kristallfeld der sechs Sauerstoff-Anionen spalten die  $3d$  Orbitale in ein  $t_{2g}$  Triplett ( $xy, yz, zx$ ) und ein  $e_g$  Dublett ( $x^2 - y^2, 3z^2 - r^2$ ) auf, mit einer Kristallfeldaufspaltung von etwa 1.5 eV. Die  $3d$  Orbitale überlappen und bilden Bänder aus. Der Überlapp der  $xy$  Orbitale ist nur schwach. Sie bilden ein besetztes, nicht-bindendes Niveau mit einem lokalisierten Spin 1/2. Die anderen  $t_{2g}$  Orbitale mischen und bilden ein breiteres, halb gefülltes Band. Der Austauschmechanismus in  $\text{CrO}_2$  ist eine Mischung aus ferromagnetischem Superaustausch und Doppelaustausch aufgrund des Hüpfens der Bandelektronen von Platz zu Platz, wobei sie durch die Hund'sche Kopplung stark an den Spin 1/2 gekoppelt sind.

Magnetit,  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , ist ein Ferrimagnet, der in der Spinellstruktur kristallisiert. In Magnetit hüpfen nur ein einzelnes  $3d^1$  Elektron zwischen den  $3d^{5\uparrow}$  Kernspins auf oktaedrischen Plätzen. Dies entspricht einer halbmolekularen Zustandsdichte. Es besteht aber eine starke Tendenz für die Bildung von Polaronen unterhalb der Curie-Temperatur von etwa 860 K.

Viel Aufsehen haben vor kurzem die Doppelperowskite mit der allgemeinen chemischen Zusammensetzung  $\text{A}_2\text{BB}'\text{O}_6$  erregt, wobei die B und B' Kationen ein NaCl-Typ Übergitter besetzen. Die Verbindung  $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$  hat z.B. eine Curie-Temperatur von 421 K und Bandstrukturrechnungen deuten auf ein halbmolekulares Verhalten hin.<sup>92</sup> Die Majoritätsspins werden mit den  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $3d^5$  Kernspins assoziiert, während sich die Minoritätsspins in einem Spin-↓ Band mit  $4d^1(\text{Mo})$  Charakter befinden, das mit den leeren Eisen  $t_{2g} \downarrow$  Orbitalen gemischt ist. Der ferromagnetische Austausch resultiert aus einem Elektronenhüpfen im Spin-↓ Band. Die Verbindung  $\text{Sr}_2\text{FeReO}_6$  hat mit etwa 540 K eine wesentlich höhere Curie-Temperatur. Zukünftige Forschungsarbeiten müssen zeigen, ob für die eben diskutierten Materialien tatsächlich eine hohe Spinpolarisation an Grenzflächen erreicht werden kann.

Als weitere Materialsysteme kommen die Heusler-Verbindungen wie  $\text{NiMnSb}$ ,  $\text{PtMnSb}$  und  $\text{Co}_2\text{MnSi}$  mit Curie-Temperaturen von 728, 572 und 985 K in Frage, die als halbmolekulare Ferromagnete gelten und deshalb eine 100%ige Spinpolarisation zeigen sollten.<sup>93</sup> Vor kurzem wurden Tunnelkontakte mit einer Schichtfolge  $\text{NiMnSb}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}_{20}\text{Fe}_{80}/\text{CoO}$  erfolgreich hergestellt. Diese Kontakte zeigen zwar einen JMR, aber nur von etwa 20%. Für eine 100%ige Spinpolarisation würde man 62% erwarten. Es ist zur Zeit unklar, ob und inwieweit die 100%ige Spinpolarisation an den Grenzflächen erreicht werden kann.

<sup>91</sup>K. P. Kämper, W. Schmitt, G. Güntherodt, R. J. Gambino, R. Ruf, Phys. Rev. Lett. 59, 2799 (1987).

<sup>92</sup>K. I. Kobayashi *et al.*, Nature 385, 677 (1998).

<sup>93</sup>R. A. deGroot *et al.*, Phys. Rev. Lett. 50, 2024 (1983).

### 7.6.7 Vertiefungsthema: Rastertunnelmikroskopie

Die Rastersondentechniken haben sich innerhalb der letzten zwei Jahrzehnte zu unverzichtbaren Analysemethoden von Festkörperoberflächen entwickelt. Eine interessante Perspektive eröffnet die Untersuchung des spinpolarisierten Tunnelns mit Hilfe der Rastertunnelmikroskopie (STM = Scanning Tunneling Microscopy). Hierbei wird das Vakuumtunneln von spinpolarisierten Ladungsträgern zwischen einer ferromagnetischen Spitze und einer magnetischen Probenoberfläche untersucht. Bei Verwendung einer ferromagnetischen Tunnelspitze hängt der Tunnelstrom außer von der Barrierenhöhe und -breite sowie der angelegten Spannung auch von der relativen Magnetisierungsrichtung der ferromagnetischen Spitze und der magnetischen Probenoberfläche ab. Wir erhalten dadurch eine neue Messmethode, die so genannte *Spinpolarisierte Rastertunnelmikroskopie* (SP-STM: Spin Polarized Scanning Tunneling Microscopy). Bei dieser Messmethode benötigen wir eine Tunnelspitze, die eine effiziente Quelle für spinpolarisierte Elektronen darstellt. Dies kann durch Ausnutzung verschiedener Spinfilter-Effekte erreicht werden:

- die Zeemann-Aufspaltung der Quasiteilchen-Zustandsdichte in Supraleitern (siehe Abschnitt 7.3.1).
- Benutzung von ferromagnetischen Halbleitern oder Isolatoren als spinabhängige Tunnelbarrieren (siehe Abschnitt 7.8).
- Verwendung von optisch gepumpten Halbleitern, wie z.B. GaAs, die Quellen für spinpolarisierte Ladungsträger darstellen. Die maximal erreichbare Polarisation liegt bei etwa 50%.
- Benutzung von halbmetallischen Ferromagneten. Diese Materialien besitzen nur für eine Spinrichtung eine endliche Zustandsdichte beim Fermi-Niveau und deshalb eine Spinpolarisation von 100% (siehe Abschnitt 7.6.6).
- Benutzung von ferromagnetischen Metallen wie Fe, Ni und Co. Wir erhalten hier aber nur eine niedrige Spinpolarisation unter 60% (siehe Abschnitt 7.3.2).

Die spinpolarisierte STM (SP-STM) erlaubt die Untersuchung von magnetischen Strukturen mit einer Auflösung im Nanometerbereich. Mit einer  $\text{CrO}_2$ -Spitze bildeten **Wiesendanger et al.**<sup>94</sup> die Terrassenstruktur einer Cr (001) Oberfläche ab. Hierbei waren die Terrassen durch monoatomare Stufen voneinander getrennt und besaßen ein alternierendes magnetisches Moment (topologischer Antiferromagnetismus). Im Gegensatz zur Abbildung mit einer nichtmagnetischen Wolfram-Spitze ergab die Abbildung mit der ferromagnetischen  $\text{CrO}_2$ -Spitze eine unterschiedliche Höhe der monoatomaren Stufen (siehe Abb. 7.45). Dies resultiert aus der Tatsache, dass der Tunnelstrom beim Experiment konstant gehalten wird und der Tunnelstrom für eine Spinrichtung größer ist als für die andere.

Unter der Annahme, dass  $P_{\text{CrO}_2} \approx 100\%$  (diesen Wert erhält man aus der spinpolarisierten Photoemission), liefert das Jullière-Modell im Fall paralleler Ausrichtung der Magnetisierung von Spitze und Oberfläche einen erhöhten Tunnelstrom  $I_P$  aufgrund von spinpolarisiertem Tunneln:

$$I_P = I_0(1 + P) . \quad (7.6.7)$$

<sup>94</sup>R. Wiesendanger, H.-J. Güntherodt, G. Güntherodt, R. J. Gambino, R. Ruf, Phys. Rev. Lett. **65**, 247 (1990).

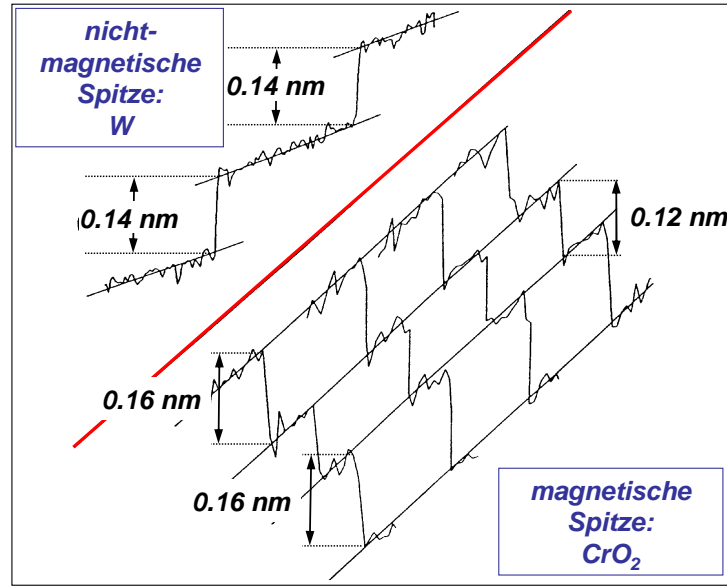


Abbildung 7.45: Spinpolarisierte Rastertunnelmikroskopie: Linescans über drei monoatomare Stufen einer Cr (001)-Oberfläche gemessen mit einer nicht-magnetischen W-Spitze (oben links) bzw. einer ferromagnetischen CrO<sub>2</sub>-Spitze (unten rechts) (nach R. Wiesendanger, H.-J. Güntherodt, G. Güntherodt, R. J. Gambino, R. Ruf, Phys. Rev. Lett. 65, 247 (1990)).

Hierbei ist  $I_0$  der Tunnelstrom für Spinpolarisation  $P = 0$  an der Cr-Oberfläche. Entsprechend erniedrigt sich bei antiparalleler Ausrichtung der Tunnelstrom, d.h.

$$I_A = I_0(1 - P) . \quad (7.6.8)$$

Damit gilt für die Spinpolarisation  $P$  an der Cr-Oberfläche:

$$P = \frac{I_P - I_A}{I_P + I_A} \quad (7.6.9)$$

In der in Abb. 7.45 gezeigten STM-Messung wurde durch Regelung des Abstands  $s$  zwischen Tunnelspitze und Oberfläche der Tunnelstrom konstant gehalten. Die parallele Konfiguration führt damit zu einer Vergrößerung von  $s$  um  $\Delta s_1$  gegenüber dem Abstand  $s_0$  der mit einer unmagnetischen Spitze durchgeführt wurde. Die antiparallele Konfiguration führt zu einer entsprechenden Reduzierung des Abstands um  $\Delta s_2$  (siehe Abb. 7.46). Mit  $I_0 = C \exp\{-A\sqrt{\phi}s_0\}$  gilt der Zusammenhang zwischen  $I_p$  und  $\Delta s_1$ , bzw.  $I_{ap}$  und  $\Delta s_2$

$$\begin{aligned} I_p &= I_0 \exp\{A\sqrt{\phi}\Delta s_1\} \\ I_{ap} &= I_0 \exp\{-A\sqrt{\phi}\Delta s_2\} \end{aligned} \quad (7.6.10)$$

mit der mittleren Höhe der Tunnelbarriere  $\phi$ .

Wenn also an einer Stufe der Höhe  $h$  die Magnetisierungsrichtung dreht, führt dies zu einer gemessenen Stufenhöhe von  $h_{p \rightarrow ap} = h + \Delta s_1 + \Delta s_2$  beim Übergang von paralleler zu antiparalleler Ausrichtung. Bei der nächsten Stufe (Übergang von antiparalleler zu paralleler Orientierung) gilt dann  $h_{ap \rightarrow p} = h - \Delta s_1 - \Delta s_2$ .

Aus der Messung der unterschiedlichen Stufenhöhen lässt sich somit die Spinpolarisation zu

$$P = \frac{\exp\{A\sqrt{\phi}\Delta s_1\} - \exp\{-A\sqrt{\phi}\Delta s_2\}}{\exp\{A\sqrt{\phi}\Delta s_1\} + \exp\{-A\sqrt{\phi}\Delta s_2\}} = \frac{\exp\{A\sqrt{\phi}\Delta s\} - 1}{\exp\{A\sqrt{\phi}\Delta s\} + 1} \quad (7.6.11)$$

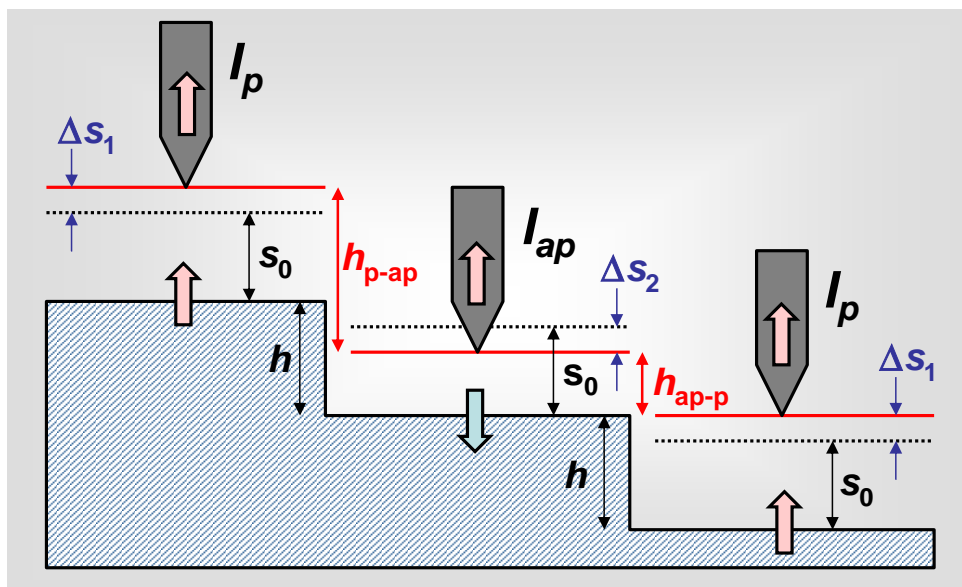


Abbildung 7.46: Schematische Darstellung einer ferromagnetischen Spitze, die über eine Terrassenstruktur (monoatomare Stufenhöhe  $h$ ) mit alternierender Magnetisierungsrichtung gerastert wird. Der zusätzliche Beitrag von spinpolarisiertem Tunneln führt bei einem konstant gehaltenen Tunnelstrom zu einer Veränderung der gemessenen Stufenhöhe  $h_{p \rightarrow ap} = h + \Delta s_1 + \Delta s_2$  und  $h_{ap \rightarrow p} = h - \Delta s_1 - \Delta s_2$ .

abschätzen, wobei  $\Delta s \equiv \Delta s_1 + \Delta s_2$ .

Mit  $A \approx 1(\text{eV})^{-1/2} \text{\AA}^{-1}$ , einer gemessenen Barrierenhöhe von  $\phi \approx 4 \text{ eV}$  (bestimmt durch Messung von  $\ln I$  vs  $s$ ) und mit  $\Delta s \approx 0.2 \text{\AA}$  (aus Abb. 7.45) wurde eine Polarisation  $P = 20 \pm 10\%$  bestimmt.

