Beiträge zur Theorie des Supermagnetwiderstandes in magnetischen Vielfachschichten

Diplomarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades

Diplom-Physiker

vorgelegt von

Peter Zahn

geboren in Jena

Institut für Theoretische Physik

Fachrichtung Physik

Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften

Technische Universität Dresden

1994

Gutachter

1. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. K. Becker

2. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. H. Eschrig

Datum des Einreichens der Arbeit: 30. 11. 94

Kurzfassung

Es werden *ab-initio* Rechnungen des Supermagnetwiderstands-Effektes von Fe/Cr-Vielfachschichten vorgestellt. Die Elektronenstruktur wurde im Rahmen einer LCAO-Superzellen-Rechnung bestimmt. Als Störung der idealen Schichtstruktur wurden Cr-Defekte in Fe angenommen, die durch spinabhängige Relaxationszeiten beschrieben werden. Die elektrischen Transportkoeffizienten wurden durch Lösung der linearisierten BOLTZMANN-Gleichung in Relaxationszeitnäherung unter Verwendung des MOTTschen Zweistrommodells berechnet.
Bei den betrachteten Systemen variierte die Dicke der Fe-Schicht zwischen 3 und 9 Monolagen, die der Cr-Schicht zwischen 1 und 13 Monolagen. In Abhängigkeit von der Fe- bzw. Cr-Schichtdicke ergeben sich in Übereinstimmung mit den Experimenten charakteristische Oszillationen des Supermagnetwiderstandes. Es wird der Einfluß der Spinanisotropie der Streuung auf den Effekt untersucht. Insbesondere kann gezeigt werden, daß der Effekt auch für spinunabhängige Streuung existiert.

Abstract

Ab-initio calculations of giant magnetoresistance for Fe/Cr multilayers are presented. The electronic structure of the Fe/Cr superlattice is calculated within an optimized LCAO scheme using the local spin density approximation. The scattering of the electrons by Cr impurities in an Fe environment is taken into account by spin dependent relaxation times.
The transport is described quasiclassically by solving the linearized Boltzmann equation in relaxation time approximation. In agreement with experiments characteristic oscillations of the giant magnetoresistance are obtained in dependence on the Cr and Fe layer thickness.
It can be shown, that the giant magnetoresistance can be reduced or increased by the spinanisotropy of the scattering, but the phenomenon still exists for spinindependent scattering.

Inhaltsverzeichnis

1 Themenstellung **1**

2 Experimentelle Phänomene **3**
2.1 Oszillierende Zwischenschichtkopplung 3
2.2 Supermagnetwiderstands-Effekt 9

3 Transporttheorie **13**
3.1 Boltzmann-Gleichung in Relaxationszeitnäherung 13
3.2 Bestimmung der Transportkoeffizienten 17

4 Grundzustandseigenschaften der Fe/Cr-Vielfachschichten **20**
4.1 Modellierung der Schichtstruktur 20
4.2 Berechnung der Bandstruktur 22
4.3 Approximation der Fermi-Fläche 26
4.4 Magnetische Struktur der Vielfachschichten 29

5 Einfluß der Streueigenschaften auf den Supermagnetwiderstand **31**
5.1 Bestimmung der Relaxationszeiten 31
5.2 Relaxationszeiten als freie Parameter 34

6 Supermagnetwiderstand der Fe/Cr-Vielfachschichten **37**
6.1 Berechnung des Supermagnetwiderstandsverhältnisses 37
6.2 Supermagnetwiderstand in Abhängigkeit der Zwischenschichtdicke . . . 37
6.3 Supermagnetwiderstand in Abhängigkeit der Dicke der ferromagnetischen Schicht 43
6.4 Fermi-Geschwindigkeit und Zustandsdichte 45

7 Zusammenfassung **47**

A Modellierung von Fermi-Flächen in Schichtsystemen **a**
A.1 Modellierung der Systeme . . . . . a
A.2 Tight-Binding-Bandstrukturberechnung c
A.3 Fermiflächen der Modellsysteme . . . . . h

B Fermi-Flächen ausgewählter Systeme **l**

C Atomare Einheiten **r**

1 Themenstellung

Der Supermagnetwiderstands-Effekt tritt in magnetischen Vielfachschichten auf. Diese bestehen aus einer Anzahl metallischer, magnetischer Schichten, die durch nichtmagnetische Schichten voneinander getrennt werden (Sandwichstruktur). Als Ferromagneten verwendet man die 3d-Übergangsmetalle Fe, Co und Ni mit ihrem ausgeprägten Bandmagnetismus. Als Zwischenschicht -*Spacer*- eignen sich alle anderen metallischen Elemente oder Legierungen. Oft verwendet man die Edelmetalle Cu, Ag und Au, sowie die 3d- bzw. 4d-Übergangsmetalle, z.B. Cr, V, Pd und Ru. Schichtsysteme aus Fe und Cr bzw. Co und Cu wurden besonders umfangreich experimentell untersucht, da in diesen Fällen die Gitterstrukturen der Komponenten sehr gut aufeinander passen.
Seit einigen Jahren ist es möglich, Festkörperschichten mit Dicken im Nanometerbereich und einigen hundert Quadratmillimetern lateraler Ausdehnung reproduzierbar herzustellen. Dies bezieht sich sowohl auf die Dicke der Schichten sowie die Topologie ihrer Ober- und Grenzflächen. So können Werkstoffe mit einer künstlich erzeugten Überstruktur hergestellt werden, die in der Natur nicht vorkommen und völlig neue Eigenschaften und Verhaltensweisen zeigen.
Durch die Entdeckung der Zwischenschichtkopplung durch P. Grünberg [1] im Jahre 1986 sowie des Supermagnetwiderstands-Effektes durch Gruppen um P. Grünberg und A. Fert [2, 3] haben die Forschungen auf dem Gebiet der magnetischen Schichten und Schichtsysteme großen Auftrieb erhalten.
Aufgrund der Zwischenschichtkopplung richten sich die magnetischen Momente benachbarter magnetischer Schichten unter einem bestimmten Winkel zueinander aus. In Abhängigkeit der Zwischenschichtdicke findet ein periodischer Wechsel zwischen paralleler und antiparalleler Ausrichtung statt. Die Periodenlängen dieser Oszillationen können mit Hilfe der Rudermann-Kittel-Kasuya-Yosida-Wechselwirkungstheorie bestimmt werden. Wird ein System, in dem die Momente benachbarter Schichten antiparallel ausgerichtet sind, in ein ausreichend starkes Magnetfeld gebracht, so richten sich alle inneren Momente parallel zum äußeren Feld aus. Bei der Umordnung der magnetischen Momente verändert sich der elektrische Widerstand viel stärker als im Fall des normalen Magnetwiderstandseffektes. Deshalb wird dieser Effekt Supermagnetwiderstand genannt. Das Verhältnis der Widerstandsdifferenz zum Widerstand bei paralleler Ausrichtung der Momente wird als Supermagnetwiderstandsverhältnis $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ bezeichnet und zur quantitativen Analyse des Effektes herangezogen. Bei einer Temperatur von 1.5 K wurden Werte bis $\frac{\Delta\rho}{\rho} = 220\%$ sowie bei Zimmertemperatur bis $\frac{\Delta\rho}{\rho} = 42\%$ gefunden [4].
In Abschnitt 2 sind experimentelle Ergebnisse und Ansätze zu deren theoretischer Interpretation zusammengestellt.
Um ein tieferes theoretisches Verständnis des Supermagnetwiderstandes zu erlangen,

sollten die mikroskopischen Ursachen untersucht werden. Ziel der vorliegenden Arbeit war es, den Supermagnetwiderstands-Effekt von Fe/Cr-Vielfachschichten bei tiefen Temperaturen aus ersten Prinzipien zu berechnen. Fe/Cr-Vielfachschichten sind experimentell umfangreich untersucht. Außerdem liegen *ab-initio* Rechnungen zu Streueigenschaften von Cr-Punkdefekten in einer Fe-Matrix vor [79]. Zur Bestimmung des Supermagnetwiderstandsverhältnisses ist es notwendig, die Leitfähigkeiten der Vielfachschichten bei paralleler bzw. antiparalleler Ausrichtung der magnetischen Fe-Momente zu bestimmen.

Die Transporteigenschaften wurden durch Lösung der linearisierten BOLTZMANN-Gleichung in Relaxationszeitnäherung unter Berücksichtigung der anisotropen Grundzustandseigenschaften ermittelt. Die Vorgehensweise dabei wird in Abschnitt 3 erläutert.

Im darauf folgenden Abschnitt wird die Berechnung der Grundzustandseigenschaften der Schichtsysteme dargestellt. Die Vielfachschichtsysteme wurden durch große Elementarzellen -Superzellen- charakterisiert. Die Bandstruktur wurde für beide magnetische Konfigurationen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie mittels eines LCAO-Schemas berechnet. Die anisotrope FERMI-Fläche und FERMI-Geschwindigkeit ergaben sich unter Verwendung einer modifizierten Tetraedermethode (nach [5]).

Der Zusammenhang des Supermagnetwiderstandes mit der Spinabhängigkeit der in den Schichten vorhandenen Streumechanismen wird in Abschnitt 5 untersucht.

In Abschnitt 6 sind die gefundenen Abhängigkeiten des Supermagnetwiderstands-Effektes zusammengestellt und diskutiert.

Zum prinzipiellen Verständnis für das Verhalten der FERMI-Flächen von Schichtsystemen wurden Modellsysteme in Tight-Binding-Näherung behandelt (siehe Anhang A). Hieraus lassen sich Modellvorstellungen ableiten.

Die in der Arbeit gewonnenen Ergebnisse belegen, daß die angewandten Methoden zur theoretischen Beschreibung des Supermagnetwiderstandes geeignet sind.

2 Experimentelle Phänomene

In diesem Kapitel werden grundlegende experimentelle Ergebnisse zu den Phänomenen der Zwischenschichtkopplung und des Supermagnetwiderstandes sowie einfache Modelle zu deren theoretischer Erklärung vorgestellt. Dabei gilt das besondere Interesse den Experimenten an Fe/Cr-Schichtsystemen.