Weiterhin zeigten Wiesendanger *et al.*,<sup>95</sup> dass die Spin-Konfiguration von  $\text{Fe}^{2+}$  oder  $\text{Fe}^{3+}$  in  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  mit Hilfe einer Fe-Tunnelspitze detektierbar ist. Damit gelang erstmals der experimentelle Nachweis von spinpolarisiertem Tunneln auf atomarer Skala.

<sup>95</sup>R. Wiesendanger *et al.*, Z. Phys. **B 86**, 1 (1992) und Europhys. Lett. **19**, 141 (1992).

## 7.7 Inelastisches Tunneln

In den vorausgegangenen Abschnitten wurden immer elastische Tunnelprozesse betrachtet, bei denen die Energie der tunnelnden Elektronen erhalten bleibt. Wir diskutieren jetzt *inelastisches Tunneln*, bei dem die Energie durch Wechselwirkung der Elektronen mit elementaren Festkörperanregungen geändert wird. Hierbei können wir zwischen inelastischen Prozessen aufgrund von Wechselwirkungen innerhalb der Barriere und innerhalb der Tunnелеlektroden unterscheiden. Wir werden sehen, dass der Tunnelmagnetwiderstand durch inelastische Tunnelprozesse erheblich reduziert werden kann.

### 7.7.1 Inelastisches Tunneln mit Wechselwirkungsprozessen in der Barriere

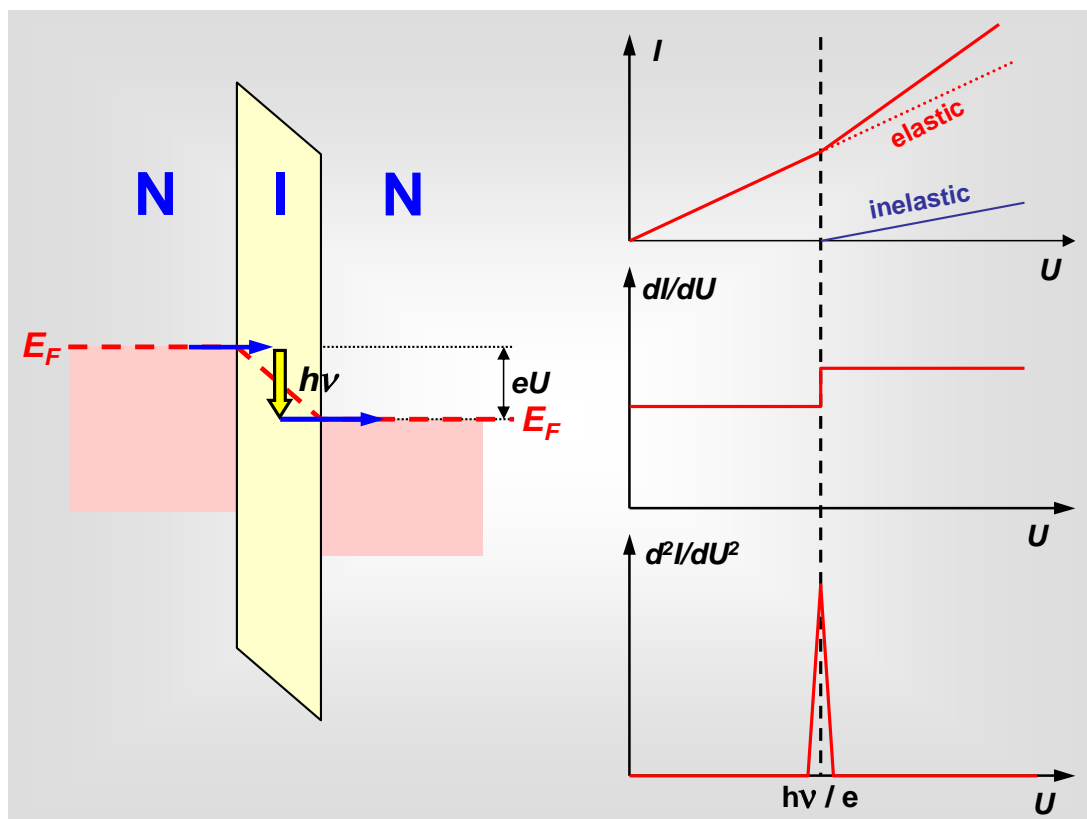


Abbildung 7.47: Inelastisches Tunneln von Elektronen unter Emission/Anregung von Elementaranregungen in der Tunnelbarriere.

Beim inelastischen Tunneln verliert oder gewinnt ein Elektron die Energie  $\hbar\omega$  durch Emission oder Absorption einer Elementaranregung in der Barriere (siehe Abb. 7.47). Aufgrund des Pauli-Prinzips muss der Endzustand bei dem inelastischen Tunnelprozess zunächst unbesetzt sein. Daraus ergibt sich, dass inelastische Prozesse mit Emission einer charakteristischen Elementaranregung (z.B. Phonon, Magnon) mit Energie  $\hbar\omega_0$  erst ab einer Energie  $eU_0 \geq \hbar\omega_0$  möglich sind. Dies führt dazu, dass der Tunnelstrom ab der Spannung  $U_0 \geq \hbar\omega_0/e$  stärker ansteigt und zwar linear, da die Anzahl der möglichen Anfangszustände, für die die Bedingung  $eU_0 \geq \hbar\omega_0$  gilt, linear mit der Spannung anwächst. Dies resultiert in einem Knick in den Strom-Spannungs-Charakteristiken bzw. einer Stufe in den  $G(U) = dI/dU$ - oder einem Peak in den  $d^2I(U)/dU^2$ -Kennlinien bei  $U_0$  durch das Einsetzen des inelastischen Tunnelstroms. Die Tun-



nelbarriere wird sicherlich mehrere charakteristische Elementaranregungen mit unterschiedlichen Energien  $\hbar\omega_i$  besitzen, wobei dann jede Mode zu einem Peak in  $d^2I(U)/dU^2$  bei der Spannung  $U_i = \hbar\omega_i$  führt. Durch Aufnahme der  $d^2I(U)/dU^2$ -Kennlinien können deshalb die charakteristischen Anregungsmoden spektroskopiert werden. Das heißt, inelastisches Tunneln kann als eine besondere Art der Elektronenverlust-Spektroskopie betrachtet werden.

### Anregung von Vibrationsmoden von Molekülen

Bei der Inelastischen Elektron-Tunnelspektroskopie (IETS) vermisst man die Vibrationspektren von Molekülen oder Fragmenten von Molekülgruppen, die in die Tunnelkontaktstruktur (z.B. Grenzfläche zwischen Elektroden und Barriere) eingebracht werden. Durch Vergleich mit Raman-Messungen hat man festgestellt, dass die Vibrationsmoden relativ unempfindlich auf das Einbringen in die Tunnelstruktur reagieren. Vorteile der IETS sind ihr großer Energiebereich (einige meV bis etwa 1 eV) und die große spektrale Auflösung, die durch die Temperaturverschmierung  $k_B T$  begrenzt ist. Man misst deshalb bei tiefen Temperaturen und benutzt außerdem meist supraleitende Elektroden, da diese einen scharfen Peak in der Zustandsdichte besitzen.

Neben dem gewollten Dotieren der Barriere mit bestimmten Molekülen für die IETS, erhält man häufig eine ungewollte Dotierung durch Verunreinigungen beim Herstellungsprozess. So führen z.B. magnetische Verunreinigungen zu einer so genannten *Zero Bias Anomalie (ZBA)*, d.h. einer anomalen Erhöhung der Leitfähigkeit bei  $U = 0$ , die bei Anlegen eines Magnetfeldes aufspaltet. Die ZBA entsteht durch spinabhängige Streuung ähnlich zum Kondo-Effekt in Metallen mit einer kleinen Konzentration von magnetischen Verunreinigungen. Für eine genaue Diskussion sei hier auf die Literatur verwiesen.<sup>96,97</sup>

### Anregung von kollektiven Moden in der Barriere

Tunnelnde Elektronen können, wie oben bereits diskutiert wurde, kollektive Moden in der isolierenden Tunnelbarriere anregen. Die IETS kann deshalb Informationen über die Zustandsdichte  $g(\omega)$  dieser Moden geben. Allerdings besteht kein einfacher Zusammenhang zwischen  $g(\omega)$  und dem gemessenen Spektrum  $d^2I(U)/dU^2$ . Schreiben wir

$$\frac{d^2I}{dU^2}(U) \propto |M(\omega)|^2 g(\omega), \quad (7.7.1)$$

so hängt das Matrixelement  $|M(\omega)|^2$  sowohl von der Kopplung der tunnelnden Elektronen mit den kollektiven Anregungen als auch von der Kohärenz zwischen den Streuprozessen mit verschiedenen Atomen ab, die durch die relative Phase der Auslenkungen benachbarter Atome bestimmt ist. Deshalb werden meist nur die Peak-Positionen in den IETS-Spektren betrachtet und es wird nicht versucht, die Funktion  $g(\omega)$  abzuleiten.

Einen wichtigen Prozess stellt das Phononen- (oder Photonen-) unterstützte Tunneln dar. Dies ist besonders für das Tunneln zwischen zwei Supraleitern interessant, wie es in Abb. 7.48 gezeigt ist. Das Phononen- oder Photonen-unterstützte Tunneln ist für  $T = 0$  der einzig mögliche Prozess für Spannungen  $U < [\min(\Delta_1, \Delta_2)]/e$ .

<sup>96</sup>J. Appelbaum, Phys. Rev. Lett. **17**, 91 (1966).

<sup>97</sup>Principles of Electron Tunneling Spectroscopy, E. L. Wolf, Oxford Science Publications, Oxford University Press, New York (1989).

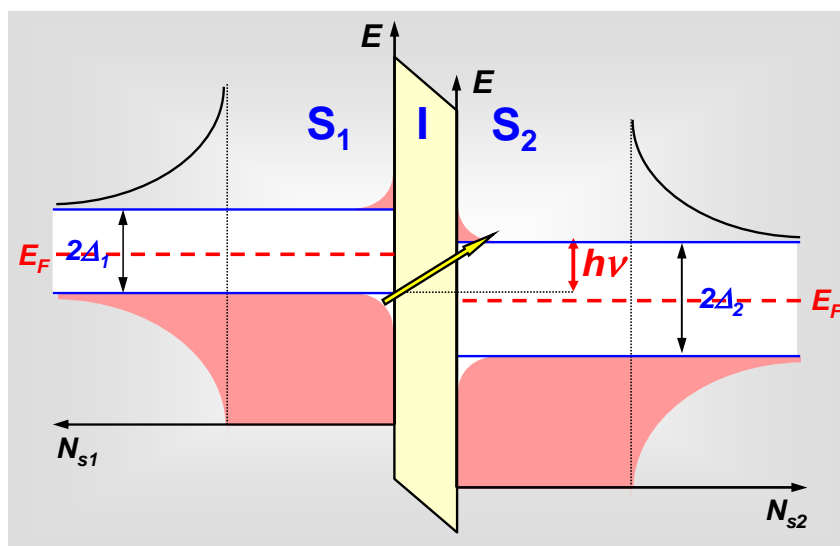


Abbildung 7.48: Schematische Darstellung des Phononen- oder Photonen-unterstützten Tunnelns.

Für ferromagnetische Tunnelkontakte wurde IETS meist zur Untersuchung von Magnonenanregungen in der Barriere<sup>98</sup> oder den Kontaktelektroden<sup>99</sup> verwendet. Ein typisches Beispiel ist in Abb. 7.49 gezeigt. Wir erkennen einen breiten Peak/Dip bei etwa  $\pm 100$  meV. Bei 4.2 K erkennen wir ferner eine scharfe Struktur bei 17 meV, deren Form bis zu 1 K unverändert bleibt. Den Peak bei etwa 100 meV, den wir am besten bei den 77 K Daten sehen, wurde auch in Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Al Tunnelkontakten beobachtet und einer Al-O Streckschwingung zugeordnet. Die Struktur bei 17 meV (sehr deutlich bei 1 K) wird durch Magnonen, die in den Kontaktelektroden erzeugt werden, verursacht.

### 7.7.2 Inelastisches Tunneln mit Wechselwirkungsprozessen in den Tunnelelektroden

Inelastisches Tunneln kann auch durch die Kopplung der tunnelnden Elektronen an kollektive Moden (z.B. Phononen, Magnonen, Plasmonen) in den metallischen Elektroden verursacht werden. Um zwischen Anregungsmoden in der Barriere und in den Elektroden zu unterscheiden, muss man das Barrieren- oder Elektrodenmaterial variieren. Außerdem sind z.B. die charakteristischen Anregungsenergien für Phononen in Metallen meist wesentlich niedriger als in Isolatoren. Ein Beispiel für den Nachweis von Magnonenanregung in den ferromagnetischen Elektroden eines Tunnelkontakts wurde bereits in Abb. 7.49 gezeigt.

Durch die Wechselwirkung von tunnelnden Elektronen mit kollektiven Plasmaoszillationen, können optisch gekoppelte Oberflächenplasmonen angeregt werden, wodurch breitbandige Lichtemission im sichtbaren Bereich erzielt werden kann. Die kurzwellige Abschneidefrequenz wird dabei durch die angelegte Spannung über  $\hbar\omega = eU$  bestimmt.

### 7.7.3 Tunneln über Zwischenzustände – Glazmann-Matveev Modell

Bei der Behandlung des elastischen Tunnelns wurde immer eine ideale Barriere angenommen, die keine Defekte besitzt. Dies ist für reale Barrieren eigentlich nie der Fall. Die Barriere enthält

<sup>98</sup>D. C. Tsui *et al.*, Phys. Rev. Lett. **27**, 1729 (1971).

<sup>99</sup>J. S. Moodera *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 2941 (1998).

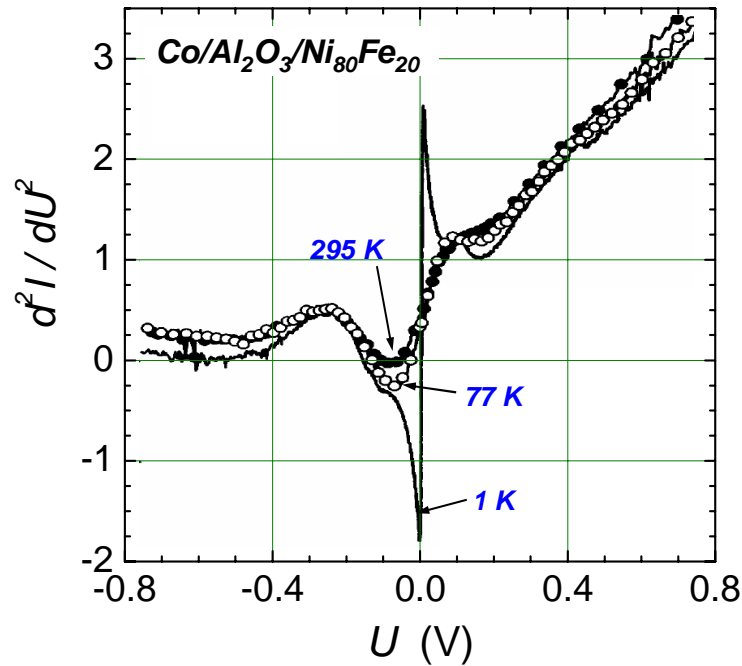


Abbildung 7.49: IETS Spektren bei drei unterschiedlichen Temperaturen für einen  $\text{Co}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$  Tunnelkontakt gemessen bei  $H = 0$  (nach J. S. Moodera *et al.*, Phys. Rev. Lett. 80, 2941 (1998)).

vielmehr eine endliche Dichte von Defektzuständen, die ganz wesentlich zum Tunnelstrom beitragen können. Solche Defektzustände entstehen in oxidischen Tunnelbarrieren z.B. sehr häufig durch Sauerstofffehlstellen. Bei einer genügend großen Dichte  $n_L$  der lokalisierten Defektzustände (LS: localized states) ist es denkbar, dass Elektronen über mehrere, energetisch dicht beieinanderliegende LS tunneln. Die Energiedifferenz zwischen zwei beim Tunnelprozess benachbarten Zuständen muss dann dem elektrischen Feld oder der Umgebung (thermische Energie  $k_B T$ ) entzogen werden bzw. an diese abgegeben werden. Diese Art von Tunneln nennen wird inelastisches Mehrstufentunneln. In Abb. 7.50 sind die relevanten elastischen und inelastischen Tunnelkanäle schematisch dargestellt. Zusätzlich zu den beiden elastischen Tunnelkanälen (direktes Tunneln und Tunneln über einen Zwischenzustand) gibt es noch eine Vielzahl von inelastischen Kanälen, wobei der Tunnelprozess über  $n \geq 2$  Zwischenzustände erfolgt.