2.1 Oszillierende Zwischenschichtkopplung

2.1.1 Experimentelle Ergebnisse

Die ersten erfolgreichen Versuche zum Phänomen der Zwischenschichtkopplung wurden in der Gruppe um P. Grünberg in Jülich ausgeführt [1]. Dabei wurde eine Dreifachschicht aus Fe (Schichtnormale parallel zur [001]-Richtung) und Cr als Zwischenschicht verwendet. In den Ferromagneten bilden sich magnetische Domänen aus, in denen die Richtung der Magnetisierung im allgemeinen in der Schichtebene liegt. Mittels des magnetooptischen Kerr-Effektes (MOKE) und der Rasterelektronenmikroskopie mit Polarizationsanalyse (SEMPA) wurde die relative Lage der magnetischen Momente in Grund- und Deckschicht ermittelt [15, 7, 8, 9] (siehe Abb. 1).

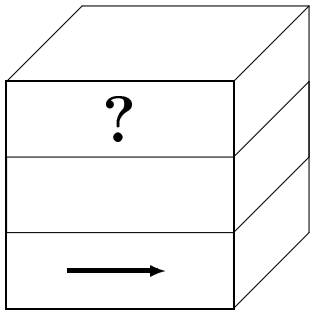


Abb. 1: Prinzipielle Anordnung zur Bestimmung der Zwischenschichtkopplung an einer Dreifachschicht, oben und unten magnetisches Material, dazwischen nichtmagnetisches Material

Es zeigte sich, daß sowohl parallele, antiparallele als auch senkrechte Ausrichtungen der Momente auftreten. Dies wird mit den Begriffen der ferromagnetischen (fm), antiferromagnetischen (afm) sowie 90 °-Kopplung beschrieben. In Abhängigkeit der Dicke der Zwischenschicht (0 .. 100 Å) erfolgt ein periodischer Wechsel zwischen afm und fm Kopplung. Es treten Oszillationen unterschiedlicher Periodenlängen auf.

In einem einfachen phänomenologischen Modell kann dies wie folgt beschrieben werden

$$E \;=\; J_1\, cos\theta \;- J_2\, cos^2\theta \qquad . \tag{1}$$

E ist die Wechselwirkungsenergie und θ der Winkel zwischen den magnetischen Momenten in Grund- und Deckschicht. J_1 und J_2 sind Kopplungskonstanten, die die kolineare (afm, fm) bzw. 90 ° -Kopplung beschreiben. Durch Messung der Hysterese der Schichtmagnetisierung lassen sich die Konstanten J_1 und J_2 in Abhängigkeit der Zwischenschichtdicke ermitteln. Hieraus können die Amplituden und Perioden der Kopplungsoszillationen bestimmt werden. Dabei zeigt es sich, daß die Periodenlängen in erster Linie vom Zwischenschichtmaterial abhängig sind.

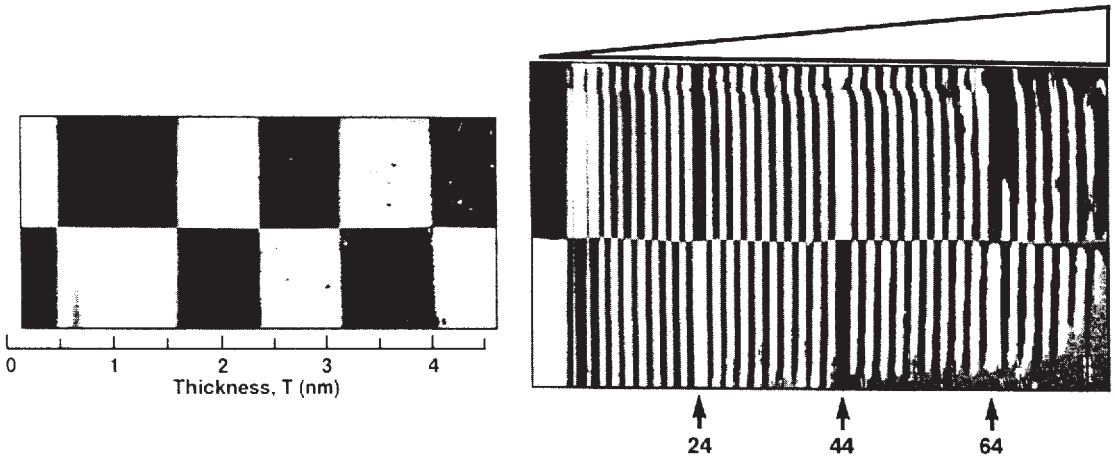


Abb. 2: Magnetische Kopplung der Fe-Schichten einer FeCr[001]-Dreifachschicht in Abhängigkeit der Zwischenschichtdicke, aufgenommen mit SEMPA,
links : rauhe Granzflächenstruktur, Cr-Dicke T in nm, λ_l sichtbar, [7]
rechts : glatte Grenzfläche, Cr-Dicke in ML (1 ML $\approx 1.4\mathring{A}$), λ_s und Phasensprünge erkennbar, oben ist der Dickenverlauf des Chromkeils aufgetragen, [8]

Für Cr ergeben sich zwei Perioden von $\lambda_s \approx 2$ bzw. $\lambda_l \approx 10 - 12$ Monolagen (ML) [7, 8, 15]. Diese Oszillationen lassen sich durch eine bestimmte Probengeometrie verdeutlichen. Verwendet wird eine keilförmige Zwischenschicht (d= 0 .. 20 .. 50 Å) und ein Substrat mit sehr großen magnetischen Domänen in Keilrichtung. In Abbildung 2 sind die Gebiete mit entgegengesetzter Kopplung (afm, fm) unterschiedlich gefärbt. In Abhängigkeit der Herstellungstemperatur der Probe verändert sich die Rauhigkeit der Grenzflächen. In Abb. 2, linker Teil, ist aufgrund der rauheren Grenzflächenstruktur nur die langperiodische Oszillation erkennbar. Bei glatterer Struktur der Grenzflächen erkennt man die 2 ML-Oszillation sowie die Phasensprünge bei 4, 24, 44 und 64 ML Dicke (s. Abb. 2, rechter Teil). In Tabelle I ist eine Übersicht über die Oszillationsperi-

oden verschiedener Schichtsysteme gegeben. Auffällig dabei ist, daß in unterschiedliche kristallographische Richtungen verschieden viele und ungleich lange Perioden auftreten. Bei der Untersuchung der Abhängigkeit der Kopplungstärke von der Dicke der ferromagnetischen Schicht konnte für Fe ebenfalls eine Oszillation mit einer Periode von ca. 6 Monolagen festgestellt werden [10]. In Anlehnung an den deHaas-vanAlphen-Effekt wird zur Erklärung ein maximaler Durchmesser der Fermi-Fläche der Majoritätselektronen von Fe in [001]-Richtung herangezogen [11] (s. Abb. 30, Anlage B).

Tab. I: Oszillationsperioden der Zwischenschichtkopplung für verschiedene Systeme (Theorie und Experiment)

Schichtsystem	Richtung	Th./Exp.	$\lambda_s[ML]$	$\lambda_l[ML]$	Referenz
Fe/Cr	[001]	T	2	8..10	[12]
		T	2.15	12.3	[13]
		E	≈ 2	10..12	[7]
		E	2		[14]
		E		10..12	[15]
		E		15	[39]
Co/Cu	[111]	T	4.5		[21]
		E	$\approx$5		[18]
	[100]	T	2.6	5.9	[21]
		E	2.6	8	[19]

Zur theoretischen Erklärung der Zwischenschichtkopplung wurden Untersuchungen auf der Grundlage der RKKY-Theorie der Kopplung zwischen magnetischen Momenten durchgeführt [22, 20, 21, 35]. Zum anderen liegen Arbeiten zu Gesamtenergieberechnungen auf der Grundlage von Bandstrukturrechnungen vor [12, 24, 25, 26]. Es wurden auch Modellrechnungen mit verschiedenen Gitterpotentialen vorgestellt [27, 28, 29]. Im folgenden sollen kurz die Grundgedanken der RKKY-Wechselwirkungstheorie dargestellt werden.

2.1.2 RKKY-Wechselwirkung

Der theoretische Ansatz wurde ursprünglich von M.A. Rudermann und C. Kittel 1954 [30] entwickelt, um die Wechselwirkung von Kernspinmomenten, die durch ein Gas von Leitungselektronen vermittelt wird, zu beschreiben. In den Folgejahren wurde er von T. Kasuya [31] und K. Yosida [32] auf die Wechselwirkung von magnetischen Störungen in Festkörpern erweitert.
Bringt man in ein Elektronengas eine punktförmige Ladungsstörung, so wird diese durch Veränderungen der Ladungsdichte abgeschirmt. Im Modell des freien Elektronengases läßt sich die daraus resultierende Ladungsdichtewelle analytisch bestimmen. Die am Ort $\mathbf{R}$ relativ zur Störung hervorgerufenen Ladungsdichteänderung $\Delta n(\mathbf{R})$ beträgt

$$\begin{aligned} \Delta n(\mathbf{R}) &\propto \frac{1}{R^4}(\, 2k_F R\, \cos 2k_F R - \sin 2k_F R\,) \\ &\propto \frac{cos 2k_F R}{R^3} \qquad \text{für} \qquad 2k_F R \gg 1 \qquad . \end{aligned} \tag{2}$$

Diese Oszillationen werden als Friedel-Oszillationen bezeichnet [33]. R bezeichnet den Betrag von $\mathbf{R}$ und k_F den Fermi-Wellenvektor. Führt man eine ebene Störung senkrecht zur z-Achse ein, so kann man sie als Menge von punktförmigen Störungen modellieren. Die Überlagerung der kugelförmigen Ladungsdichtewellen führt zu einem asymptotischen Verhalten der induzierten Ladungsdichte im Abstand z von der Störung

$$\Delta n(z) \;\propto\; \frac{sin 2k_F z}{z^2} \qquad \text{für} \qquad 2k_F z \gg 1. \tag{3}$$

Das Vorhandensein einer punktförmigen oder flächenförmigen magnetischen Störung führt zu analogen Oszillationen der Magnetisierungsdichte

$$\Delta m(\mathbf{r}) \;=\; \Delta n^{\uparrow}(\mathbf{r}) - \Delta n^{\downarrow}(\mathbf{r}) \qquad . \tag{4}$$

$\Delta n^{\uparrow}(\mathbf{r})$ und $\Delta n^{\downarrow}(\mathbf{r})$ bezeichnen die Ladungsdichtestörungen der Majoritäts- bzw. Minoritätselektronen.
Bringt man zwei Defekte im Abstand R bzw. z zueinander in ein freies Elektronengas, so kommt es zur Superposition der auftretenden Ladungs- bzw. Magnetisierungsdichtewellen. Für große Abstände gelten für die Wechselwirkungsenergien analoge Beziehungen zu den Gleichungen (2) und (3).
Bringt man die oben angegebenen Störungen in ein Gas von Bloch-Elektronen, so sind die resultierenden Dichteschwankungen nicht einfach analytisch zu bestimmen. Der wichtigste Unterschied besteht im Auftreten von Dichtewellen mit mehreren Os-

zillationsperioden, die durch die Topologie der FERMI-Fläche des Systems bestimmt werden.
Betrachten wir eine punktförmige Ladungsdichtestörung in einem Gas von BLOCH-Elektronen (vgl. Abb. 3). Die in Richtung $\mathbf{e}$ relativ zur Störung auftretende Oszillation der Ladungsdichte wird durch *stationäre Punkte* $\boldsymbol{k}_i$ auf der FERMI-Fläche bestimmt. Für einen stationären Punkt $\boldsymbol{k}_i$ gilt die Bedingung, daß die FERMI-Geschwindigkeit $\frac{\partial \epsilon_k}{\partial \mathrm{k}}\Big|_{\mathbf{k}_i}$ parallel zur Richtung $\mathbf{e}$ ist.

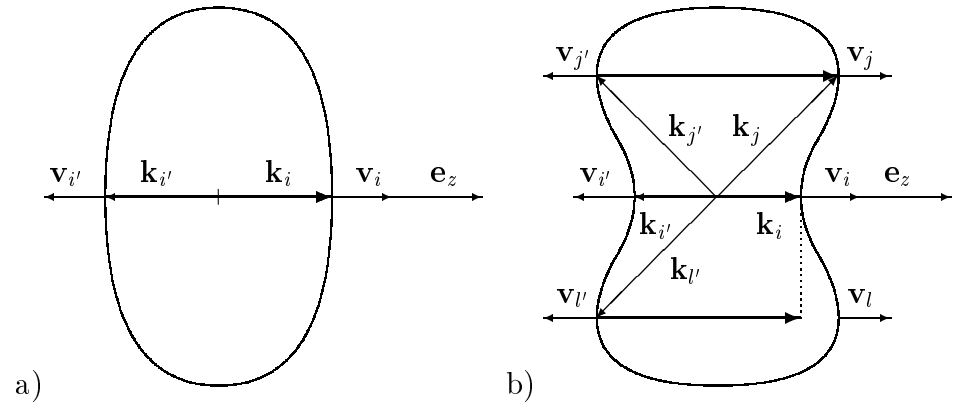


Abb. 3: Stationäre Punkte der FERMI-Fläche für eine punktförmige Ladungs- oder Magnetisierungsdichtestörung, nach [34]
a) ellipsoidale FERMI-Fläche mit 2 stationären Punkten, es resultiert genau eine Oszillationsperiode
b) komplexere FERMI-Fläche mit 6 stationären Punkten, daraus resultieren 3 Oszillationsperioden

Die Periodenlänge wird durch die Differenz $(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_{i'})\mathbf{e}$ je zwei solcher Punkte bestimmt (s. Abb. 3). Im Fall einer magnetischen Störung treten die gleichen Oszillationsperioden auf (vgl. Gl. (4)). Diese bestimmen auch das Verhalten der Wechselwirkungsenergie zweier solcher Defekte.
Erweitert man diese Betrachtungen auf ebene magnetische Störungen, so ergeben sich für die stationären Punkte $\boldsymbol{k}_i$ und $\boldsymbol{k}_{i'}$ die folgenden Bedingungen [34] (vgl. Abb. 4):

1. Die Wellenvektoren $\boldsymbol{k}_i$ und $\boldsymbol{k}_{i'}$ müssen die gleiche Komponente parallel zur Schichtebene besitzen und
2. die Gruppengeschwindigkeiten $\boldsymbol{v}_i$ und $\boldsymbol{v}_{i'}$ müssen entgegengesetzt gerichtet sein (s. Abb. 4).

Die Wellenzahl, hervorgerufen durch zwei Punkte $\boldsymbol{k}_i$ und $\boldsymbol{k}_{i'}$, beträgt $(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_{i'})\mathbf{e}_z$, wobei $\boldsymbol{e}_z$ der Normalenvektor der ebenen Störung sei. Stimmen zusätzlich die Krümmungen der FERMI-Fläche in den Punkten $\boldsymbol{k}_i$ und $\boldsymbol{k}_{i'}$ in ein oder zwei Normalenrichtungen

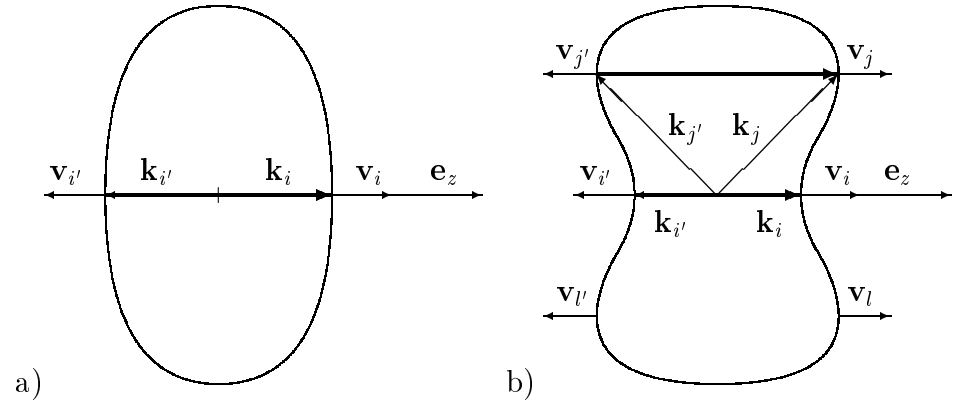


Abb. 4: Stationäre Punkte der FERMI-Fläche für eine ebene Magnetisierungsdichtestörung,
die Paare $\boldsymbol{k}_i$ und $\boldsymbol{k}_{i'}$ bzw. $\mathbf{k}_j$ und $\boldsymbol{k}_{j'}$ haben die gleiche Parallelkomponente zur Schichtnormalen $\boldsymbol{e}_z$, nach [34]
a) ellipsoidale FERMI-Fläche mit 2 stationären Punkten, es resultiert genau eine Oszillationsperiode
b) komplexere FERMI-Fläche mit 6 stationären Punkten, daraus resultieren 2 Oszillationsperioden

überein, so wird dies *nesting* genannt. Die Magnetisierungsdichteoszillationen haben eine größere Reichweite, da sie proportional zu $z^{-\frac{3}{2}}$ bzw. z^{-1} abklingen [35].
Für die Wechselwirkungsenergie der beiden magnetischen Ebenen stellen sich dazu analoge Oszillationen ein. Deshalb treten bei Metallen mit anisotropen FERMI-Flächen in unterschiedliche kristallographische Richtungen verschiedene Periodenlängen der Zwischenschichtkopplung auf. Im Fall der magnetischen Vielfachschichten betrachtet man die ferromagnetischen Schichten als ebene Störungen im Elektronengas der Zwischenschicht und die Ausrichtung der magnetischen Momente wird gut durch die obengenannten Oszillationen der Wechselwirkungsenergie beschrieben.

2.2 Supermagnetwiderstands-Effekt

Aufgrund der oszillierenden Zwischenschichtkopplung (s. o.) läßt sich die Dicke der Zwischenschicht so wählen, daß die magnetischen Schichten in einem Schichtsystem antiferromagnetisch koppeln. Bringt man dieses System in ein hinreichend starkes Magnetfeld so richten sich die magnetischen Momente parallel zu diesem Feld aus. Solche Versuche wurden erstmals 1988 in den Gruppen um P. Grünberg und A. Fert erfolgreich an einem Fe/Cr-System durchgeführt. Es wurde festgestellt, daß sich bei diesem Ummagnetisierungsvorgang auch der elektrische Widerstand erheblich verringert [2, 3] (siehe Abb. 5). Dabei wird das äußere Magnetfeld stets parallel zur Schichtebene angelegt, so daß nach der Sättigung eine magnetische Konfiguration ähnlich der bei ferromagnetischer Kopplung (fm Konfiguration) entsteht.

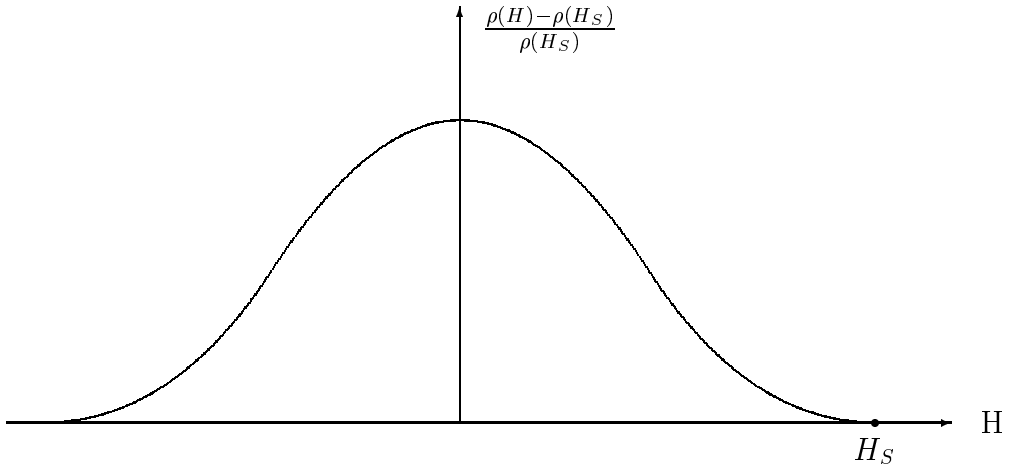


Abb. 5: Supermagnetwiderstands-Effekt: Widerstand in Abhängigkeit des magnetischen Feldes **H**, H_S bezeichnet die Sättigungsfeldstärke

Der Tensor der elektrischen Leitfähigkeit hat für tetragonale Systeme prinzipiell zwei Komponenten ($\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, σ_{zz}). Diese können durch Anlegen einer Spannung parallel bzw. senkrecht zur Schichtebene bestimmt werden. Man nennt diese die CIP-(*current in plane*)- bzw. CPP-(*current perpendicular to plane*)-Anordnung (s. Abb. 6). In beiden Richtungen konnte der Effekt des Supermagnetwiderstandes nachgewiesen werden [2, 3, 36, 37].
Zur quantitativen Analyse des Effektes wird ein Supermagnetwiderstandsverhältnis wie folgt definiert