**Glazman und Matveev** (GM) haben im Jahr 1988 eine Theorie zur Beschreibung des Mehrstufentunnelns über Zwischenzustände entwickelt.<sup>100</sup> Sie zeigten, dass mit zunehmender Temperatur oder Kontaktspannung der Tunnelstrom über die inelastischen Kanäle stark zunimmt. Dies ist anschaulich klar, da mit zunehmendem  $T$  oder  $U$  die vorhandene Energie ( $k_B T$  bzw.  $eU$ ) zunimmt und somit immer mehr inelastische Kanäle zugänglich werden. Die unter Berücksichtigung aller möglicher Tunnelkanäle erhaltene Gesamttunnelleitfähigkeit ist durch

$$G(U, T) = \sum_{n=0}^{\infty} G_n \quad (7.7.2)$$

gegeben, die sich aus den einzelnen Leitfähigkeiten

$$G_n = \frac{A\kappa}{d} \left( \frac{gdeUn^2}{\kappa^2} \right)^n \left[ \left( \frac{E_0}{eU} \right) \lambda^{(n-1)/2} \exp(-\kappa d) \right]^{2/(n+1)} \quad (7.7.3)$$

<sup>100</sup>L. I. Glazman, K. A. Matveev, Sov. Phys. JETP 67, 1276 (1988).

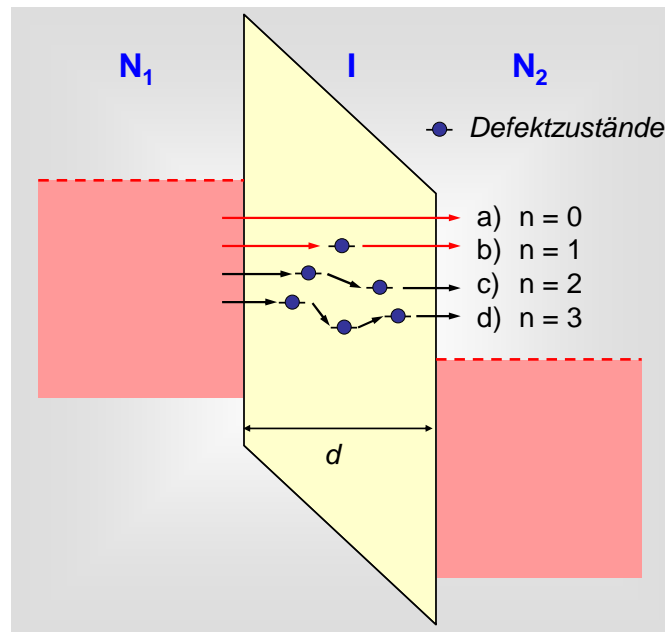


Abbildung 7.50: Mögliche elastische (a und b) und inelastische Tunnelkanäle (c und d) beim Tunneln durch eine Barriere mit einer großen Zahl von Defektzuständen.

der einzelnen Leitungskanäle über jeweils  $n$  lokalisierte Zustände zusammensetzt. Hierbei ist  $g$  die Dichte der lokalisierten Zustände pro Energie,  $E_0$  die energetische Tiefe der lokalisierten Zustände in der Barriere,  $\lambda$  ein dimensionsloser Elektron-Phonon Kopplungsparameter und  $1/\kappa = \sqrt{\hbar^2/2m\phi^*}$  die Lokalisierungslänge eines lokalisierten Zustands. Diese Größe entspricht der räumlichen Ausdehnung eines Zustands und berechnet sich aus der lokalen Barrierenhöhe  $\phi^*$ , die für das Tunneln eines Elektrons aus einem lokalisierten Zustand heraus entscheidend ist. Der Faktor  $A\kappa/d$  gibt die Zahl der statistisch unabhängigen Leitungskanäle in der Barriere mit der Gesamtfläche  $A$  an, wobei der Faktor  $(gdeUn^2/\kappa^2)^n$  die Wahrscheinlichkeit für die Bildung eines solchen Kanals angibt. Der Transport von Elektronen durch inkohärentes sukzessives Tunneln entlang eines Leitungskanals mit  $n$  lokalisierten Zuständen kann als eine effektive Reihenschaltung von  $n - 1$  Widerständen mit einer charakteristischen Leitfähigkeit  $[(E_0/eU)\lambda^{(n-1)/2} \exp(-\kappa d)]^{2/(n+1)}$  aufgefasst werden.

Werten wir (7.7.3) für einige wichtige Grenzfälle aus, so sehen wir, dass

$$G_n(U) = a_n \cdot U^{n - \frac{2}{n+1}}, \quad \text{für } eU \gg k_B T, \quad (7.7.4)$$

$$G_n(T) = b_n \cdot T^{n - \frac{2}{n+1}}, \quad \text{für } eU \ll k_B T, \quad (7.7.5)$$

wobei  $a_n, b_n \propto \exp[-2\kappa d/(n+1)]$  Konstanten sind, die vom Radius  $1/\kappa$  der lokalisierten Zustände und deren Dichte  $n_L$  sowie von der Barrierendicke  $d$  abhängen. Wir sehen, dass die Transportkanäle mit großem  $n$  eine wesentlich schwächeres exponentielles Abklingen zeigen. Deshalb werden diese Kanäle häufig, auch wenn die Dichte der lokalisierten Zustände klein ist, bei großer Barrierendicke dominant und tragen wesentlich zum Tunnelstrom bei. Es sei noch darauf hingewiesen, dass die obigen Ausdrücke nur gültig sind, solange  $eU$  und  $k_B T$  klein gegenüber der Barrierenhöhe sind. Da üblicherweise die Barrierenhöhen im eV-Bereich liegen, können die GM-Ausdrücke für Temperaturen bis weit oberhalb von Raumtemperatur und Spannungen bis einige 100 mV verwendet werden.

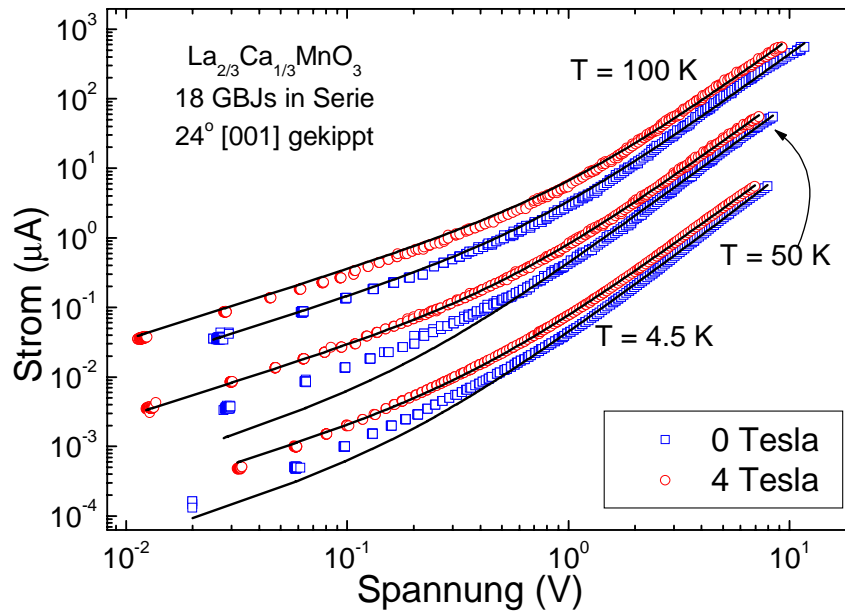


Abbildung 7.51: Strom-Spannungs-Charakteristiken von  $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$  Korngrenzkontaktungen bei  $T = 4.5, 50,$  und  $100$  K für  $H = 0$  und  $4$  T geplottet auf einer doppeltlogarithmischen Skala. Die  $50$  und  $100$  K Kurven sind vertikal versetzt. Die Linien sind Fits mit der GM-Theorie (aus J. Klein et al., *Europhys. Lett.* **47**, 371 (1999)).

Durch Messung von  $G(T)$  bei sehr kleinen Spannungen ( $eU \ll k_B T$ ) oder von  $G(U)$  bei sehr kleinen Temperaturen ( $k_B T \ll eU$ ) können aus den gemessenen  $G(T)$  oder  $G(U)$  Abhängigkeiten einfach durch Fitten mit (7.7.4) und (7.7.5) die einzelnen Leitfähigkeiten  $G_0, G_1, G_2, \dots$  bestimmt werden. Dabei müssen üblicherweise nur Terme bis zu  $n = 2$  oder  $n = 3$  berücksichtigt werden. Ein typisches Beispiel ist in Abb. 7.51 gezeigt. Wir sehen, dass die gemessenen IVCs sehr gut mit Hilfe des GM-Modells über mehrere Größenordnungen richtig beschrieben werden können. Das heißt, in den im gezeigten Beispiel untersuchten Manganat-Korngrenzkontakten resultiert in der Tat ein beträchtlicher Anteil des Tunnelstroms aus inelastischem Tunneln über Defektzustände in der Barriere.

Bei einer nicht allzu hohen Dichte der Defektzustände in der Tunnelbarriere und einer nicht allzu großen Barrierendicke muss meist nur der Beitrag des  $n = 2$  Kanals berücksichtigt werden. Damit erwartet man für die Temperatur- und Spannungsabhängigkeit der Tunnelleitfähigkeit in den obigen Grenzfällen  $G(T) \propto T^{4/3}$  bzw.  $G(U) \propto U^{4/3}$ . Solche Abhängigkeiten werden in der Tat häufig beobachtet.

Aus dem Fit der experimentellen Daten in Abb. 7.51 können die einzelnen  $G_n$  und damit die Beiträge  $G_{\text{el}}$  und  $G_{\text{in}}$  der elastischen und inelastischen Tunnelkanäle zur Gesamtleitfähigkeit quantitativ bestimmt werden, die wie folgt definiert sind

$$G(U, T) = G_{\text{el}} + G_{\text{in}} \quad (7.7.6)$$

$$\text{mit} \quad G_{\text{el}} = G_0 + G_1 \quad (7.7.7)$$

$$\text{und} \quad G_{\text{in}}(U, T) = \sum_{n=2}^{\infty} G_n(U, T) . \quad (7.7.8)$$

Es soll nun diskutiert werden, welche Auswirkung der inelastische Tunnelstrom auf den TMR Effekt von ferromagnetischen Tunnelkontakten hat. Hierzu nehmen wir zunächst vereinfachend an, dass der inelastische Tunnelstrom vollkommen spinunabhängig sein soll. Diese Annahme ist gültig, wenn die Spinorientierung der tunnelnden Elektronen beim Tunneln über die

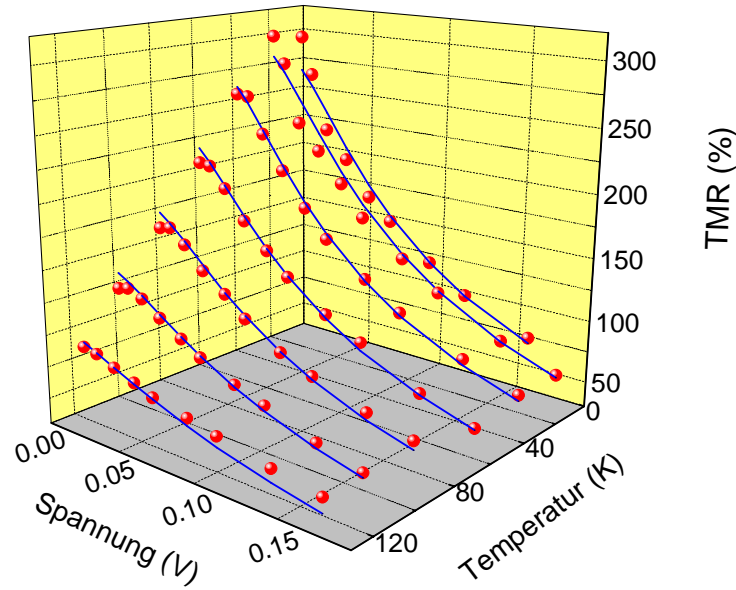


Abbildung 7.52: TMR aufgetragen gegen die Kontaktspannung und die Temperatur für einen  $24^\circ$  [001] verkippten tilt  $\text{La}_{2/3}\text{Ca}_{1/3}\text{MnO}_3$  Korngrenzenkontakt. Die Linien zeigen  $\frac{G_{\text{el}}^{\text{ap}}}{G_{\text{el}}^{\text{ap}} + G_{\text{in}}} \text{TMR}_{\text{Jullière}}(T)$ , wobei  $\frac{G_{\text{el}}^{\text{ap}}}{G_{\text{el}}^{\text{ap}} + G_{\text{in}}}$  aus den gemessenen IVCs bestimmt wurde und  $\text{TMR}_{\text{Jullière}}(T)$  so gewählt wird, dass die Kurve auf den Datenpunkten liegt (nach C. Höfener *et al.*, *Europhys. Lett.* 50, 681 (2000)).

inelastischen Transportkanäle verlorengelht. Dies ist z.B. dann der Fall, wenn die lokalisierten Zustände starke Spinstreuer sind. Im Rahmen des in Abschnitt 7.6.2 diskutierten Drei-Kanal-Modells bedeutet dies, dass die spinunabhängige Leitfähigkeit  $G_{\text{SI}}$  der Leitfähigkeit  $G_{\text{in}}$  der inelastischen Transportkanäle gleichgesetzt werden kann. Aus (7.6.2) und (7.6.4) erhalten wir dann

$$\text{JMR} = \frac{2P_1P_2}{(1 - P_1P_2)} \frac{G_{\text{el}}^{\text{ap}}}{G_{\text{el}}^{\text{ap}} + G_{\text{in}}} \quad (7.7.9)$$

und

$$\text{TMR} = \frac{2P_1P_2}{(1 + P_1P_2)} \frac{G_{\text{el}}^{\text{ap}}}{G_{\text{el}}^{\text{ap}} + G_{\text{in}}} \quad (7.7.10)$$

Es ist evident, dass der JMR- bzw. der TMR-Effekt durch einen endlichen Beitrag der inelastischen Tunnelkanäle reduziert wird. Nehmen wir an, dass der inelastische Beitrag klein ist und nur der  $n = 2$  Kanal einen wesentlichen Beitrag zum inelastischen Tunnelstrom liefert, so folgt mit  $G(T) \propto T^{4/3}$  bzw.  $G(U) \propto U^{4/3}$  die Abhängigkeiten  $\text{TMR}(T) \propto 1 - \alpha T^{4/3}$  bzw.  $\text{TMR}(U) \propto 1 - \beta U^{4/3}$ .

Mit Hilfe des GM-Modells und (7.7.9) bzw. (7.7.10) können wir direkt durch Analyse der experimentellen Daten überprüfen, inwieweit die inelastischen Tunnelkanäle tatsächlich spinunabhängig sind. Dazu bestimmen wir zunächst die Beiträge  $G_{\text{el}}^{\text{ap}}$  und  $G_{\text{in}}(T, U)$  durch Analyse der gemessenen IVCs für antiparallele Magnetisierungsorientierung mit Hilfe der GM-Theorie. So kann aus den in Abb. 7.51 gezeigten Fit-Kurven für  $H = 0$  sofort  $G_{\text{el}}^{\text{ap}}$  sowie  $G_{\text{in}}(U)$  für die verschiedenen Temperaturen bestimmt werden. Wir nehmen nun für die gleiche Probe  $R(H)$  Kurven bei verschiedenen Messspannungen auf und bestimmen daraus  $\text{TMR}(U)$  bei konstanter Temperatur. Aus (7.7.10) folgt aber, dass  $\text{TMR}(U) \propto \frac{G_{\text{el}}^{\text{ap}}}{G_{\text{el}}^{\text{ap}} + G_{\text{in}}}$ , wobei die Proportionalitätskonstante durch den Jullière-Wert des TMR gegeben ist. In Abb. 7.52 ist  $\text{TMR}(U)$  und

$\frac{G_{\text{el}}^{\text{ap}}}{G_{\text{el}}^{\text{ap}} + G_{\text{in}}}$  für verschiedene Temperaturen aufgetragen. Wir sehen, dass die beiden Größen, wie entsprechend (7.7.10) erwartet, sehr gut miteinander skalieren. Daraus können wir ableiten, dass die oben gemachte Annahme, dass der gesamte inelastische Tunnelstrom spinunabhängig ist, für die Manganat-Korngrenzenkontakte gut zutrifft.

Der einzige Fitparameter in Abb. 7.52 ist die Größe  $\text{TMR}_{\text{Jullière}}(T)$ , die für den Manganat-Korngrenzenkontakt bei 4.2 K etwa 300% beträgt, was einer Spinpolarisation von knapp 80% entspricht. Wir sehen aber, dass  $\text{TMR}_{\text{Jullière}}(T)$  mit der Temperatur stark abnimmt. Eine solche Abnahme wird sowohl aufgrund des spinunabhängigen inelastischen Tunnelstroms als auch durch eine Abnahme der Spinpolarisation erwartet. Es sei hier darauf hingewiesen, dass durch eine Messung von  $G(T)$  und  $\text{TMR}(T)$  bei konstanter (kleiner) Kontaktspannung eine ähnliche Datenanalyse unter Benutzung von (7.7.5) und (7.7.10) gemacht werden kann. Hierbei tritt aber das Problem auf, dass man die Änderung der Spinpolarisation als Funktion der Temperatur nicht genau kennt und deshalb eine Analyse im Rahmen des GM-Modells schwierig wird. Dieses Problem hat man bei der Analyse von  $G(U)$  und  $\text{TMR}(U)$  für konstante Temperatur nicht.

Die obige Analyse für den Manganat-Korngrenzenkontakt zeigt, dass für diesen Tunnelkontakt die starke Abnahme des TMR mit der Spannung (und teilweise auch mit der Temperatur) durch eine schlechte Tunnelbarriere mit einer hohen Dichte von lokalisierten Defektzuständen verursacht wird, die zu einem großen spinunabhängigen, inelastischen Tunnelstrom führt. Wir können daraus folgern, dass die Spannungs- und Temperaturabhängigkeit des TMR wesentlich reduziert werden kann, indem wir die Tunnelbarriere verbessern.

Die GM-Theorie macht mit (7.7.3) nur qualitative Aussagen über die  $T$ - und  $U$ -Abhängigkeit der Tunnelleitfähigkeit, weshalb durch Vergleich der gemessenen Leitfähigkeit mit (7.7.3) leider nicht die Dichte der lokalisierten Zustände bestimmt werden kann. Nur für elastisches, resonantes Tunneln über einen lokalisierten Zustand ( $n = 1$ ) liefert die Theorie von **Larkin** und **Matveev**<sup>101</sup> quantitative Aussagen. Danach ist die resonante Tunnelleitfähigkeit gegeben durch

$$G_1 = \frac{\pi^2 g A}{\kappa} \Gamma_L \left( \frac{e^2}{\pi \hbar} \right) = N_{\text{res}} \frac{e^2}{\pi \hbar} \propto \left( \frac{e^2}{\pi \hbar} \right) \exp(-\kappa d), \quad (7.7.11)$$

wobei  $\frac{e^2}{\pi \hbar}$  die Leitfähigkeit eines eindimensionalen Leitungskanal und  $N_{\text{res}}$  die effektive Zahl der am Tunnelprozess beteiligten Leitungskanäle über einen LS mit der Kopplungsenergie  $\Gamma_L = E_0 \exp(-\kappa d)$  ist.  $\Gamma_L = \hbar/\tau$  ist proportional zur Rate  $1/\tau$  mit der Elektronen in den LS mit den angrenzenden Tunnelelektroden ausgetauscht werden und entspricht der energetischen Breite eines LS.

Es ist wichtig darauf hinzuweisen, dass die effektive Zahl der eindimensionalen Tunnelkanäle nicht gleichbedeutend mit der gesamten Zahl der LS in der Barriere, sondern vielmehr durch den Teil der LS bestimmt wird, der sich in einer Schicht der Breite  $1/\kappa$  in der Mitte der Barriere im Energieintervall  $\Gamma_L$  um die Fermi-Energie befindet.

Auch für den direkten elastischen Tunnelprozess ( $n = 0$  Kanal) lässt sich natürlich eine absolute Größe der Leitfähigkeit angeben, die gerade der Leitfähigkeit nach (7.1.39) für  $U \rightarrow 0$  entspricht. Schreiben wir (7.1.39) um, so erhalten wir

$$G_0 = \frac{1}{4} \frac{A \kappa}{d} \left( \frac{e^2}{\pi \hbar} \right) \exp(-2\kappa d). \quad (7.7.12)$$

<sup>101</sup>A. I. Larkin, K. A. Matveev, Sov. Phys. JETP **66**, 580 (1987).

## 7.8 Vertiefungsthema: Tunneln durch ferromagnetische Barrieren – Spinfilter

Eine endliche Spinpolarisation des Tunnelstroms kann selbst dann beobachtet werden, wenn die verwendeten Tunnelelektroden aus nichtmagnetischen Materialien bestehen, aber eine magnetische Tunnelbarriere wie z.B. EuS verwendet wird. EuS ist ein ferromagnetischer Halbleiter mit einer Curie-Temperatur von  $T_C = 16.6\text{ K}$  und einer Bandlücke von  $1.65\text{ eV}$ . Unterhalb von  $T_C$  spaltet das Leitungsband durch die ferromagnetische Austauschkopplung von  $\Delta E_{\text{ex}} = 0.36\text{ eV}$  bei  $4.2\text{ K}$  in  $\uparrow$ - und  $\downarrow$ -Subbänder auf. Verwenden wir EuS als Tunnelbarriere in einem Tunnelkontakt, so spaltet deshalb auch die Barrierenhöhe für die beiden Spinrichtungen unterhalb von  $T_C$  auf (siehe Abb. 7.53)

$$\phi_{\uparrow,\downarrow} = \phi_0 \pm \Delta E_{\text{ex}}/2. \quad (7.8.1)$$

Hierbei ist  $\phi_0$  die mittlere Barrierenhöhe oberhalb von  $T_C$ . Da der Tunnelstrom exponentiell von der Barrierenhöhe abhängt, erhält man eine stark unterschiedliche Tunnelwahrscheinlichkeit für die Spin  $\uparrow$ - und Spin  $\downarrow$ -Elektronen. Eine Barriere, die aus einem ferromagnetischen Isolator oder Halbleiter besteht, stellt deshalb einen sehr effektiven *Spinfilter* dar.

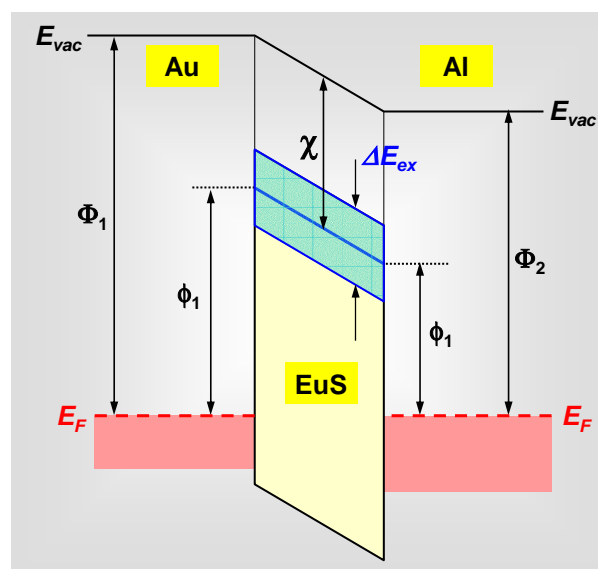


Abbildung 7.53: Schematische Darstellung der Tunnelbarriere eines Au/EuS/Al-Tunnelkontakts ( $\Phi_1$ ,  $\Phi_2$ : Austrittsarbeit von Au und Al,  $\chi$ : Elektronenaffinität von EuS). Die Barrierenhöhen  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  sind für  $T > T_C$  dargestellt. Bei  $T < T_C$  spalten diese um den Betrag  $\Delta E_{\text{ex}}$  für die beiden Spinrichtungen auf.

In Abb. 7.54 ist ein typisches Ergebnis für einen Au/EuS/Al-Tunnelkontakt gezeigt. Die normierte Tunnelleitfähigkeit  $G_{\text{SN}}/G_{\text{NN}}$  bei  $T = 0.5\text{ K}$  (0 T-Kurve) zeigt vor Anlegen eines externen Magnetfeldes  $H$  eine kleine Spinaufspaltung, die einem inneren Feld von  $B_i^* = 0.5\text{ T}$  entspricht. Diese Aufspaltung steigt stark mit dem angelegtem Magnetfeld an. Nachdem das Feld wieder auf Null gefahren wurde (0' T-Kurve), zeigt sich eine (gegenüber der 0 T-Kurve wesentlich stärkere) remanente Aufspaltung im Nullfeld, die einem inneren Feld von  $B_i^* = 2\text{ T}$  entspricht.  $B^*$  übersteigt deutlich die Sättigungsmagnetisierung von EuS ( $M_s = 1.5\text{ T}$ ) (siehe Inset in Abb. 7.54). Diese Beobachtung ist ein klarer Beleg dafür, dass die Aufspaltung der Zustandsdichte des Supraleiters durch den Austausch-Proximity-Effekt (siehe Abschnitt 7.9) verursacht wird und nicht direkt durch das remanente Magnetfeld des Ferromagneten.

Die Polarisation  $P_{\text{meas}}$  kann analog zu Abschnitt 7.3.2 bestimmt werden und liefert  $P_{\text{meas}} = 80 \pm 5\%$ . Der höchste Wert  $P_{\text{meas}} = 85\%$  wurde in einem Ag/EuS/Al-Kontakt mit sehr großem



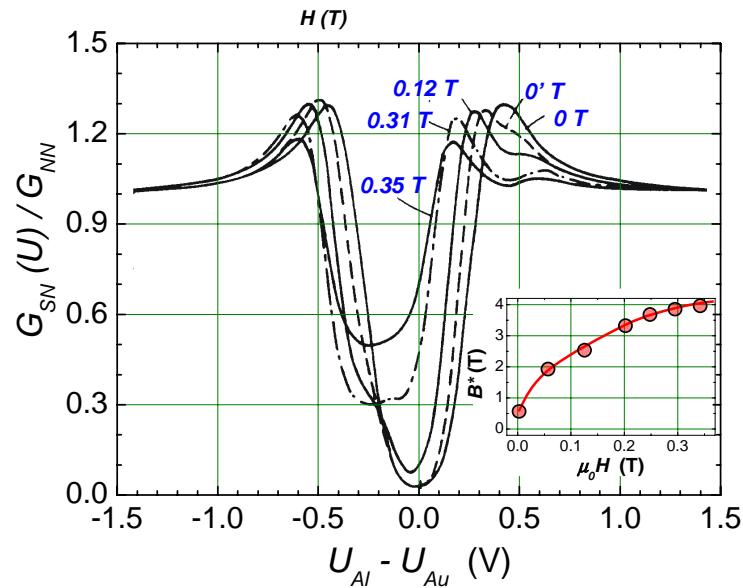


Abbildung 7.54: Normierte Leitfähigkeit ( $G_{\text{SN}}/G_{\text{NN}}(U)$ ) in verschiedenen Magnetfeldern für einen Au/EuS/Al-Tunnelkontakt. Die Kurve im Nullfeld (0 T) zeigt eine kleine Spinaufspaltung aufgrund des internen Magnetfeldes  $B_i^* = 0.5\text{T}$ . Die remanente Zeeman-Aufspaltung (0' T-Kurve) liefert  $B_i^* = 2\text{T}$ . Das Inset zeigt die Abhängigkeit des internen Magnetfeldes  $B^*$  vom angelegten Magnetfeld  $H$ . Die Sättigungsmagnetisierung von EuS,  $4\pi M_0 = 1.5\text{T}$ , ist durch einen Pfeil angedeutet (nach Meservey und Tedrow, Physics Reports 238, 173 (1994)).

$B_i^* = 3\text{T}$  gemessen. In Tabelle 7.3 sind experimentell ermittelte Werte von  $P_{\text{meas}}$  für die Spinpolarisation zusammengestellt.

Kontakttyp	$P_{\text{meas}}$ (%)	$P_{\text{calc}}$ (%)	$R(2\text{K})/R(35\text{K})$	$d$ (nm)	$\phi_0$ (eV)
Au/EuS/Al	$80 \pm 5$	84.9	0.51	17.8	1.56
Ag/EuS/Al	$85 \pm 5$	90.8	0.40	19.8	1.32
Al/EuS/Al	$85 \pm 5$	91.6	0.38	20.4	1.32
Al/EuS/Al	$85 \pm 5$	92.6	0.36	21.9	1.42
Al/EuS/Al	$60 \pm 5$	80.4	0.58	17.6	1.96

Tabelle 7.3: Vergleich der Werte für die Spinpolarisation von verschiedenen Tunnelkontakten mit EuS-Barriere.  $P_{\text{meas}}$  wurde aus der Asymmetrie der  $G(U)$ -Kurven ermittelt;  $P_{\text{calc}}$  wurde mit (7.1.39) unter Verwendung von  $\Delta E_{\text{ex}} = 0.36\text{eV}$  berechnet.