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho^{\uparrow\downarrow} - \rho^{\uparrow\uparrow}}{\rho^{\uparrow\uparrow}} = \frac{\sigma^{\uparrow\uparrow}}{\sigma^{\uparrow\downarrow}} - 1 \quad . \tag{5}$$

Dabei bedeuten $\rho^{\uparrow\downarrow}$ und $\sigma^{\uparrow\downarrow}$ Widerstand bzw. Leitfähigkeit im afm Ausgangszustand bei äußerem Feld $\mathbf{H} = 0$ und $\rho^{\uparrow\uparrow}$, $\sigma^{\uparrow\uparrow}$ die entsprechenden Werte bei Sättigung des Effektes

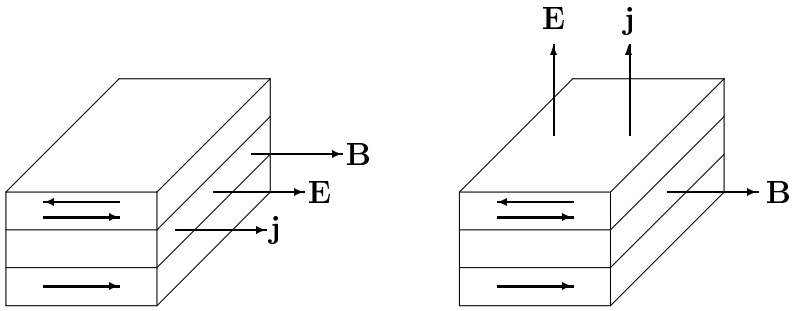


Abb. 6: CIP- und CPP-Anordnung zur Messung des Supermagnetwiderstands-Effektes
Magnetfeld **B**, elektrisches Feld **E** und Strom **j**

durch parallele Ausrichtung der Momente. In Tabelle II sind einige experimentelle Ergebnisse für Fe/Cr[001]-Vielfachschichten verschiedener Autoren zusammengestellt.

Tab. II: Übersicht über experimentell gefundene Werte des Supermagnetwiderstandsverhältnisses in Fe/Cr[001]-Schichtsystemen,
d_{Fe}, d_{Cr} Dicke der Fe- bzw. Cr-Schicht,
N Anzahl der Doppellagen der untersuchten Vielfachschicht,
T Meßtemperatur

d_{Fe} [Å]	d_{Cr} [Å]	N	T[K]	$\frac{\Delta\rho}{\rho}$ [%]	Anordnung	Referenz
30	10	100	9.3	108	CPP	[36]
30	10	100	300	14	CPP	[36]
42	12	50	4.2	64	CIP	[4]
4.5	12	50	1.5	220	CIP	[4]
4.5	12	50	300	42	CIP	[4]
30	10	100	4.0	26	CIP	[37]
30	10	100	300	7.5	CIP	[37]
30	10	?	5	73	CIP	[61]
30	10	?	293	14	CIP	[61]

Bei Untersuchungen zur Abhängigkeit des Supermagnetwiderstandsverhältnisses von der Dicke der Zwischenschicht wurde festgestellt, daß hierbei Oszillationen mit bestimmten Perioden auftreten. Für Fe/Cr[001]-Systeme wurde eine kurze Periode λ_s von etwa 2 ML [40] und eine lange Periode λ_l von etwa 13 ML [38] bzw. 15 ML [39] ermittelt. Diese Oszillationen verlaufen phasengleich mit denen der Zwischenlagenkopplung [40]. Es gibt einen Zusammenhang zwischen der Kopplungsstärke und dem Supermagnetwiderstandsverhältnis, der bisher noch nicht genauer geklärt wurde.
Ebenso besitzt der Supermagnetwiderstand eine oszillierende Abhängigkeit von der

Dicke der ferromagnetischen Schicht. In den Fe/Cr[001]-Systemen wurde eine Oszillationsperiode von 6 ML sowohl für den Supermagnetwiderstand als auch für die Zwischenschichtkopplung gefunden [10].
Das Verhalten des Supermagnetwiderstandes in Abhängigkeit der Temperatur ist gut verstanden. Es wurde festgestellt, daß bei Anwachsen der Temperatur von Helium- auf Zimmertemperatur der Supermagnetwiderstand in CIP-Anordnung ca. um den Faktor 2.5 [41, 37] und in CPP-Anordnung um den Faktor 8 [37] sinkt.
Die theoretischen Vorstellungen zur Ursache des Supermagnetwiderstandes basieren auf dem MOTTschen Zweistrommodell [42]. Hierbei wird angenommen, daß die Elektronen mit unterschiedlicher Spinrichtung zwei unabhängige Leitfähigkeitskanäle bilden. Der Gesamtwiderstand ρ läßt sich als Parallelschaltung der Spinbandwiderstände $\rho^{\uparrow}$ und $\rho^{\downarrow}$ auffassen

$$\rho = \frac{\rho^{\uparrow}\rho^{\downarrow}}{\rho^{\uparrow} + \rho^{\downarrow}} \qquad . \tag{6}$$

Dies ist für tiefe Temperaturen, für die hauptsächlich spinerhaltende Streuung an Defekten auftritt, eine gute Näherung [43]. Bei höheren Temperaturen kommen als weitere Ursachen des elektrischen Widerstandes die Streuung an Phononen und Magnonen hinzu. Die Phononenstreuung ist spinunabhängig und vergrößert den Betrag beider Spinbandwiderstände und somit den Gesamtbetrag für beide magnetische Konfigurationen. Dadurch verringert sich das Supermagnetwiderstandsverhältnis (s. Gl. (5)). Die Streuung an Magnonen -*spin-flip-Streuung*- führt zu einem Ausgleich beider Spinbandwiderstände. Dies verursacht eine Verringerung der Differenz der Gesamtwiderstände $\rho^{\uparrow\downarrow} - \rho^{\uparrow\uparrow}$, woduch das Supermagnetwiderstandsverhältnis stark vermindert wird (s. Gl. (5)).
Die theoretischen Modelle, die zur Klärung des Supermagnetwiderstandes verwendet wurden, lassen sich in 3 Klassen einordnen. In vielen Modellen wird angenommen, daß in den Schichten eine Streuung erfolgt -*bulk scattering*, sowie durch die Rauhigkeiten der Ober- und Grenzflächen weitere Streumechanismen -*interface scattering*- gegeben sind. Die Steustärken dieser Mechanismen können meist unabhängig voneinander variiert werden. Welcher der beiden Prozesse der für den Effekt dominierende ist, konnte bisher weder von theoretischer Seite noch durch Experimente eindeutig geklärt werden.
Modelle auf quantenmechanischer Grundlage, wie erstmals von P. M. Levy vorgestellt [44, 45], können den Abfall des Supermagnetwiderstandes mit wachsender Zwischenschichtdicke für größere Dicken gut erklären [46, 47]. Jedoch wird für kleine Dicken ein sehr großer Supermagnetwiderstand vorhergesagt, der experimentell nicht bestätigt werden konnte.
Eine weitere Gruppe von Modellen basiert auf der Erweiterung der FUCHS-SONDHEIMER-Theorie [48, 49] auf Vielfachschichten [50, 51, 52, 53, 54]. Die Gültigkeit der mit diesen

Modellen erzielten Ergebnisse wird durch die Annahme, daß die Dicken der Einzelschichten größer als die mittlere freie Weglänge der Elektronen sind, entscheidend eingeengt. Für experimentell verwendete Systeme mit $d_{Fe} \approx 30$Å und $d_{Cr} \approx 10$ .. 40Å sind sie praktisch nicht anwendbar, da die mittlere freie Weglänge im Bereich einiger tausend Ångström liegt.
Bisher sind nur wenige Arbeit bekannt, in denen aus ersten Prinzipien der Supermagnetwiderstand eines Supergitters für Fe/Cr-Systeme berechnet wurde [55, 56, 57, 58]. In [56] wurden nur spinunabhängige Streumechanismen betrachtet. Allein aufgrund der Anisotropie einiger FERMI-Flächen-Parameter wurde eine Differenz im Gesamtwiderstand zwischen der afm und fm Konfiguration gefunden. Dieses Resultat kann durch die vorliegende Arbeit bestätigt werden.
Werden Schichtsysteme aus mehr als zwei Metallen aufgebaut, so kann bei entsprechender Auswahl der Metalle ein „inverser“ Supermagnetwiderstands-Effekt nachgewiesen werden [59]. Hierbei vergrößert sich der Widerstand der Vielfachschicht bei paralleler Ausrichtung der Momente in den ferromagnetischen Schichten.

3 Transporttheorie

In diesem Kapitel wird die Lösung der BOLTZMANN-Gleichung in Relaxationszeitnäherung erläutert. Die Ergebnisse werden zur Berechnung der elektrischen Transportkoeffizienten benutzt.