Eine alternative Analyse zur Bestimmung der Spinpolarisation (in Tab. 7.3 mit  $P_{\text{calc}}$  bezeichnet) folgt aus dem Anfitzen der gemessenen Tunnelkennlinien an Gleichung (7.1.39). Nehmen wir die Tunnelkennlinie bis zu mittleren Spannungen auf, so kann aus den Kennlinien die mittlere Barrierenhöhe und -dicke bestimmt werden. Die erhaltenen Werte sind für einige Tunnelkontakte ebenfalls in Tab. 7.3 aufgelistet. Für  $T \ll T_C$  ist das Leitungsband der EuS-Barriere durch die Austauschwechselwirkung um  $\Delta E_{\text{ex}}$  aufgespalten. Damit verändern sich die Barrierenhöhen für die Spin  $\uparrow$ - und Spin  $\downarrow$ -Elektronen gemäß  $\phi_{\uparrow} = \phi_0 - \frac{1}{2}\Delta E_{\text{ex}}$  und  $\phi_{\downarrow} = \phi_0 + \frac{1}{2}\Delta E_{\text{ex}}$ . Mit 7.1.39 und dem aus optischen Messungen ermittelten Wert  $\Delta E_{\text{ex}} = 0.36\text{eV}$  können somit die Tunnelstromdichten  $J_{\uparrow}$  und  $J_{\downarrow}$  berechnet werden. Für die berechnete Polarisation gilt dann

$$P_{\text{calc}} = \frac{J_{\uparrow} - J_{\downarrow}}{J_{\uparrow} + J_{\downarrow}}. \quad (7.8.2)$$

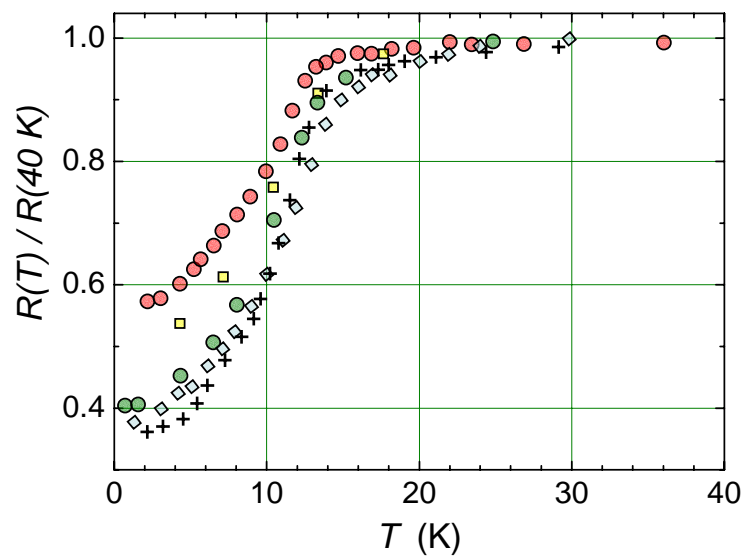


Abbildung 7.55: Tunnelwiderstand  $R(T)/R(40\text{ K})$  für verschiedene Tunnelkontakte mit EuS-Barriere (nach Meservey und Tedrow, Physics Reports 238, 173 (1994)).

Aus der Austauschspaltung von EuS resultiert eine beträchtliche Verringerung des Tunnelwiderstands beim Übergang zu Temperaturen unterhalb von  $T_C$  (siehe Abb. 7.55). Aus 7.1.39 folgt für den (auf 40 K) normierten Tunnelwiderstand

$$\frac{R(T)}{R(40\text{ K})} = \frac{J_{\uparrow}(40\text{ K}) + J_{\downarrow}(40\text{ K})}{J_{\uparrow}(T) + J_{\downarrow}(T)} \quad (7.8.3)$$

Die nach 7.8.3 berechneten Werte sind in guter Übereinstimmung mit den gemessenen Werten.

## 7.9 Vertiefungsthema: Austauscheffekte an Grenzflächen zu Ferromagneten

Im Zusammenhang mit dem spinabhängigen Transport von Ladungsträgern durch Tunnelbarrieren, bzw. über Grenzflächen spielen eine Reihe von so genannten Austauscheffekten eine Rolle, die beim Kontakt von ferromagnetischen mit supraleitenden oder normalleitenden Schichten auftreten. Diese Effekte können die Messungen zum spinpolarisierten Tunneln signifikant beeinflussen und werden daher im Folgenden kurz skizziert. Da die Effekte durch den direkten Kontakt einer ferromagnetischen Schicht mit einer normalleitenden oder supraleitenden Schicht verursacht werden, werden sie auch *Proximity-Effekte* genannt.<sup>102</sup>

Es ist allgemein bekannt, dass die Tunnelleitfähigkeit von Supraleiter/Isolator/Supraleiter (SIS) Kontakten (z.B. Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Al-Kontakten) auch im Magnetfeld bei tiefen Temperaturen nur zwei scharfe Maxima in der  $G(U)$ -Abhängigkeit bei  $U = \pm 2\Delta/e$  zeigt (siehe Abb. 7.56). Dies resultiert daraus, dass die Spin-Aufspaltung für beide supraleitende Elektroden identisch ist.

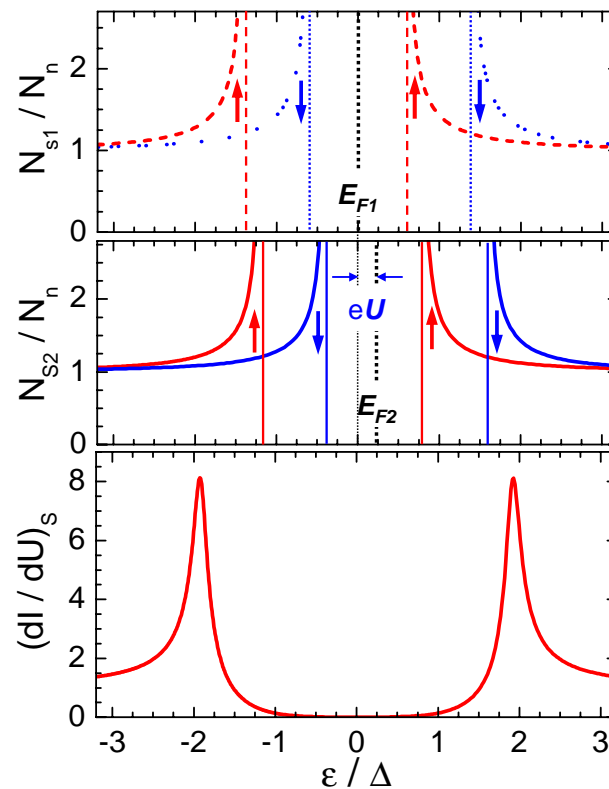


Abbildung 7.56: Zustandsdichten von zwei identischen Supraleitern im Magnetfeld (mit Zeeman-Aufspaltung), die bei angelegter Spannung  $U$  um  $eU$  gegeneinander verschoben sind. Die zugehörige Tunnelkennlinie (unten) zeigt scharfe Maxima gerade für  $U/e = 2\Delta$  (wenn der Einfluss des Magnetfeldes auf die Energielücke vernachlässigt werden kann).

Wir betrachten nun einen SIS/F-Kontakt, bei dem die eine supraleitende Elektrode in direktem Kontakt mit einem Ferromagneten ist. Dieser direkte Kontakt eines Supraleiters mit einem Ferromagneten führt zum so genannten *Austausch-Proximity-Effekt*. Ist der supraleitende Film sehr dünn, so verhält er sich im Kontakt mit dem Ferromagneten so wie ein

<sup>102</sup> Ferromagnetische Ordnung und Supraleitung sind hierbei sich ausschließende Effekte. In Spin-Singulett-Supraleitern findet eine Paarwechselwirkung zwischen Elektronen mit entgegengesetztem Spin statt (Cooper-Paare mit Gesamtspin Null).

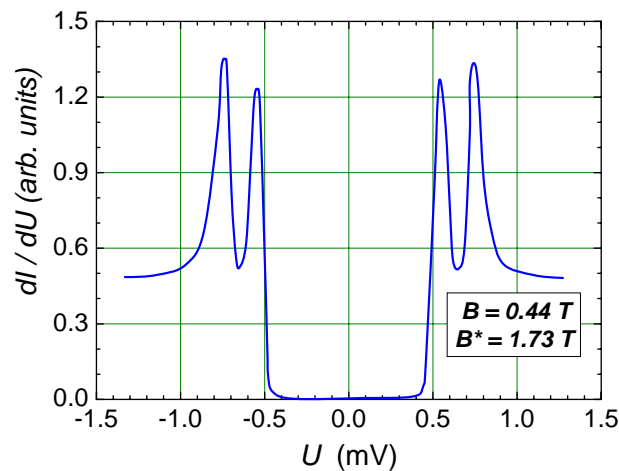


Abbildung 7.57: Tunnelleitfähigkeit  $G(U)$  eines EuO-Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Al-Kontakts in einem äußeren Magnetfeld  $B=0.44$  T mit zusätzlicher Aufspaltung im effektiven Austauschfeld  $B^*=1.73$ T.

BCS-Supraleiter in einem homogenen Austauschfeld. Dies wurde in Experimenten an EuO-Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Al (oder Ag, Fe) gezeigt. Mit einer EuO-Schicht (5 nm dicke Eu-Schicht, oxidiert) unter der unteren Al-Elektrode (4-10 nm dick) zeigt die Tunnelleitfähigkeit in einem äußeren Feld  $B = 0.44$  T eine Aufspaltung, die einer Spin-Aufspaltung der EuO-Al-Elektrode in einem Feld  $B + B^* = 0.44$  T + 1.73 T entspricht (siehe Abb. 7.57). Die Präsenz von EuO bewirkt also eine zusätzliche Aufspaltung der Zustandsdichte der unteren Al-Elektrode um  $2\mu B^*$ , die einem effektiven Feld von  $B^* = 1.73$  T entspricht.<sup>103</sup> Dieser Effekt wird auf eine Austauschwechselwirkung zwischen den Al-Leitungselektronen und dem EuO-Moment an der EuO-Al-Grenzfläche zurückgeführt. Die RKKY-Wechselwirkung (siehe Abschnitt 2.3.5) an der Grenzfläche führt zu einer Spinpolarisation der Leitungselektronen, die über die Fermi-Wellenlänge an der Grenzfläche abfällt. Da die Fermi-Wellenlänge von Metallen in der Größenordnung der Gitterkonstanten ist, nimmt mit steigender Dicke der Al-Elektrode dieser Effekt schnell ab.

Eine nur 2 nm dicke Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Zwischenschicht an der EuO-Al-Grenzfläche zerstört den Austausch effekt, da hierdurch die Transmission an der EuO-Al Grenzfläche stark verringert wird und deshalb der Austausch effekt stark unterdrückt wird. Der Austausch effekt sollte prinzipiell auch ohne externes Magnetfeld  $B$  existieren. Er wurde allerdings an den Kontakten mit EuO-Al Elektrode nicht beobachtet. Eine mögliche Erklärung für diese Tatsache ist die Auslöschung von  $B^*$  aufgrund von Domänenbildung in EuO oder die Störung der ferromagnetischen Ordnung in EuO durch Bildung von nicht-ferromagnetischem Eu<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Vergleichbare Experimente mit einer EuS-Al-Elektrode ergaben eine Aufspaltung der Zustandsdichte des Supraleiters selbst in  $B=0$  T. Der Anstieg dieser Aufspaltung mit steigendem  $B$  deutet aber auch hier auf eine Domänenbildung in EuS hin. Experimente mit Seltenen Erden anstelle von Seltenen Erd-Oxiden zeigen eine wesentlich stärkere Verschmierung der Zustandsdichten aufgrund von Spin-Flip-Streuung. Die Spin-Flip-Streureate  $\tau_{ex}^{-1} \propto cJ^2$  ( $J$ : Austauschkonstante) steigt u.a. mit der Konzentration  $c$  der magnetischen Momente an, die in den Oxiden deutlich niedriger ist und damit eine geringere Rolle spielt.

Tunnelexperimente an S/I/F/S-Kontakten, d.h. an Kontakten mit einer ferromagnetischen Schicht zwischen Tunnelbarriere und supraleitender Elektrode (z.B. Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Gd-Al) ermöglichen die Bestimmung der Spinpolarisation der Leitungselektronen aufgrund der RKKY-Wechselwirkung, wenn die Gd-Al-Elektrode normalleitend ist (man erhält asymmetri-

<sup>103</sup> Das effektive Feld  $B^*$  bewirkt allerdings keine zusätzliche Verschmierung der Zustandsdichten aufgrund von Depairing.

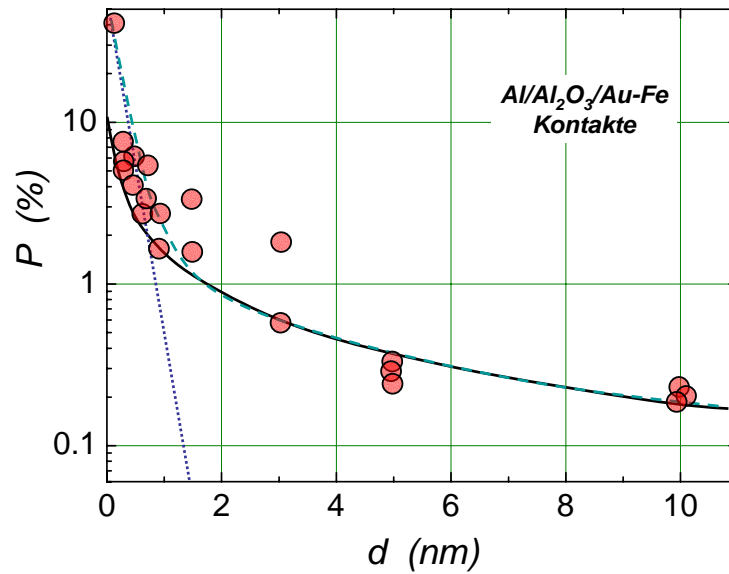


Abbildung 7.58: Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Au-Fe-Kontakte: gemessene Spinpolarisation  $P$  in Au aufgetragen gegen die Au-Schichtdicke  $d$ .

sche Kennlinien wie im Fall eines S/I/F-Kontakts (siehe Abschnitt 7.3.2).

Wir betrachten schließlich noch S/I/N/F-Kontakte. Der Austausch-Proximity-Effekt führt hier ebenfalls zu einer Spinpolarisation der Leitungselektronen des paramagnetischen Metalls, das sich im Kontakt mit einer ferromagnetischen Schicht befindet. Dies wurde durch Messung der Spinpolarisation in Al/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Au-Fe-Kontakten nachgewiesen. Eine systematische Variation der Au-Schichtdicke  $d_{Au}$  ergab eine mit zunehmendem  $d_{Au}$  abnehmende Spinpolarisation, die bis zu  $d_{Au} = 10$  nm nachweisbar war (siehe Abb. 7.58).

## 7.10 Spinpolarisation: Theorie vs. Experiment

In den vorangegangenen Abschnitten haben wir eine Definition der Spinpolarisation in Ferromagneten gegeben und experimentelle Methoden (spinpolarisiertes Tunneln, Andreev-Reflexion) vorgestellt, mit deren Hilfe der Grad der Spinpolarisation bestimmt werden kann. Dabei haben wir bereits darauf hingewiesen, dass der in einem bestimmten Experiment bestimmte Grad der Spinpolarisation häufig nichts mit der ursprünglichen Definition (7.3.3) der Spinpolarisation zu tun hat. Ohne Zweifel stellen die verschiedenen Formen des spinpolarisierten Tunnelns wichtige Informationen über die Spinabhängigkeit der elektronischen Struktur von Ferromagneten zur Verfügung. Diese Information ist aber hinsichtlich der Bestimmung des Grades der Spinpolarisation nur dann nützlich, wenn die experimentellen Daten mit geeigneten theoretischen Modellrechnungen verglichen werden können. In den letzten Jahren wurden deshalb verstärkt Anstrengungen unternommen, den Grad der Spinpolarisation im Rahmen einer konventionellen Bandtheorie zu berechnen. Beim Vergleich der experimentellen Daten mit Modellrechnungen ist dann darauf zu achten, dass häufig verschiedene Definitionen der Spinpolarisation verwendet werden. Wir wollen in diesem Abschnitt die Definition der Spinpolarisation in Ferromagneten vertiefen und diskutieren, welche Größe in einem spezifischen Experiment letztendlich gemessen wird.

### 7.10.1 Definition der Spinpolarisation

#### “Zustandsdichte“-Definition der Spinpolarisation

Die wohl natürlichste und am häufigsten verwendete Definition der Spinpolarisation ist die “Zustandsdichte“-Definition, die durch (vergleiche (7.3.3))

$$P_N \equiv \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} \quad (7.10.1)$$

gegeben ist. Hierbei sind  $N_{\uparrow}$  und  $N_{\downarrow}$  die Zustandsdichten der Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen bei der Fermi-Energie. Diese sind gegeben durch

$$N_{\sigma} = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int \delta(E_{\mathbf{k},\alpha,\sigma} - E_F) d^3k = \frac{1}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_{\alpha} \int \frac{dS_F}{v_{\mathbf{k},\alpha,\sigma}}. \quad (7.10.2)$$

Hierbei sind  $E_{\mathbf{k},\alpha,\sigma}$  bzw.  $v_{\mathbf{k},\alpha,\sigma}$  die Energie bzw. Geschwindigkeit eines Elektrons im Band  $\alpha$  mit dem Spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  und dem Wellenvektor  $\mathbf{k}$ . In (7.10.2) haben wir das Volumenintegral im  $k$ -Raum ( $d^3k$ ) in Integrale über Flächen konstanter Energie ( $dS_E dE$ ) überführt, wobei die Beziehung  $d^3k = dS_E dk_{\perp} = dS_E \frac{dE}{\nabla_{\mathbf{k}} E} = dS_E \frac{dE}{\hbar v(\mathbf{k})}$  benutzt wurde (vergleiche hierzu Abschnitt 2.2.2).

Wir nennen die durch (7.10.1) gegebene Definition des Grades der Spinpolarisation die “Zustandsdichte“-Definition der Spinpolarisation. Sie kann z.B. durch spinpolarisierte Photoelektronenspektroskopie gemessen werden. Allerdings ist diese Definition von begrenzter Bedeutung für Transportexperimente, da diese nicht nur durch die Zustandsdichten der Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen alleine bestimmt werden. Dies trifft insbesondere für Materialien zu, die “schwere”  $d$ -Elektronen und “leichte”  $s$ -Elektronen an der Fermi-Energie besitzen (z.B. Übergangsmetalle). Während häufig die Zustandsdichte hauptsächlich von den  $d$ -Elektronen

bestimmt wird, werden die elektrischen Transporteigenschaften hauptsächlich durch die  $s$ -Elektronen bestimmt, da die Leitfähigkeit umgekehrt proportional zur effektiven Masse der Leitungselektronen ist.<sup>104</sup>

### “Transport“-Definition der Spinpolarisation – diffusiver Grenzfall

Die klassische Boltzmann-Transport-Theorie, die wir ausführlich in Kapitel 2 diskutiert haben, erlaubt es uns, die Ströme  $J_{\uparrow}$  und  $J_{\downarrow}$  der Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen zu unterscheiden und damit eine “Transport“-Definition der Spinpolarisation durch

$$P_J \equiv \frac{J_{\uparrow} - J_{\downarrow}}{J_{\uparrow} + J_{\downarrow}} \quad (7.10.3)$$

zu geben. Wir können nun den Boltzmann-Ausdruck (2.2.18) für die Stromdichte

$$\mathbf{J} = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{e^2 \tau}{\hbar} \sum_{\alpha, \sigma} \int \frac{\mathbf{v}(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) dS_F}{v(k)} \cdot \mathbf{E} , \quad (7.10.4)$$

benutzen, wobei wir zusätzlich berücksichtigt haben, dass mehrere Bänder mit Bandindex  $\alpha$  zum Transport beitragen können. Für den Strom für die beiden Spinrichtungen erhalten wir

$$J_{\sigma} \propto e^2 \langle N v^2 \rangle_{\sigma} \tau_{\sigma} \quad (7.10.5)$$

mit

$$\langle N v^2 \rangle_{\sigma} = \frac{1}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_{\alpha} \int \frac{\mathbf{v}_{\mathbf{k}\alpha\sigma} \mathbf{v}_{\mathbf{k}\alpha\sigma}}{|\mathbf{v}_{\mathbf{k}\alpha\sigma}|} dS_F = \frac{1}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_{\alpha} \int v_{\mathbf{k}\alpha\sigma} dS_F . \quad (7.10.6)$$

Hierbei gilt das zweite Gleichheitszeichen nur für ein isotropes Medium. Mit diesem Ausdruck können wir die Leitfähigkeit als

$$\sigma = \langle N v^2 \rangle_{\uparrow} e^2 \tau_{\uparrow} + \langle N v^2 \rangle_{\downarrow} e^2 \tau_{\downarrow} \quad (7.10.7)$$

schreiben. Der Vergleich mit dem einfachen Drude-Ausdruck (2.2.26) zeigt, dass der Ausdruck  $\langle N v^2 \rangle_{\sigma}$  gerade  $(n/m^*)_{\sigma}$  entspricht, also der effektiven Dichte der Elektronen mit einer bestimmten Spinrichtung, die zum Transport beiträgt.

Nehmen wir an, dass die Streuzzeit  $\tau_{\sigma}$  unabhängig von der Spinrichtung ist, so können wir folgende vereinfachte Definition für die Spinpolarisation geben:<sup>105,106</sup>

$$P_J^{\text{diff}} \equiv P_{Nv^2} = \frac{\langle N v^2 \rangle_{\uparrow} - \langle N v^2 \rangle_{\downarrow}}{\langle N v^2 \rangle_{\uparrow} + \langle N v^2 \rangle_{\downarrow}} . \quad (7.10.8)$$

Falls die Streuzzeit spinabhängig sein sollte und außerdem Spin-Flip-Streuung berücksichtigt werden muss, wird der Ausdruck für die Spinpolarisation viel komplizierter, da dann die Stromdichten in beiden Spinkanälen von den Eigenschaften beider Spinkanäle abhängen.

<sup>104</sup>J.B. Gadzuk, Phys. Rev. **182**, 416 (1969).

<sup>105</sup>I.I. Mazin, Phys. Rev. Lett. **83**, 1427 (1999).

<sup>106</sup>I.I. Mazin, A.A. Golubov, B. Nadgorny, J. Appl. Phys. **89**, 7576 (2001).

### “Transport“-Definition der Spinpolarisation – ballistischer Grenzfall

In den meisten Experimenten ist es nicht möglich, die Ströme  $J_{\uparrow}$  und  $J_{\downarrow}$  in einem Material getrennt zu messen und damit die Spinpolarisation zu bestimmen. Typische Experimente zur Bestimmung der Spinpolarisation benutzen den spinpolarisierten Transport zwischen einem Ferromagneten und einem nicht-magnetischen Material. Zum Beispiel können wir den Strom über einen Kontakt zwischen einem Ferromagneten und einem Supraleiter messen. Wir nehmen bei der Diskussion dieser Situation zunächst an, dass wir einen ballistischen Kontakt zwischen zwei Materialien ohne jegliche Grenzflächenbarriere vorliegen haben und dass wir Fehlanpassungen der Fermi-Geschwindigkeiten in beiden Materialien vernachlässigen können. Unsere Diskussion wird auf die ursprüngliche Diskussion eines ballistischen Kontakts durch **Sharvin**<sup>107</sup> aufbauen, wobei wir allerdings eine beliebige Fermi-Oberfläche zulassen wollen. Wir nehmen an, dass ein Elektron, das den Kontakt durchquert, eine Beschleunigung durch das elektrische Feld erfährt, so dass seine Energie nach Durchqueren des Kontakts um  $eU$  angewachsen ist. Hierbei ist  $U$  die über den Kontakt abfallende Spannung. Wird dabei der Quasiimpuls der Elektronen von  $\hbar\mathbf{k}$  nach  $\hbar\mathbf{k}'$  geändert, so können wir für  $T = 0$  sofort den möglichen Phasenraum für diesen Prozess angeben. Da nur Zustände unterhalb von  $E_F$  besetzt sind, d.h. für  $\epsilon_k = E_k - E_F \leq 0$ , und nur Endzustände oberhalb von  $E_F$  frei sind, d.h.  $\epsilon_{k'} \geq 0$ , können wir für den zugänglichen Phasenraum unter Benutzung der Heavyside-Funktion  $\theta$  schreiben als:

$$\theta(\epsilon_{k'})\theta(-\epsilon_k) = \theta(\epsilon_k + eU)\theta(-\epsilon_k) = eU\delta(\epsilon_k) . \quad (7.10.9)$$

Wir betrachten nun den Anteil der Elektronen mit einem gegebenen  $\mathbf{k}$ , die die Kontaktfläche pro Zeiteinheit erreichen können. Falls die Kontaktfläche senkrecht zur  $z$ -Richtung ist, so ist dieser gerade durch  $v_z A$  gegeben, wobei  $A$  die Kontaktfläche und  $v_z$  die Geschwindigkeitskomponente der Elektronen in  $z$ -Richtung ist. Die gesamte Stromdichte pro Spinrichtung ist gegeben durch das Produkt von Ladung, Geschwindigkeit der Ladung und Zahl der verfügbaren Zustände, d.h. durch

$$J_{\sigma} = e \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha} \int_{v_z > 0} v_{\mathbf{k}\alpha\sigma,z} eU\delta(\epsilon_{\mathbf{k}\alpha\sigma}) d^3k = e^2 U \langle N | v_z | \rangle_{\sigma} , \quad (7.10.10)$$

wobei wir  $\langle N v_z \rangle_{\sigma}$  analog zu (7.10.6) definiert haben. Unter Benutzung von (7.10.2) können wir diesen Ausdruck umschreiben in

$$J_{\sigma} = e^2 U \frac{1}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_{\alpha} \int_{v_z > 0} v_{\mathbf{k}\alpha\sigma,z} \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_{\mathbf{k}\alpha\sigma}|} = \frac{e^2}{h} \frac{S_{F,z}}{(2\pi)^2} U , \quad (7.10.11)$$

wobei  $S_{F,z}$  die Projektion der Fermi-Oberfläche auf die Grenzfläche, die senkrecht auf der  $z$ -Richtung steht, ist. Für eine sphärische Fermi-Oberfläche erhalten wir dann genau das Sharvin-Ergebnis.

Wir können Gleichung (7.10.11) mit dem aus dem Bereich der mesoskopischen Physik wohl-bekanntem Landauer-Ausdruck vergleichen, der besagt, dass der Leitwert  $G = J \cdot A / U$  eines einzelnen Leitungskanals gerade  $G_0 = e^2 / h$  ist. Der gesamte Leitwert ist dann gegeben durch  $G_0$  mal die Anzahl  $N_{cc}$  der Leitungskanäle, die durch die Anzahl der Elektronen, die den Kontakt passieren können, gegeben ist. Falls die Translationssymmetrie an der Grenzfläche nicht

<sup>107</sup>Yu. V. Sharvin, Zh. Eksp. Teor. Phys. **48**, 984 (1965); Sov. Phys. JETP **75**, 655 (1965).



verletzt ist, wird  $\mathbf{k}_{\parallel}$  erhalten und  $N_{cc}$  ist gegeben durch das Produkt der Kontaktfläche  $A$  mit der zweidimensionalen Impulszustandsdichte. Letztere ist gerade durch  $S_{F,z}/(2\pi)^2$  gegeben, also durch das Produkt der Projektion  $S_{F,z}$  der Fermi-Fläche auf die Kontaktfläche mit der zweidimensionalen Zustandsdichte  $1/(2\pi)^2$  im  $k$ -Raum. Wir erhalten also für den Leitwert für eine Spinrichtung

$$G_{\sigma} = \frac{e^2}{h} N_{cc,\sigma} = \frac{e^2}{h} \frac{S_{F,z}}{(2\pi)^2} A = e^2 \langle N|v_z| \rangle_{\sigma} A . \quad (7.10.12)$$

Wir sehen, dass der Leitwert im ballistischen Grenzfall proportional zu  $\langle N|v_z| \rangle$  ist, während die Leitfähigkeit im diffusiven Grenzfall proportional zu  $\langle Nv^2 \rangle$  ist. Analog zu (7.10.8) können wir für den ballistischen Grenzfall die Spinpolarisation

$$p_C^{\text{ball}} \equiv P_{Nv_z} = \frac{\langle Nv_z \rangle_{\uparrow} - \langle Nv_z \rangle_{\downarrow}}{\langle Nv_z \rangle_{\uparrow} + \langle Nv_z \rangle_{\downarrow}} \quad (7.10.13)$$

definieren.

### “Transport“-Definition der Spinpolarisation – erweiterter ballistischer Grenzfall

Wir wollen nun die Diskussion des ballistischen Grenzfalls auf solche Situationen erweitern, bei denen eine nichtideale Grenzflächen vorliegt (zusätzliche Barriere) und außerdem eine Fehlanpassung der Fermi-Geschwindigkeiten im Ferromagneten und nicht-magnetischen Metall vorliegt. Die nichtideale Grenzfläche wird durch ein  $\delta$ -Potential  $U(z)$  modelliert, dessen Stärke durch die dimensionslose **Barrirentransparenz**  $Z$  gegeben ist (vergleiche (7.4.3)):

$$U(z) = \delta(z) \cdot W = \delta(z) \cdot Z \cdot \hbar v_F = \delta(z) \cdot Z \cdot \frac{\hbar^2 k_F}{m^*} . \quad (7.10.14)$$

Hierbei sind  $v_F$  und  $k_F$  die Fermi-Geschwindigkeit bzw. der Fermi-Wellenvektor. Für eine verschwindende Barriere ( $Z = 0$ ) liegt eine ideale Grenzfläche (ballistischer Grenzfall mit Transmissionswahrscheinlichkeit  $T = 1$ ) vor, während wir es bei einer starken Barriere ( $Z \gg 1$ ) mit einem Tunnelkontakt mit  $T \ll 1$  zu tun haben. Das heißt, durch das Einführen der Barrirentransparenz können wir den Übergang von einer idealen Grenzfläche zu einem Tunnelkontakt beschreiben.

Im Gegensatz zu der oben diskutierten idealen Grenzfläche mit  $Z = 0$  erhalten wir für die nichtideale Grenzfläche eine gewisse Rückstreuwahrscheinlichkeit. Das heißt, die Transmissionswahrscheinlichkeit  $T$  durch den Kontakt ist nicht mehr eins, sondern  $0 \leq T \leq 1$  und wir erhalten für den Leitwert des Kontakts

$$G_{\sigma} = \frac{e^2}{h} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, \alpha} T_{\mathbf{k}_{\parallel}, \alpha \sigma} , \quad (7.10.15)$$

wobei wir über die Transmissionswahrscheinlichkeiten aller Leitungskanäle aufsummieren müssen.