3.1 Boltzmann-Gleichung in Relaxationszeitnäherung

Die Ladungsträger in einem metallischen Festkörper können durch äußere Felder beeinflußt werden. In einem idealen Kristall ist dies ohne innere Widerstände möglich. In einem realen Kristall unterliegen sie jedoch der Streuung an Fremdatomen und Gitterstörungen. Bei endlichen Temperaturen kommt hierzu noch die Streuung an anderen angeregten Quasiteilchen, wie Phononen, Magnonen und Polaronen. Alle diese Effekte müssen gegeneinander abgewogen werden und führen zu einem bestimmten Transportverhalten.
Dies ist mittels der Transport- oder BOLTZMANN-Gleichung möglich. Man betrachtet die Einteilchenbesetzungsfunktion $f_k(\mathbf{r},\mathrm{t})$, die die Besetzung des Zustandes $|\, k \,\rangle$ in einem Raumgebiet um den Ort $\mathbf{r}$ zum Zeitpunkt t beschreibt. Der Index k ist eine Zusammenfassung von Wellenvektor $\mathbf{k}$ und Bandindex ν zu k= $(\mathbf{k}, \nu)$. Für räumlich und zeitlich homogene Randbedingungen bleibt nur die Abhängigkeit von k bestehen

$$f_k(\mathbf{r}, t) = f_k \qquad \text{für } \tfrac{\partial}{\partial \mathbf{r}} = 0 \text{ und } \tfrac{d}{dt} = 0 \qquad . \tag{7}$$

Nach dem LIOUVILLEschen Theorem über die Invarianz des besetzten Phasenraumvolumens läßt sich die folgende Bilanzgleichung aufstellen

$$\frac{\partial f_k}{\partial t}\Big]_{Feld} + \frac{\partial f_k}{\partial t}\Big]_{Streu} = \quad 0 \qquad . \tag{8}$$

Ein zeitlich und räumlich konstantes elektrisches Feld der Stärke $\mathbf{E}$ ändert den Wellenvektor $\mathbf{k}$ eines Elektrons $|\, k \,\rangle$ gemäß

$$\dot{\mathbf{k}} \;=\; -\,\frac{e}{\hbar}\mathbf{E} \qquad , \tag{9}$$

und die Verteilung ändert sich infolge des Feldes um

$$\frac{\partial f_k}{\partial t}\Big]_{Feld} = \; -\,\frac{e}{\hbar}\,\mathbf{E}\nabla_{\mathbf{k}} f_k = -e\;\mathbf{E}\;\mathbf{v}_k \left(\frac{\partial f_k}{\partial \epsilon_k}\right) \qquad . \tag{10}$$

e bezeichnet die Elementarladung $e = -|e|$ und $\mathbf{v}_k$ die Gruppengeschwindigkeit $\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon_k}{\partial \mathrm{k}}$. Mittels der mikroskopischen Übergangswahrscheinlichkeit $P_{kk'}$ (siehe Abschnitt 5.1) kann man die zeitliche Änderung von f_k aufgrund von Streuprozessen ausdrücken

$$\left.\frac{\partial f_k}{\partial t}\right]_{Streu} = \sum_{k'} P_{kk'}[f_{k'}(1-f_k) - f_k(1-f_{k'})] \quad . \tag{11}$$

Dabei werden das PAULI-Prinzip und die mikroskopische Reversibilität des Übergangs von $|\,k\,\rangle$ nach $|\,k'\,\rangle$ berücksichtigt. Die Gleichgewichtsverteilung f_k^o des ungestörten Systems ist die FERMI-DIRAC-Verteilung

$$f_k^o = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \epsilon_F)/k_B T} + 1} \quad , \tag{12}$$

wobei ϵ_k die Energie des Zustands $|\,k\,\rangle$, ϵ_F die FERMI-Energie, k_B die BOLTZMANN-Konstante und T die Temperatur bezeichnen. Für sehr tiefe Temperaturen (T $\rightarrow$ 0 K) geht diese in eine Θ-Funktion über

$$\lim_{T\to 0} f_k^o = \Theta(\epsilon_F - \epsilon_k) \quad . \tag{13}$$

Die Abweichung der Verteilungsfunktion von der Gleichgewichtsverteilung wird durch eine Funktion g_k beschrieben

$$f_k = f_k^o + g_k \quad . \tag{14}$$

Führt man dies in Gl. (11) ein, so entsteht

$$\left.\frac{\partial f_k}{\partial t}\right]_{Streu} = \sum_{k'} P_{kk'}(g_{k'} - g_k) \quad . \tag{15}$$

Unter der Annahme, daß die durch das äußere **E**-Feld verursachten Störungen klein sind, kann man eine lineare Antwort -*lineare Response*- des Systems annehmen

$$g_k = -e\left(\frac{\partial f_k^o}{\partial \epsilon_k}\right)\mathbf{\Lambda}_k \mathbf{E} \quad . \tag{16}$$

Der Vektor der freien Weglänge $\mathbf{\Lambda}_k$ beschreibt die Änderung der Verteilungsfunktion f_k linear zu einem elektrischen Feld **E**. Der Faktor $\frac{\partial f_k^o}{\partial \epsilon_k}$ berücksichtigt, daß nur Elektronen mit Energien nahe der FERMI-Energie zum Transport beitragen.

Mit den Gleichungen (8), (10), (15) und (16) entsteht unter Vernachlässigung von Termen höherer Ordnung die linearisierte BOLTZMANN-Gleichung

$$\mathbf{\Lambda}_k = \tau_k \left[\mathbf{v}_k + \sum_{k'} P_{kk'} \mathbf{\Lambda}_{k'} \right] = \tau_k \, \mathbf{v}_k + \tau_k \sum_{k'} P_{kk'} \mathbf{\Lambda}_{k'} \quad . \tag{17}$$

Dabei wurde die Relaxationszeit τ_k folgendermaßen eingeführt

$$(\tau_k)^{-1} = \sum_{k'} P_{kk'} \quad . \tag{18}$$

In Gl. (17) beschreibt der erste Term $\tau_k \mathbf{v}_k$ die Streuung aus dem Zustand $|\, k \,\rangle$ in die Zustände |k'⟩ und der zweite Term die Streuung aus $|\, k' \,\rangle$ nach $|\, k \,\rangle$ -*Scattering-In*-Term. Die BOLTZMANN-Gleichung bildet eine lineare Integralgleichung zur Bestimmung der $\mathbf{\Lambda}_k$ und der Verteilungsfunktion f_k im stationären Zustand. Die Lösung von Gl. (17) in Relaxationszeitnäherung bedeutet die Vernachlässigung der *Scattering-In*-Terme. Dies wird im weiteren angenommen, da für die Schichtsysteme nur die Relaxationszeiten, nicht aber die Übergangswahrscheinlichkeiten bekannt sind. Der aus dieser Näherung resultierende Fehler der Transportkoeffizienten beträgt für einen Fe(Cr)-Defekt etwa 24 % [60].
In spinpolarisierten Systemen gibt es zwei Sorten von Elektronen, die Majoritäts- und die Minoritätselektronen. Der Spinindex $\sigma \, (= \uparrow, \downarrow)$ sei im folgenden explizit vermerkt. Die mikroskopische Übergangswahrscheinlichkeit läßt sich dann als Matrix

$$P_{kk'}^{\sigma\sigma'} = \begin{pmatrix} P_{kk'}^{\uparrow\uparrow} & P_{kk'}^{\uparrow\downarrow} \\ P_{kk'}^{\downarrow\uparrow} & P_{kk'}^{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \tag{19}$$

schreiben. Vernachlässigt man spin-flip-Streuprozesse, was für tiefe Temperaturen eine brauchbare Näherung ergibt [43], so verschwinden die Nichtdiagonalelemente von $P_{kk'}^{\sigma\sigma'}$. Die spinabhängigen Relaxationszeiten τ_k^σ und die freien Weglängen $\mathbf{\Lambda}_k^\sigma$ ergeben sich zu

$$(\tau_k^\sigma)^{-1} = \sum_{k'} P_{kk'}^{\sigma\sigma} \quad , \tag{20}$$

$$\mathbf{\Lambda}_k^\sigma = \tau_k^\sigma \mathbf{v}_k{}^\sigma \quad . \tag{21}$$

Für die Abweichung von der Gleichgewichtsverteilung erhält man

$$g_k^\sigma = -e \left(\frac{\partial f_k^{o\sigma}}{\partial \epsilon_k} \right) \tau_k{}^\sigma \mathbf{v}_k{}^\sigma \mathbf{E} \quad . \tag{22}$$

Mit den so berechneten Abweichungen von der Gleichgewichtsverteilung lassen sich die Transporteigenschaften des Systems bestimmen (s. Abschnitt 3.2).

3.2 Bestimmung der Transportkoeffizienten

Unter dem Einfluß eines zeitlich konstanten äußeren Feldes stellt sich in einem System ein stationärer Zustand ein, der durch die Besetzungsfunktion f_k der elektronischen Zustände $|\, k \,\rangle$ charakterisiert werden kann. Bei spinpolarisierten Systemen sind die folgenden Betrachtungen für jedes Spinband durchzuführen.
In quasiklassischer Näherung beträgt die elektronische Stromdichte **j**

$$\mathbf{j} = \frac{e}{V} \sum_k f_k \mathbf{v}_k \qquad . \tag{23}$$

Die Summation in Gl. (23) läuft über alle Blochzustände des Systems. $\boldsymbol{v}_k$ bezeichnet die Gruppengeschwindigkeit $\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \epsilon_k}{\partial \mathrm{k}}$ und V das betrachtete Volumen. Wegen der räumlichen Inversionssymmetrie wird für die Gleichgewichtsverteilung f_k^o der Term

$$\sum_k \mathbf{v}_k f_k^o \equiv 0 \qquad , \tag{24}$$

und die Stromdichte läßt sich mittels der Abweichung von der Gleichgewichtsverteilung g_k ausdrücken (s. Gl. (14))

$$\mathbf{j} = \frac{e}{V} \sum_k g_k \mathbf{v}_k \qquad . \tag{25}$$

In der Funktion g_k ist die Ableitung der FERMI-DIRAC-Verteilung nach der Energie ϵ_k enthalten, die für tiefe Temperaturen in eine δ-Distribution übergeht

$$\frac{\partial f_k^o}{\partial \epsilon_k} = -\delta(\epsilon_k - \epsilon_{_F}) \qquad . \tag{26}$$

Unter Verwendung der Gln. (22), (25) und (26) ergibt sich für die Stromdichte

$$\mathbf{j} = \frac{e^2}{V} \sum_k \delta(\epsilon_k - \epsilon_{_F})\ \tau_k\ \mathbf{v}_k\ (\mathbf{v}_k \mathbf{E}) \qquad . \tag{27}$$

In der Näherung zustandsunabhängiger Relaxationszeiten kann τ_k durch einen Mittelwert $\langle \tau_k \rangle_k$

$$\langle \tau_k \rangle_k = \frac{\sum_k\ \delta(\epsilon_k\ -\ \epsilon_{_F})\ \tau_k}{\sum_k\ \delta(\epsilon_k\ -\ \epsilon_{_F})} \tag{28}$$

ersetzt werden (s. Abschnitt 5.1).

Der durch das OHMsche Gesetz definierte Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$ beschreibt den linearen Zusammenhang zwischen Stromdichte $\mathbf{j}$ und dem elektrischen Feld $\mathbf{E}$

$$\mathbf{j} \;=\; \hat{\sigma}\,\mathbf{E} \qquad . \tag{29}$$

Durch Vergleich mit Gl. (27) erhält man für den Widerstand bzw. die Leitfähigkeit

$$\hat{\rho}^{-1} \;=\; \hat{\sigma} \;=\; \frac{e^2}{V}\,\tau\,\sum_k\,\delta(\epsilon_k - \epsilon_{_F})\,\mathbf{v}_k \circ \mathbf{v}_k \qquad . \tag{30}$$

Dabei bedeutet das Zeichen "$\circ$" die tensorielle Verknüpfung zweier Vektoren. Um eine numerische Berechnung von $\hat{\sigma}$ durchführen zu können, wandelt man die k-Summe in ein Flächenintegral um, welches diskretisiert werden kann.

$$\sum_k\,\delta(\epsilon_k - \epsilon_{_F}) \;\;\rightarrow\;\; \frac{V}{(2\pi)^3}\int\limits_{BZ} d^3\mathbf{k}\,\delta(\epsilon_k - \epsilon_{_F}) \tag{31}$$

$$\;=\;\; \frac{V}{(2\pi)^3}\oint dS\int dk_\perp \delta(\epsilon_k - \epsilon_{_F}) \tag{32}$$

Das Integral $\oint dS$ wird über eine Fläche konstanter Energie geführt, auf der $dk_\perp$ senkrecht steht

$$\;=\;\; \frac{V}{(2\pi)^3}\oint\limits_{\epsilon_k = const} dS\int d\epsilon_k \left(\frac{\partial k_\perp}{\partial \epsilon_k}\right)\delta(\epsilon_k - \epsilon_{_F}) \tag{33}$$

$$\;=\;\; \frac{V}{(2\pi)^3}\oint\limits_{FF} dS\,\left(\frac{\partial k_\perp}{\partial \epsilon_k}\right) \qquad . \tag{34}$$

Das Flächenintegral wird über die FERMI-Fläche geführt.
Im weiteren wird der Spinindex σ explizit angegeben. Setzt man für $\frac{\partial k_\perp}{\partial \epsilon_k}$ das Reziproke der Gruppengeschwindigkeit $v^\sigma_{\mathbf{k}}$ ein

$$\hbar v^\sigma_{\mathbf{k}} \;=\; \left|\frac{\partial \epsilon^\sigma_k}{\partial \mathbf{k}}\right| \qquad , \tag{35}$$

dann ergibt sich mit (30), (34) und (35) für die Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^\sigma$

$$\hat{\sigma}^\sigma \;=\; \frac{e^2\tau^\sigma}{(2\pi)^3\,\hbar}\oint\limits_{FF}\frac{dS^\sigma}{v^\sigma_{\mathbf{k}}}\,\mathbf{v}_k{}^\sigma \circ \mathbf{v}_k{}^\sigma \qquad . \tag{36}$$

Sind in einem System mehrere Bänder vorhanden, so ist die Summation über diese gemeinsam mit der k-Summation auszuführen.
Für tetragonale Systeme besitzt $\hat{\sigma}^\sigma$ zwei unterschiedliche Matrixelemente

$$\hat{\sigma}^\sigma = \tau^\sigma \begin{pmatrix} \tilde{\sigma}^\sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\sigma}^\sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\sigma}^\sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad ,$$

$$\tilde{\sigma}^\sigma_{xx} = \frac{e^2}{(2\pi)^3\,\hbar} \oint\limits_{FF} \frac{dS^\sigma}{v^\sigma_{\mathbf{k}}} \left(\mathbf{e}_x \mathbf{v}_k{}^\sigma \right)^2 \quad , \quad \tilde{\sigma}^\sigma_{zz} = \frac{e^2}{(2\pi)^3\,\hbar} \oint\limits_{FF} \frac{dS^\sigma}{v^\sigma_{\mathbf{k}}} \left(\mathbf{e}_z \mathbf{v}_k{}^\sigma \right)^2 \qquad (37)$$

Hierbei wurde die Relaxationszeit τ^σ separiert und $\tilde{\sigma}^\sigma_{xx}$ bzw. $\tilde{\sigma}^\sigma_{zz}$ sind die entsprechenden Fermi-Flächen-Integrale.
Die Leitfähigkeit wird im wesentlichen durch zwei Gruppen von Größen bestimmt. Zum einen benötigt man die Grundzustandseigenschaften des Systems in Form der Fermi-Fläche und der k-abhängigen Fermi-Geschwindigkeit. Zum anderen müssen die Streueigenschaften der im System enthaltenen Störungen in Form der spinabhängigen Relaxationszeiten $\tau^\uparrow$ und $\tau^\downarrow$ bekannt sein. Die Ermittlung dieser Größen für den konkreten Fall von magnetischen Fe/Cr-Schichtsystemen ist in den Abschnitten 4 und 5 erläutert.
Die Zustandsdichten an der Fermi-Energie $n^\sigma(\epsilon_F)$ lassen sich wie folgt als Integral über die Fermi-Fläche ausdrücken

$$n^\sigma(\epsilon_F) = \frac{1}{V} \sum_k \delta(\epsilon^\sigma_k - \epsilon_F) = \frac{1}{(2\pi)^3\hbar} \oint\limits_{FF} \frac{dS^\sigma_k}{v^\sigma_k} \quad . \qquad (38)$$

Die Zustandsdichte der Majoritätselektronen der fm Konfiguration soll mit $n^\uparrow(\epsilon_F)$ bezeichnet werden. Die Integration ist über alle Blätter der Fermi-Fläche der Majoritätselektronen auszuführen. $n^\downarrow(\epsilon_F)$ bezeichnet die ensprechende Zustandsdichte der Minoritätselektronen. In der afm Konfiguration ist die Zustandsdichte an der Fermi-Energie $n^{\uparrow\downarrow}(\epsilon_F)$. Die Integration ist über alle Blätter der zweifach entarteten Fermi-Fläche zu führen.

4 Grundzustandseigenschaften der Fe/Cr-Vielfachschichten

Dieses Kapitel ist der Bestimmung der Grundzustandseigenschaften der Vielfachschichtsysteme gewidmet. Die Gitterstruktur wird mittels Superzellen modelliert. Die Elektronenstruktur kann im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie bestimmt werden. Die anisotrope FERMI-Fläche und FERMI-Geschwindigkeit ergeben sich durch lineare Interpolation innerhalb der Tetraedermethode.

4.1 Modellierung der Schichtstruktur

Gegenwärtig werden Vielfachschichten hergestellt und untersucht, die aus bis zu 100 Doppelschichten bestehen [36, 37]. Bei epitaktisch gewachsenen Fe/Cr-Schichtsystemen befinden sich, abgesehen von Fehlstellen, Versetzungen und Korngrenzen, alle Fe- und Cr-Atome auf den Gitterplätzen eines kubisch raumzentrierten Gitters. Die schichtweise Anordnung der Komponenten erzeugt einen Festkörper mit Überstruktur. Dieser läßt sich durch periodische Fortsetzung einer geeignet gewählten Elementarzelle modellieren. Dabei vernachlässigt man auftretende Oberflächeneffekte. Ebenfalls unberücksichtigt bleiben *Quantum Size*-Effekte, die aufgrund der begrenzten Ausdehnung des Systems senkrecht zur Schichtebene entstehen können.

Tab. III: Untersuchte Fe/Cr[001]-Vielfachschichten, Dicke der Schichten in Monolagen [ML]

d_{Fe} [ML]	d_{Cr} [ML]
3	1 .. 13
5	1 .. 7
3 .. 9	4

Im weiteren wurden Fe/Cr-Systeme betrachtet, in denen die Schichtnormale parallel zur kristallographischen [001]-Richtung liegt. Diese Systeme wurden in ihren Eigenschaften bereits zahlreich experimentell untersucht [4, 23, 37, 38, 40, 61]. Die tetragonale Elementarzelle wird so angeordnet, daß die Achsen a und b parallel zur [100]- bzw. [010]- und die c-Achse parallel zur [001]-Richtung verlaufen. Die Gitterkonstante a = b wurde zu 5.40 a.u. (*atomic units*) gewählt. Dies ist der auf 0 K extrapolierte Mittelwert der Gitterkonstanten der Schichtkomponenten. Jede Monolage wird durch ein Atom in der Elementarzelle repräsentiert. Eingeschränkt durch die Rechnerkapazität konnten vom Autor Elementarzellen mit bis zu 32 Atomen behandelt werden. Elementarzellen dieser Größe werden als Superzellen bezeichnet.
Aufgrund der magnetischen Momente in den Fe-Schichten bildet sich eine zusätzliche magnetische Überstruktur aus. Im Fall der antiferromagnetischen Konfiguration

beträgt die Gitterkonstante c

$$c = 2\,(d_{Fe} + d_{Cr}) \qquad . \tag{39}$$

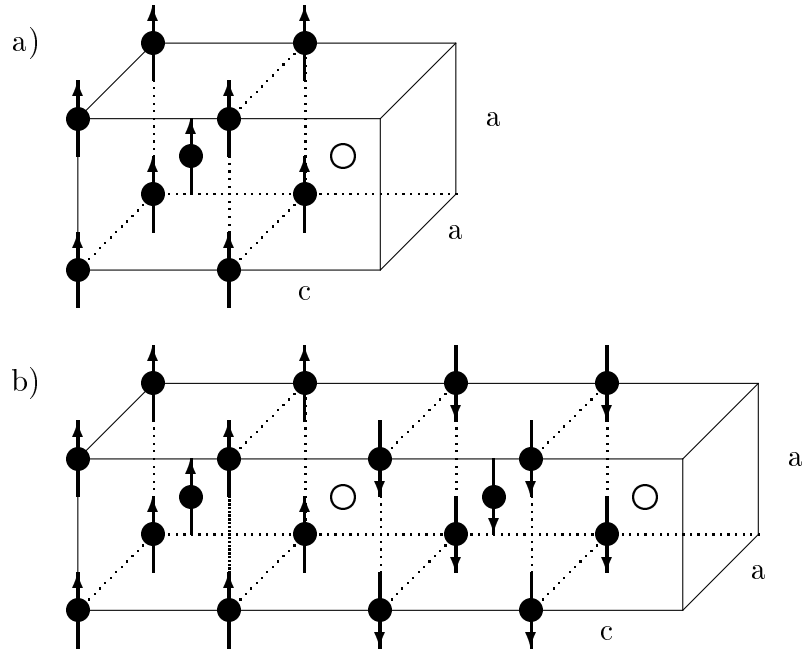


Abb. 7:
Elementarzellen für das Schichtsystem Fe_3Cr_1,
•, ◦ Orte der Fe- bzw. Cr-Atome,
↑, ↓ Richtung der vorgegebenen Magnetisierung in den Fe-Schichten,
a) fm Konfiguration, $a = 5.4$ a.u., $c = 10.8$ a.u.
b) afm Konfiguration, $a = 5.4$ a.u., $c = 21.6$ a.u.