Die Transmissionswahrscheinlichkeit  $T_{\mathbf{k}_{\parallel}, \alpha \sigma}$  wird durch die Barrierenstärke  $Z$  und durch die Fehlanpassung der Fermi-Geschwindigkeiten  $v_z^f$  im Ferromagneten und  $v_z^n$  im nicht-magnetischen Metall bestimmt. Um sie zu bestimmen, müssen wir die Schrödinger-Gleichung

im Bereich des Ferromagneten und des nicht-magnetischen Metalls lösen und die Lösungen stetig anpassen (vergleiche hierzu Abschnitt 7.1). Für die Spin- $\uparrow$  Elektronen erhalten wir

$$\Psi_{\uparrow}^f(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}_{\uparrow}^f \cdot \mathbf{r}} + r_{\uparrow} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\mathbf{k}_{\uparrow}^f \cdot \mathbf{r}} \quad (7.10.16)$$

$$\Psi_{\uparrow}^n(\mathbf{r}) = t_{\uparrow} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}_{\uparrow}^n \cdot \mathbf{r}} \quad (7.10.17)$$

mit äquivalenten Ausdrücken für die Spin- $\downarrow$  Elektronen. Hierbei sind  $t_{\uparrow\downarrow}$  und  $r_{\uparrow\downarrow}$  die Transmissions- und Reflexionskoeffizienten für die Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$  Elektronen an der Grenzfläche. Für  $Z = 0$  gilt  $t_{\uparrow\downarrow} = 1$  und  $r_{\uparrow\downarrow} = 0$ . Die Nomenklatur  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  bedeutet, dass wir es mit einem Elektron und nicht mit einem Loch zu tun haben. Verwenden wir statt eines Normalleiters einen Supraleiter, so kann ein Elektron an der Grenzfläche als Loch  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  Andreev-reflektiert werden und im supraleitenden Bereich treten Quasiteilchen  $\begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}$  auf, die gemischte Elektron/Loch-Zustände darstellen (siehe hierzu Abschnitt 7.4.1).

Nehmen wir an, dass nur Elektronen mit Energien  $E \simeq E_F$  zum Strom beitragen, so gilt  $E_{\uparrow}^f \simeq E_{\downarrow}^f \simeq E^n \simeq E_F$  und wir können die absoluten Werte der Fermi-Wellenvektoren schreiben als

$$k_{\uparrow}^f = \sqrt{\frac{2m_e E_F}{\hbar^2}} \quad (7.10.18)$$

$$k_{\downarrow}^f = \sqrt{\frac{2m_e (E_F - E_{ex})}{\hbar^2}}. \quad (7.10.19)$$

$$k_F^n = \sqrt{\frac{2m_e (E_F - \Gamma)}{\hbar^2}}. \quad (7.10.20)$$

Hierbei ist  $\Gamma$  die Differenz der unteren Leitungsbandkanten des Ferromagneten und des nicht-magnetischen Metalls (siehe Abb. 7.59).

Um die Transmissionswahrscheinlichkeit zu berechnen, nehmen wir an, dass die Tunnelbarriere perfekt glatt ist, so dass keine diffusive Streuung auftritt. In diesem Fall können wir  $\mathbf{k}_{\parallel}$ -Erhaltung annehmen. Es gilt dann für den Einfallswinkel  $\phi$  der Elektronen auf die Grenzfläche  $\sin \phi = k_{\sigma\parallel}^f / k_{\sigma}^f$  und wir können für die Wellenvektoren in  $z$ -Richtung, d.h. senkrecht zur Grenzfläche, schreiben (siehe hierzu Abb. 7.60)

$$k_{\sigma,z}^f(\phi) = k_{\sigma}^f \cos \phi \quad (7.10.21)$$

$$k_z^n(\phi) = \sqrt{(k_F^n)^2 - [k_{\sigma\parallel}^f(\phi)]^2}. \quad (7.10.22)$$

Wir müssen jetzt noch die Randbedingungen an der Grenzfläche bei  $z = 0$  verwenden:<sup>108</sup>

$$\Psi_{\sigma}^f(x, y, z = 0) = \Psi_{\sigma}^n(x, y, z = 0) \quad (7.10.23)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial \Psi_{\sigma}^f}{\partial z} \Big|_{z=0^-} + U \Psi_{\sigma}^f(x, y, z = 0) = \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial \Psi_{\sigma}^n}{\partial z} \Big|_{z=0^+}. \quad (7.10.24)$$

<sup>108</sup>G.E. Blonder, M. Tinkham, T.M. Klapwijk, Phys. Rev. **B 25**, 4515 (1982).

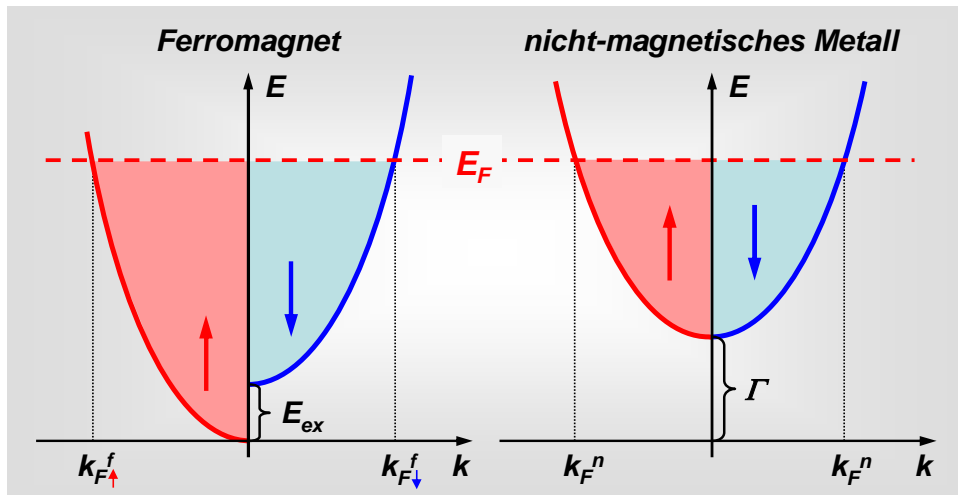


Abbildung 7.59: Bandstruktur an einem Kontakt zwischen einem Ferromagneten (links) und einem nicht-magnetischen Metall (rechts). In der ferromagnetischen Elektrode ist die untere Bandkante des Minoritätsspinbandes um die Austauschkopplung  $E_{ex}$  nach oben verschoben.  $\Gamma$  repräsentiert die Differenz der unteren Leitungsbandkanten des Ferromagneten und des nicht-magnetischen Metalls.

Mit den Wellenfunktionen (7.10.16) und (7.10.17) für beide Spinrichtungen können wir aus den beiden Randbedingungen die spinabhängigen Transmissionskoeffizienten bestimmen, was wir hier nicht explizit durchführen wollen. Wir erhalten<sup>109,110</sup>

$$T_{\sigma}(\phi, Z) = \frac{v_z^n}{v_{\sigma,z}^f} |t_{\sigma}|^2 = \frac{v_z^n v_{\sigma,z}^f}{\frac{1}{4}(v_{\sigma,z}^n + v_{\sigma,z}^f)^2 + (W/\hbar)^2}. \quad (7.10.25)$$

Hierbei haben wir parabolische Bänder, d.h.  $\mathbf{v}_{\sigma}^f = \hbar \mathbf{k}_{\sigma}^f / m_e$  und  $\mathbf{v}^n = \hbar \mathbf{k}^n / m_e$ , angenommen und  $Z = W/\hbar v_{\uparrow}^f$  benutzt. Wir sehen, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit von den Fermi-Geschwindigkeiten und der dimensionslosen Barrierentransparenz abhängt. Selbst im Fall einer idealen Grenzfläche ( $Z = 0$ ) ist die Transmissionswahrscheinlichkeit aufgrund der Fehlanpassung der Fermi-Geschwindigkeiten kleiner als eins. Nur wenn die Fermi-Geschwindigkeiten gleich sind ( $E_{ex} = \Gamma = 0$ ), erhalten wir Blonder-Tinkham-Klapwijk Ergebnis  $T = 1/(Z^2 + 1)$  und damit  $T = 1$  für  $Z = 0$ .<sup>111</sup>

Um den Strom über die Grenzfläche zu erhalten, müssen wir in (7.10.11) die Transmissionswahrscheinlichkeit eins durch  $T_{\sigma}(\phi, Z)$  ersetzen und erhalten

$$J_{\sigma} = e^2 U \frac{1}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_{\alpha} \int_{v_{\sigma,z}^f > 0} T_{\sigma}(\phi, Z) v_{\mathbf{k}\alpha\sigma,z}^f \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^f|}. \quad (7.10.26)$$

Betrachten wir den Fall einer starken Barriere (Tunnelgrenzfall), so kann im Ausdruck für  $T_{\sigma}(\phi, Z)$  im Nenner der erste Term vernachlässigt werden und wir erhalten

$$J_{\sigma} \propto \frac{1}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_{\alpha} \int_{v_{\sigma,z}^f > 0} (v_{\mathbf{k}\alpha\sigma,z}^f)^2 \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^f|} = \langle N(v_z^f)^2 \rangle_{\sigma}. \quad (7.10.27)$$

<sup>109</sup>I.I. Mazin, A.A. Golubov, A. Zaikin, Phys. Rev. Lett. **75**, 2574 (1995).

<sup>110</sup>H. B. Heersche, Th. Schäpers, J. Nitta, H. Takayanagi, Phys. Rev. **B 64**, 161307 (2001).

<sup>111</sup>G.E. Blonder, M. Tinkham, T.M. Klapwijk, Phys. Rev. **B 25**, 4515 (1982).

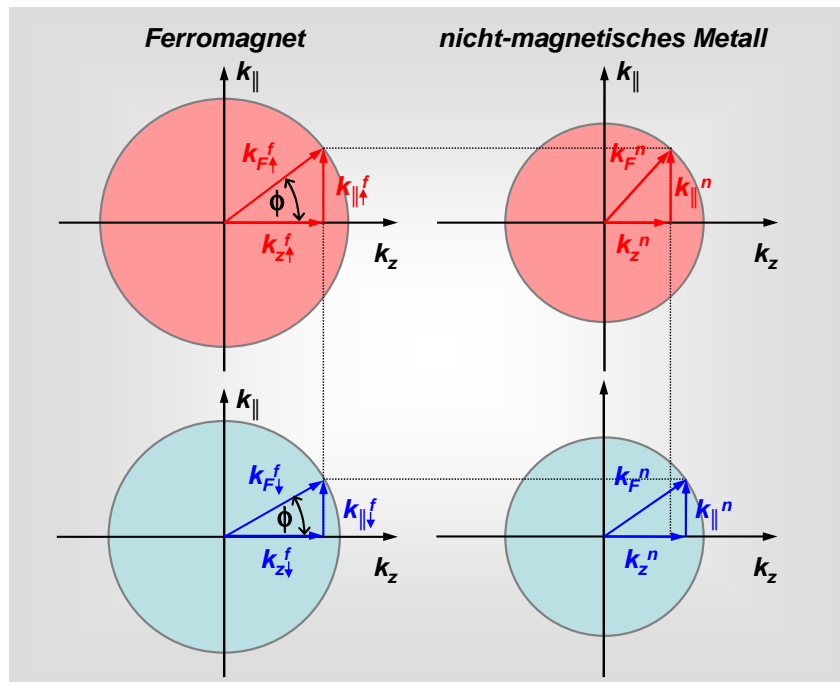


Abbildung 7.60: Wellenvektoren an einer Grenzfläche zwischen einem Ferromagneten und einem nicht-magnetischen Metall.

Das heißt, im Tunnelgrenzfall erhalten wir eine Definition für die Spinpolarisation, die derjenigen für den diffusiven Grenzfall entspricht:

$$P_C^{\text{tun}} \equiv P_{Nv_z^2} = \frac{\langle Nv_z^2 \rangle_{\uparrow} - \langle Nv_z^2 \rangle_{\downarrow}}{\langle Nv_z^2 \rangle_{\uparrow} + \langle Nv_z^2 \rangle_{\downarrow}}. \quad (7.10.28)$$

Es sei hier noch darauf hingewiesen, dass man für den Fall hoher Transparenz keinen einfachen Ausdruck für die Spinpolarisation angeben kann.

### 7.10.2 Bestimmung der Spinpolarisation mit Andreev-Streuung

Bis jetzt haben wir den spinpolarisierten Transport über eine Grenzfläche zwischen einem Ferromagneten und einem nicht-magnetischen Metall betrachtet. Wir wollen jetzt annehmen, dass das nicht-magnetische Metall supraleitend ist. In diesem Fall müssen wir die so genannte Andreev-Streuung an der F/S-Grenzfläche berücksichtigen, die wir bereits in Abschnitt 7.4.1 diskutiert haben. Wir wollen in unserer Diskussion annehmen, dass die Grenzfläche zwischen Ferromagnet und Supraleiter durch eine endliche Barrierentransparenz  $Z$  charakterisiert werden kann. Wie bereits in Abschnitt 7.4.1 beschrieben wurde, treten an der Grenzfläche zusätzlich zur normalen Reflexion und Transmission jetzt Andreev-Reflexion und -Transmission auf (siehe Abb.7.61). Die Wahrscheinlichkeiten für diese Prozesse sind  $R_A = |r_A|^2$  und  $R_N = |r_N|^2$  für die Andreev- und Normal-Reflexion bzw.  $T_A = |t_A|^2$  und  $T_N = |t_N|^2$  Andreev- und Normal-Transmission. Hierbei sind  $r_A$  und  $r_N$  die Reflexions- und  $t_A$  und  $t_N$  die Transmissionskoeffizienten. Die Wahrscheinlichkeiten, die für unterschiedliche Spinrichtungen unterschiedlich sein können, werden durch das Grenzflächenpotenzial  $W\delta(0)$  und die Fehlanpassung der Fermi-Geschwindigkeiten im Ferromagnet und Supraleiter bestimmt.

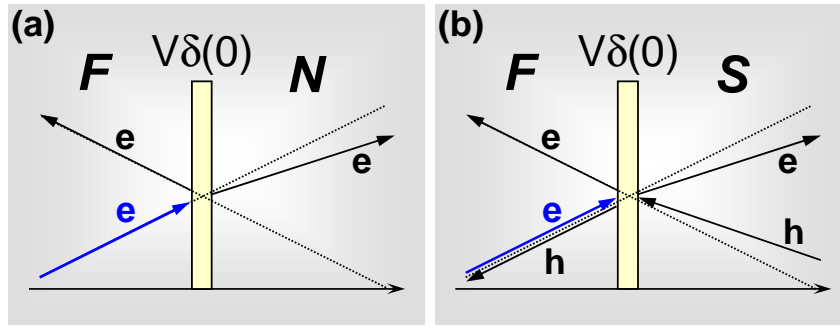


Abbildung 7.61: Mögliche Streuprozesse an einer nicht-idealen Grenzfläche ( $Z \neq 0$ ) zwischen einem ferromagnetischen Metall und einem Normalleiter (a) bzw. einem Supraleiter (b). Die Barriere wird durch ein  $\delta$  förmiges Potenzial bei  $z = 0$  modelliert. Ein einlaufendes Elektron kann an der F/S-Grenzfläche sowohl mit den Wahrscheinlichkeiten  $R_A = |r_A|^2$  und  $R_N = |r_N|^2$  Andreev- oder normal-reflektiert werden, bzw. mit den Wahrscheinlichkeiten  $T_A = |t_A|^2$  und  $T_N = |t_N|^2$  Andreev- oder normal-transmittiert werden. Aufgrund der unterschiedlichen Fermi-Geschwindigkeiten in den beiden Materialien können die Reflexions- und Transmissionswinkel unterschiedlich sein.