In Tab. III sind die Dicken der Fe- und Cr- Schichten der Systeme zusammengestellt, die zur Berechnung des Supermagnetwiderstandsverhältnisses ausgewählt wurden. Für die minimale Dicke der Fe-Schicht wurden 3 Monolagen gewählt (experimentelle Realisierung [4]), da sich in den Rechnungen erst ab dieser Dicke eine Magnetisierungsdichte im Fe einstellt, die im Mittel dem Volumen-Wert entspricht. Für jede Schichtdickenkombination wurde sowohl für parallele als auch für antiparallele Ausrichtung der Fe-Momente die Elektronenstruktur im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie bestimmt. Die Berechnung der Bandstruktur wird im nächsten Abschnitt erläutert.
Als Beispiel für die verwendeten Superzellen sind in Abb. 7 die Elementarzellen für das System Fe_3Cr_1 dargestellt. Für die Bezeichnung der einzelnen untersuchten Vielfachschichten wird eine Nomenklatur der Form Fe_mCr_n gewählt. Dies bezeichnet ein Schichtsystem mit einer Fe-Dicke d_{Fe} von m Monolagen und einer Cr-Dicke d_{Cr} von n Monolagen.

4.2 Berechnung der Bandstruktur

4.2.1 Dichtefunktionaltheorie

Die Dichtefunktionaltheorie ist ein hilfreiche Methode zur Bestimmung der Grundzustandseigenschaften des Vielelektronenproblems. Der Grundgedanke besteht in der Transformation des Vielteilchenproblems auf ein effektives Einteilchenproblem. Die damit berechneten Eigenschaften (Ladungsdichte, Magnetisierungsdichte) stimmen gut mit experimentell gefundenen Resultaten überein. Grundlage der Dichtefunktionaltheorie ist das von Hohenberg und Kohn [62] 1964 veröffentlichte Theorem, daß die Gesamtenergie E eines Vielteilchensystems ein eindeutiges Funktional der Teilchendichte n($\mathbf{r}$) ist.

$$E = E[n(\mathbf{r})] \tag{40}$$

Die Grundzustandsenergie E_0 eines Systems ist somit das Minimum von E[n($\mathbf{r}$)] bei der Variation der Teilchendichte n($\mathbf{r}$) unter bestimmten Nebenbedingungen. Kohn und Sham [63, 64] entwickelten daraus ein Konzept zur Lösung dieser Variationsaufgabe mittels effektiver Einteilchengleichungen. Dazu zerlegt man das Funktional E[n($\mathbf{r}$)] in drei Anteile

$$E[n(\mathbf{r})] = T[n(\mathbf{r})] + U[n(\mathbf{r})] + E_{xc}[n(\mathbf{r})] \qquad . \tag{41}$$

T[n($\mathbf{r}$)] ist die kinetische Energie eines hypothetischen, wechselwirkungsfreien Elektronensystems. Das Funktional U[n($\mathbf{r}$)] beinhaltet die Coulomb-Wechselwirkung in HARTREE-Näherung und das äußere elektrostatische Potential $V_{ext}(\mathbf{r})$

$$U[n(\mathbf{r})] = \int d^3r\, d^3r'\;\; n(\mathbf{r})\;\left(\frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\;+\;V_{ext}(\mathbf{r})\right) \qquad . \tag{42}$$

Das Austausch-Korrelationsfunktional $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$ enthält alle Vielteilcheneffekte, die Austausch- und Korrelationsenergie sowie die damit verbundene Korrektur der kinetischen Energie.
Als Ansatz für die Dichte n($\mathbf{r}$) wird ein Vielteilchenzustand in Form einer SLATER-Determinante, bestehend aus den Einteilchen-Wellenfunktionen $|\,\Psi_i(\mathbf{r})\,\rangle$, gewählt

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i \langle\, \Psi_i(\mathbf{r}) \,||\, \Psi_i(\mathbf{r})\,\rangle \qquad . \tag{43}$$

Damit lassen sich für die Einteilchen-Wellenfunktionen $\mid \Psi_i(\mathbf{r}) \rangle$ die KOHN-SHAM-Gleichungen

$$\left\{ -\frac{\nabla^2}{2} + V_{\mathit{eff}}[n(\mathbf{r})] \right\} \mid \Psi_i(\mathbf{r}) \rangle = \epsilon_i \mid \Psi_i(\mathbf{r}) \rangle \tag{44}$$

mit dem effektiven Potential

$$V_{\mathit{eff}}(\mathbf{r}) \;=\; V_{ext}(\mathbf{r}) \;+\; \frac{\delta E_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n} \;+\; \int d^3r' \, \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tag{45}$$

gewinnen. Als Abkürzung wird das Austausch-Korrelationspotential V_{xc}[n(**r**)] eingeführt

$$V_{xc}[n(\mathbf{r})] \;= \frac{\delta E_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n} \qquad . \tag{46}$$

Die auftretenden LAGRANGE-Parameter ϵ_i sind zunächst mathematische Hilfsgrößen, können jedoch mit meßbaren Eigenschaften des Systems in Zusammenhang gebracht werden (siehe Abschnitt 4.2.2).
Es erweist sich als nützlich, die Dichte der Austausch-Korrelationsenergie ϵ_{xc} einzuführen

$$E_{xc}[n(\mathbf{r})] \;=\; \int d^3r \;\; n(\mathbf{r}) \, \epsilon_{xc}[\, n(\mathbf{r}),] \qquad . \tag{47}$$

In spinpolarisierten Systemen wird der obige Ansatz für beide Spinbänder benutzt [65]. ϵ_{xc}[n(**r**)] ist dann ein Funktional der Dichte der Majoritäts- sowie der Minoritätselektronen $n^{\uparrow}(\mathbf{r})$ bzw. $n^{\downarrow}(\mathbf{r})$

$$\epsilon_{xc}[n(\mathbf{r})] = \epsilon_{xc}[n^{\uparrow}(\mathbf{r}), n^{\downarrow}(\mathbf{r})] \qquad . \tag{48}$$

In $\epsilon_{xc}[n^{\uparrow}(\mathbf{r}), n^{\downarrow}(\mathbf{r})]$ sind alle Informationen über die Vielteilcheneffekte in einem System enthalten. In den meisten Fällen ist es möglich, eine lokale Näherung vorzunehmen. Dazu bestimmt man die Dichte der Austausch-Korrelationsenergie in einem Referenzsystem gleichartig wechselwirkender Elektronen konstanter Dichte. Diese Näherung ist für räumlich langsam veränderliche Dichten erwartungsgemäß gut, ergibt aber auch für räumlich stark veränderliche Dichten brauchbare Ergebnisse. Gute Näherungsausdrücke für wechselwirkende Elektronensysteme homogener Dichte wurden von v.Barth und Hedin [66] bzw. Vosko, Wilk und Nusair [67] entwickelt.

4.2.2 LCAO-Ansatz

Bei tiefen Temperaturen besteht ein metallischer Festkörper aus an den Gitterplätzen befindlichen Ionen (Atomkerne und stark lokalisierte Elektronen) und den beweglichen Leitungselektronen. Das Elektronengas befindet sich in einem äußeren, durch die Ionen verursachten, gitterperiodischen Potential $V_{ext}(\mathbf{r})$. Für dieses Potential müssen die Kohn-Sham-Gleichungen gelöst werden. Dazu liegt es nahe, die Einteilchen-Wellenfunktionen $\mid \Psi_i(\mathbf{r}) \rangle$ aus „atomaren" Wellenfunktionen aufzubauen [68]. Das bedeutet, daß der gitterperiodische Anteil von $\mid \Psi_i(\mathbf{r}) \rangle$ eine Linearkombination von Wellenfunktionen ist, die um die Orte der Ionen $\mathbf{R}_i$ konzentriert sind (LCAO = *Linear Combination of Atomic Orbitals*). Die „atomaren" Wellenfunktionen ergeben sich mittels eines am Ort $\mathbf{R}_i$ zentrierten Potentials $V_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r})$, das so gewählt werden sollte, daß $V_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r})$ in der Nähe des Ortes $\mathbf{R}_i$ dem Potential des dort befindlichen Ions entspricht

$$\left\{ -\frac{\nabla^2}{2} + V_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r}) \right\} \mid \Psi^n_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r}) \rangle = \epsilon_n \mid \Psi^n_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r}) \rangle \qquad . \tag{49}$$

Der Index n numeriert die Eigenfunktionen des Potentials $V_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r})$. H. Eschrig u.a. [69, 70] zeigten, daß sich durch die Wahl der $V_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r})$ die Lösung wesentlich vereinfachen läßt. An die „atomaren" Wellenfunktionen $\mid \Psi^n_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r}) \rangle$ ist die Bedingung zu stellen, daß sie (an allen Gitterorten betrachtet) ein genügend vollständiges Funktionensystem bilden. Die $\mid \Psi^n_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r}) \rangle$ können in Rumpf- und Valenzzustände eingeteilt werden. Die Bloch-Zustände lassen sich mittels eines linearen Ansatzes folgendermaßen konstruieren

$$\mid \Psi_{k\nu}(\mathbf{r}) \rangle = e^{i\mathbf{kr}} \sum_n \sum_{\mathbf{R}_i} C^{n\mathbf{R}_i}_{k\nu} \mid \tilde{\Psi}^n_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r}) \rangle \qquad . \tag{50}$$