Berücksichtigen wir sowohl Normal- als auch Andreev-Prozesse so lauten die zu (7.10.16) und (7.10.17) äquivalenten Wellenfunktionen

$$\Psi_{\uparrow}^f(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{iq_{\uparrow+}^f \cdot \mathbf{r}} + r_{N,\uparrow} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-iq_{\uparrow+}^f \cdot \mathbf{r}} + r_{A,\uparrow} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{iq_{\uparrow-}^f \cdot \mathbf{r}} \quad (7.10.29)$$

$$\Psi^s(\mathbf{r}) = t_{N,\uparrow} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} e^{ik_{\uparrow+}^s \cdot \mathbf{r}} + t_{A,\uparrow} \begin{pmatrix} v_k \\ -u_k \end{pmatrix} e^{-ik_{\uparrow-}^s \cdot \mathbf{r}} \quad (7.10.30)$$

mit (vergleiche (7.4.10) und (7.4.11))

$$q_{\uparrow\pm}^f = |k_{\uparrow F}^f| \pm \frac{m\epsilon}{\hbar|k_{\uparrow F}^f|} \quad (7.10.31)$$

$$k_{\pm}^s = |k_F^s| \pm \frac{m\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}}{\hbar|k_F^s|}. \quad (7.10.32)$$

Entsprechende Ausdrücke werden für die andere Spinrichtung erhalten. Hierbei ist  $k_{\uparrow F}^f$  der Fermi-Wellenvektor für Spin- $\uparrow$ -Elektronen im Ferromagneten,  $k_F^s$  der Fermi-Wellenvektor im Supraleiter,  $\epsilon$  die Energie bezogen auf die Fermi-Energie und  $\Delta$  die Energielücke des Supraleiters. Für die Ausdrücke im Supraleiter haben wir die Spinrichtung weggelassen, da die Größen für beide Spinrichtungen gleich sind.

Wir müssen beachten, dass das Andreev-reflektierte  $\uparrow$ -Loch aus Konvention dem Fehlen eines  $\downarrow$ -Elektrons in der Spin- $\downarrow$ -Zustandsdichte entspricht. Die Andreev-Streuung können wir uns deshalb auch so veranschaulichen, dass zwei Ströme mit entgegengesetzter Spinrichtung im Bereich des ferromagnetischen Metalls auf die Grenzfläche zum Supraleiter treffen und in einer Grenzflächenregion, deren Ausdehnung durch die supraleitende Kohärenzlänge bestimmt wird, zu Cooper-Paaren rekombinieren. Im Supraleiter fließt dann ein Suprastrom der doppelt so groß ist wie die jeweiligen Ströme für die einzelnen Spinrichtungen. Wichtig ist hierbei, dass in einem nicht-magnetischen Metall die beiden Ströme identisch sind und wir dadurch für Spannungen unterhalb der Energielückenspannung eine Erhöhung des Nettostromes über die Grenzfläche um den Faktor zwei beobachten. In einem Ferromagneten mit  $P \neq 0$  trifft dies allerdings nicht mehr zu. Die Spin- $\uparrow$  und Spin- $\downarrow$ -Ströme sind hier unterschiedlich und der über

die F/S-Grenzfläche fließende Nettostrom ist kleiner als derjenige für eine N/S-Grenzfläche. **de Jong** und **Beenacker** haben das Verhältnis  $I_s/I_n$  der Ströme  $I_s$  für eine F/S- und  $I_n$  für eine F/N-Grenzfläche zu

$$\frac{I_s}{I_n} = 4 \frac{\min(N_\uparrow, N_\downarrow)}{N_\uparrow + N_\downarrow} = 2(1 - P_N) \quad (7.10.33)$$

angegeben.<sup>112</sup> Wir sehen, dass sich für  $N_\uparrow = N_\downarrow$ , d.h. für ein nicht-magnetisches Metall,  $I_s/I_n = 2$  ergibt, also eine Erhöhung des Stromes um den Faktor zwei. Im Gegensatz dazu wird für einen Ferromagneten mit  $P_N = 1$  ( $N_\uparrow$  oder  $N_\downarrow$  ist null)  $I_s/I_n = 0$ , d.h. wir erhalten eine vollständige Unterdrückung des Stromes über eine F/S-Grenzfläche. In unserem Bild der beiden auf die Grenzfläche zulaufenden Ströme mit unterschiedlicher Spinrichtung können wir dieses Ergebnis einfach verstehen: In einem vollständig spinpolarisierten Ferromagneten verschwindet entweder der Spin- $\uparrow$ - oder der Spin- $\downarrow$ -Strom vollständig und es können in der Grenzflächenregion keine Cooper-Paare gebildet werden, die im Supraleiter den Strom tragen.

Die verschiedenen Reflexions- und Transmissionskoeffizienten in (7.10.29) und (7.10.30) werden durch die Randbedingungen an der F/S-Grenzfläche bestimmt (stetige Anpassung der Lösungen der Schrödinger-Gleichung in beiden Materialbereichen an der Grenzfläche). Führt man dies aus, so erhält man unter Annahme von parabolischen Bändern und/oder sphärischen Fermi-Flächen Gleichung (7.10.33). Wir sehen, dass aufgrund von (7.10.33) in Kombination mit (7.10.26) der mit Hilfe von Andreev-Streuung bestimmte Grad der Spinpolarisation entweder durch  $P_{Nv}$  oder  $P_{Nv^2}$  gegeben sein sollte, je nachdem ob die Grenzflächentransparenz hoch oder gering ist. Leider sind die so unter der Annahme parabolischer Bänder erhaltenen theoretischen Ergebnisse<sup>113</sup> von geringer praktischer Relevanz, da für reale Materialien die Annahme parabolischer Bänder nicht akzeptabel ist. In einer detaillierteren Betrachtung muss die Struktur der Fermi-Oberfläche einbezogen werden. Die Einbeziehung von Bandstruktureffekten wurde kürzlich durchgeführt und führt zu relativ komplizierten Ausdrücken,<sup>114,115</sup> die hier nicht diskutiert werden sollen. Von Mazin *et al.* wurde auch gezeigt, dass im Prinzip zwischen einer durch Spinpolarisation verursachten Unterdrückung des Stromes über eine F/S-Grenzfläche und diffusiven Transporteffekten unterschieden werden kann.

### 7.10.3 Spinpolarisation – Nachbetrachtung

Wir wollen abschließend diskutieren, wieso wohl die Zustandsdichte bei der Fermi-Energie so häufig dazu benutzt wird, um den Grad der Spinpolarisation zu definieren, obwohl diese Definition dann für die Transporteigenschaften völlig irrelevant ist. Eine naheliegende Antwort ist, dass in Tunnelexperimenten oder bei der Punktkontaktspektroskopie üblicherweise die Leitfähigkeit als Funktion der Spannung gemessen wird und daraus die Zustandsdichte abgeleitet werden könne. Dies ist in der Tat für Supraleiter/Normalleiter-Kontakte der Fall. Hier kann die Zustandsdichte des Normalleiters in dem üblicherweise kleinen Spannungsbereich in der Größenordnung von 10 mV also konstant angenommen werden, so dass die Variation der Leitfähigkeit nur durch die Zustandsdichte des Supraleiters bestimmt wird. Somit lässt sich die Zustandsdichte des Supraleiters aus einem Tunnelexperiment bestimmen. Dies ist allerdings nicht der Fall für Ferromagnet/Normalleiter-Kontakte, wenn zwei unterschiedliche Spinkanäle verglichen werden.

<sup>112</sup>M.J.M. de Jong, C.W.J. Beenacker, Phys. Rev. Lett. **74**, 1657 (1995).

<sup>113</sup>J.X. Zhu, B. Friedman, C.S. Ting, Phys. Rev. **B 59**, 9558, (1999).

<sup>114</sup>I.I. Mazin, Phys. Rev. Lett. **83**, 1427 (1999).

<sup>115</sup>I.I. Mazin, A.A. Golubov, B. Nadgorny, J. Appl. Phys. **89**, 7576 (2001).

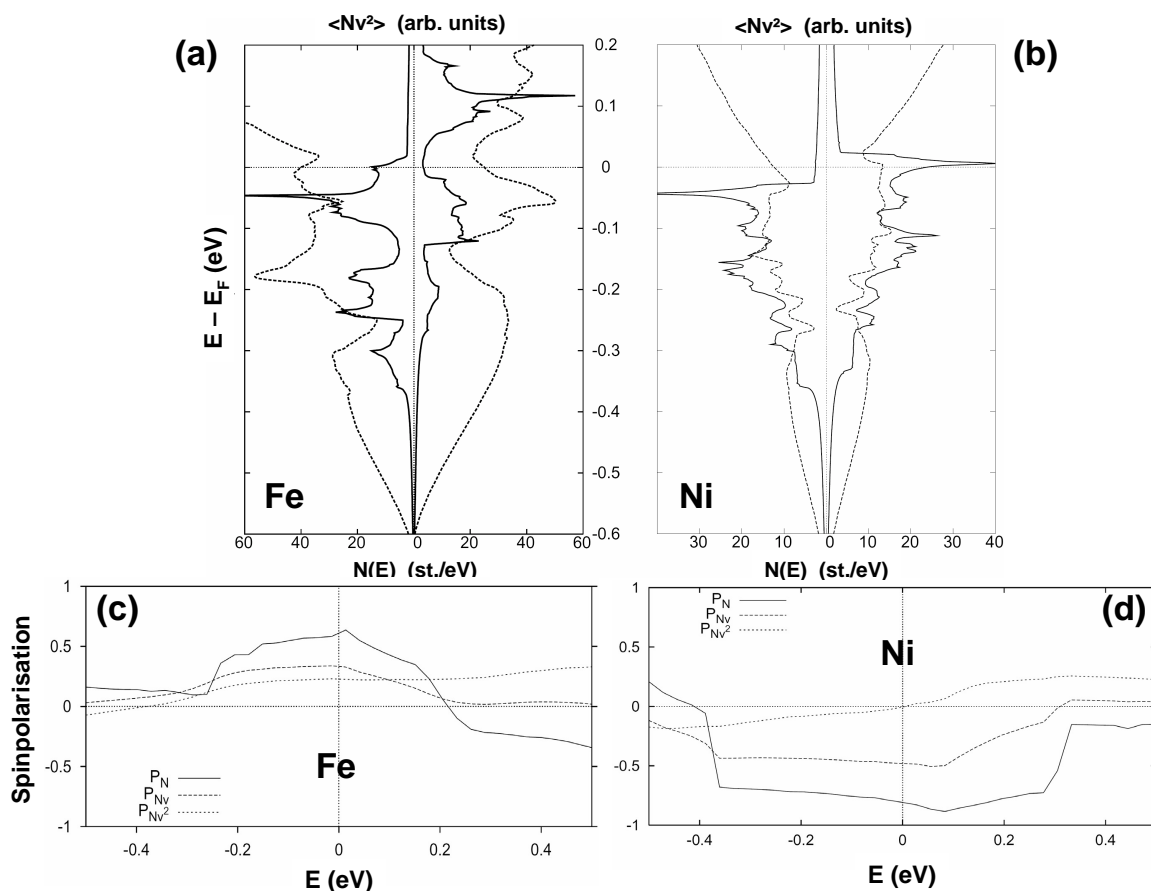


Abbildung 7.62: Oben: Zustandsdichte  $N(E)$  (durchgezogen) sowie  $\langle Nv^2 \rangle(E)$  (gestrichelt) für Eisen (a) und Ni (b). Unten: Grad der Spinpolarisation für Fe (c) und Ni (d) (aus I.I. Mazin, Phys. Rev. Lett. **83**, 1427 (1999)).

Bei der Diskussion der Spinpolarisation müssen wir uns klar machen, dass  $P_N$ ,  $P_{Nv}$  und  $P_{Nv^2}$  in realen Materialien völlig unterschiedlich sind. Der Grund dafür ist, dass wir zum Beispiel in Übergangsmetallen Teile der Fermi-Fläche unterscheiden können, die überwiegend  $d$ - bzw.  $s$ -Charakter haben.<sup>116</sup> Die Teile mit  $d$ -Charakter sind für den Großteil der durch (7.10.2) gegebenen Zustandsdichte bei  $E_F$  zuständig. Diejenigen Teile mit  $s$ -Charakter haben hohe Geschwindigkeiten und dominieren  $\langle Nv^2 \rangle$  (siehe (7.10.6)). Es ist klar, dass die Unterschiede in  $P_N$ ,  $P_{Nv}$  und  $P_{Nv^2}$  umso größer werden, je unterschiedlicher die Fermi-Geschwindigkeiten der  $d$ - und  $s$ -artigen Elektronen sind. Dies ist in Abb.7.62 gezeigt, wo die aus Bandstrukturrechnungen für Fe und Ni erhaltenen Werte für  $P_N$ ,  $P_{Nv}$  und  $P_{Nv^2}$  als Funktion der Energie aufgetragen sind.

Wir können ganz allgemein feststellen, dass ein großer Wert von  $P_N$  zwei Ursachen haben kann: Erstens kann die Größe der Spin- $\uparrow$ - und Spin- $\downarrow$ -Fermi-Flächen unterschiedlich sein, während die Fermi-Geschwindigkeiten etwa gleich sind. Zweitens kann die Größe der Fermi-Flächen etwa gleich sein, während die Fermi-Geschwindigkeiten der beiden Spinkanäle unterschiedlich sind. Im ersten Fall ändern die zusätzlichen Faktoren  $v$  und  $v^2$  den Grad der Spinpolarisation kaum, d.h.  $P_N \sim P_{Nv} \sim P_{Nv^2}$ . Die unterschiedlich definierten Spinpolarisationen zeigen nur quantitative Unterschiede, qualitative Unterschiede oder sogar ein Vorzeichenwechsel treten aber nicht auf. Ein Beispiel für diesen Fall ist Fe, für das  $N(E)$  und  $\langle Nv^2 \rangle(E)$  den gleichen qualitativen Verlauf haben (siehe Abb. 7.62a). Im zweiten Fall liegen Elektronen mit kleiner und großer effektiver Masse bei der Fermi-Energie vor. Dann ist  $P_N$  durch die schweren und

<sup>116</sup>J.B. Gadzuk, Phys. Rev. **182**, 416 (1969).

$P_{Nv^2}$  durch die leichten Elektronen bestimmt, so dass  $P_N$  und  $P_{Nv^2}$  sehr unterschiedlich sein können, da sie von unterschiedlichen Elektronen dominiert werden. Es kann sogar ein Vorzeichenwechsel auftreten. Ein typisches Beispiel hierfür ist Ni (siehe Abb. 7.62b und d). Obwohl für Ni  $P_N < 0$ , ist  $P_{Nv^2} > 0$ . In der Tat wird für Ni in Tunnelexperimenten häufig eine positive Spinpolarisation gemessen, die im Allgemeinen größer ist als theoretisch erwartet. Dies deutet an, dass der eben beschriebene Effekt tatsächlich noch größer ist, als durch die Bandstrukturrechnungen vorhergesagt wird. Dies liegt wahrscheinlich daran, dass Bandstrukturrechnungen häufig eine zu geringe Lokalisierung der  $d$ -Elektronen ergeben.





## **Teil III**

# **Spininjektion und Spintransport**



## **Teil IV**

# **Materialien für die Spinelektronik**



**Teil V**

**Anwendungen**







## **Teil VI**

# **Quanten-Spinelektronik**



**Teil VII**

**Appendix**