Die $\mid \tilde{\Psi}^n_{\mathbf{R}_i}(\mathbf{r}) \rangle$ sind die gegenüber den Rumpfzuständen orthogonalisierten Valenzzustände. Dabei entsprechen die $\mid \Psi_{k\nu}(\mathbf{r}) \rangle$ den $\mid \Psi_i(\mathbf{r}) \rangle$ in den Kohn-Sham-Gleichungen (Gl. (44)). Die Koeffizienten $C^{n\mathbf{R}_i}_{k\nu}$ und $\epsilon_{k\nu}$ werden als Lösungen eines linearen Eigenwertproblems bestimmt. In spinpolarisierten Systemen werden diese für beide Spinbänder ermittelt. Die Bandstrukturberechnung erfolgt unter Verwendung des LCAO-Programmpakets von H. Eschrig u.a. [71, 72] auf IBM RS/6000 workstations. Im effektiven Kohn-Sham-Potential $V_{\mathit{eff}}(\mathbf{r})$ wird das Austausch-Korrelationsfunktional nach v.Barth und Hedin [66] benutzt. Die Modellierung der jeweiligen magnetischen Konfiguration erfolgt durch Einführung eines Splitting-Potentials. Mit diesem wird zu Beginn die Austausch-Korrelationsenergie der Majoritäts- und Minoritätselektronen aufgespalten. Dadurch wird erreicht, daß sich das Energiefunktional E[n(**r**)] im Einzugsbereich eines Minimums bezüglich $n^{\uparrow}(\mathbf{r})$ und $n^{\downarrow}(\mathbf{r})$ befindet, bei dem die gewünschte magnetische Ordnung vor-

liegt. Der somit ermittelte, energetisch tiefliegende Zustand des Gesamtsystems soll als Grundzustand der entsprechenden magnetischen Konfiguration bezeichnet werden. Auf diese Weise werden die Zustände des Systems bei $H = 0$ (afm) bzw. $H = H_S$ (fm) simuliert (s. Abb. 5).
Die somit erhaltenen Einteilchenenergien $\epsilon^{\sigma}_{k\nu}$ und Einteilchen-Wellenfunktionen $|\, \Psi^{\sigma}_{k\nu}(\mathbf{r}) \,\rangle$ lassen sich als elektronische Wellenfunktionen und deren Anregungsenergien interpretieren. Spektroskopische Untersuchungen und experimentelle Bestimmungen der FERMI-Flächen-Topologie belegen, daß sie im Bereich der FERMI-Energie tatsächlich als Quasiteilchenzustände interpretiert und zur Berechnung weiterer Systemeigenschaften herangezogen werden können.

4.3 Approximation der Fermi-Fläche

Mittels der in Abschnitt 4.2 vorgestellten Methoden läßt sich die Bandstruktur $\epsilon^{\sigma}_{k\nu}$ auf einem Netz von k-Punkten im irreduziblen Teil der BRILLOUIN-Zone (IB) berechnen. Wendet man die Elemente der Symmetriegruppe der entsprechenden Kristallstruktur an, so ist es möglich, daraus die Bandstruktur in der gesamten 1. BRILLOUIN-Zone zu konstruieren. Für die meisten der im folgenden vorgestellten Rechnungen wurde ein Netz mit 4650 k-Punkten im irreduziblen Teil gewählt.
Mittels einer modifizierten Tetraedermethode (nach [5]) wird die FERMI-Fläche im Rahmen einer linearen Interpolation durch eine Menge von Drei- und Vierecken approximiert. Damit können die in Gl. (37) auftretenden Integrale numerisch berechnet werden. Die Grundgedanken der Tetraedermethode sind im folgenden dargestellt.
Die k-Punkte im irreduziblen Teil der BRILLOUIN-Zone bilden ein reguläres Netz. Jeweils vier k-Punkte $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$ und $\mathbf{k}_3$ werden zu einem Tetraeder zusammengefaßt (Abb. 8). Die Energien an den Eckpunkten betragen ϵ_0, ϵ_1, ϵ_2 und ϵ_3. Der Bandindex ν sei für alle Energien ϵ_i gleich und wird deshalb nicht angegeben.

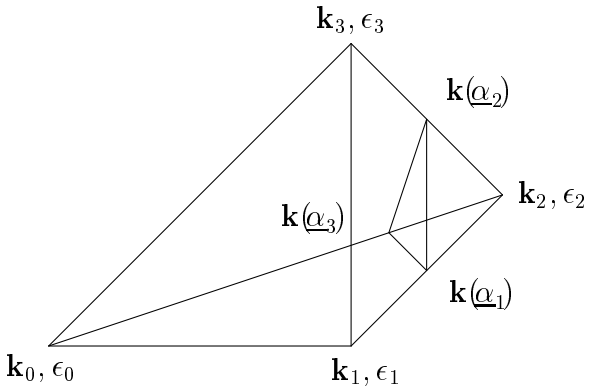


Abb. 8: Lineare Interpolation der FERMI-Fläche in einem Tetraeder $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$, $\mathbf{k}_3$

Folgende Größen werden definiert

$$\tilde{\epsilon_i} \quad = \quad \epsilon_i - \epsilon_0 \quad , \quad \mathrm{i} = 1,\, 2,\, 3 \quad ; \quad \underline{\epsilon} = \begin{pmatrix} \tilde{\epsilon_1} \\ \tilde{\epsilon_2} \\ \tilde{\epsilon_3} \end{pmatrix} \quad ;$$

$$\tilde{\mathbf{k}_i} \quad = \quad (\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_0)^T \quad , \quad \mathrm{i} = 1,\, 2,\, 3 \quad ; \quad \mathbf{K} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{k}_1} \\ \tilde{\mathbf{k}_2} \\ \tilde{\mathbf{k}_3} \end{pmatrix} \quad .$$

Jeder Punkt $\mathbf{k}$ innerhalb des Tetraeders läßt sich wie folgt parametrisieren

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= \mathbf{k}_0 + \mathbf{K}\,\underline{\alpha} \\ \underline{\alpha} &= \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3 \quad , \quad |\,\underline{\alpha}\,| \leq 1 \quad \text{und} \quad \alpha_i \geq 0 \qquad . \end{aligned} \tag{51}$$

Die Bandstruktur kann folgendermaßen linear interpoliert werden

$$\epsilon_k = \epsilon_0 + \underline{\alpha}\,\underline{\epsilon} \qquad . \tag{52}$$

Die Eckpunkte des die FERMI-Fläche approximierenden Flächenstücks werden aus

$$\epsilon_0 \; + \; \underline{\alpha}_i\,\underline{\epsilon} \; - \; \epsilon_F \; = \; 0 \tag{53}$$

unter der Nebenbedingung

$$\underline{\alpha}_i \in \{(\alpha,0,0),(0,\alpha,0),(0,0,\alpha),(\alpha,1-\alpha,0),(\alpha,0,1-\alpha),(0,\alpha,1-\alpha),\; 0 \leq \alpha \leq 1\}$$

bestimmt. Der Index i bestimmt die Anzahl der Lösungen. Gibt es für die $\underline{\alpha}_i$ drei oder vier Lösungen, so lassen sich die $\mathbf{k}(\underline{\alpha}_i)$ als Eckpunkte des Flächenstücks ermitteln, das im betrachteten Tetraeder die FERMI-Fläche nähert (Dreieck $\mathbf{k}(\underline{\alpha}_1)$, $\mathbf{k}(\underline{\alpha}_2)$, $\mathbf{k}(\underline{\alpha}_3)$ in Abb. 8). Aus den $\mathbf{k}(\underline{\alpha}_i)$ bestimmt man den Schwerpunktsvektor $\mathbf{Q}$ und die Fläche $\Delta S_{\mathbf{Q}}$ des Flächenelements, durch Koordinatentransformation gewinnt man aus $\underline{\epsilon}$ die FERMI-Geschwindigkeit $\boldsymbol{v_Q}$. In Gebieten von Bandhybridisierungen ergibt die lineare Interpolation aufgrund der starken Krümmung der FERMI-Fläche eine schlechte Approximation sowohl der Topologie als auch der FERMI-Geschwindigkeit.
Mittels dieser approximierten FERMI-Flächen lassen sich die Integrale $\tilde{\sigma}$ als Summe ausführen (vgl. Gl. (37))

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}^{\sigma}_{xx} &= \frac{1}{(2\pi)^3\,\hbar} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{\Delta S^{\sigma}_{\mathbf{Q}}}{v^{\sigma}_{\mathbf{Q}}} \left(\mathbf{e}_x \mathbf{v}_{\mathbf{Q}}{}^{\sigma} \right)^2 \quad , \\ \tilde{\sigma}^{\sigma}_{zz} &= \frac{1}{(2\pi)^3\,\hbar} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{\Delta S^{\sigma}_{\mathbf{Q}}}{v^{\sigma}_{\mathbf{Q}}} \left(\mathbf{e}_z \mathbf{v}_{\mathbf{Q}}{}^{\sigma} \right)^2 \qquad . \end{aligned} \tag{54}$$

Am Beispiel der Fe_3Cr_1 und Fe_3Cr_5-Schichtungen sind in Tab. IV die für den Transport wichtigen Größen der einzelnen Blätter der FERMI-Flächen zusammengestellt. Alle Größen sind in atomaren Einheiten angegeben. Die einzelnen Blätter unterscheiden sich stark in ihrer Zustandsdichte an der FERMI-Energie. Sehr kleine Blätter entstehen oft

durch numerische Ungenauigkeiten oder Rundungsfehler an einzelnen k-Punkten. Die Leitfähigkeit wird im wesentlichen durch die markierten Bänder bestimmt.

Tab. IV: Approximierte FERMI-Flächen von Fe_3Cr_1 und Fe_3Cr_5: Integrale Eigenschaften
↑,↓ fm Konfiguration, Majoritäts- bzw. Minoritätsband
↑↓ afm Konfiguration
N Anzahl der Flächenelemente,
n Zustandsdichte an der FERMI-Energie (a.u.),
$\tilde{\sigma}^{\sigma}_{xx}$, $\tilde{\sigma}^{\sigma}_{zz}$ FERMI-Flächen-Integrale zur Bestimmung der Leitfähigkeit (s. Gl. (54))

Fe_3Cr_1	Band	N	n	$\tilde{\sigma}^{\sigma}_{xx}$	$\tilde{\sigma}^{\sigma}_{zz}$	Fe_3Cr_5	Band	N	n	$\tilde{\sigma}^{\sigma}_{xx}$	$\tilde{\sigma}^{\sigma}_{zz}$
↑	**18**	1465	28.5	.118	.102	↑	29	74	.3	.004	.005
	19	1369	44.9	.129	.054		**30**	1628	14.6	.056	.013
							31	1898	22.5	.054	.004
							32	269	2.0	.010	.002
			73.4	.247	.156				49.4	.124	.024
↓	11	65	.9	.006	.007	↓	**23**	412	1.5	.021	.024
	12	1370	19.2	.159	.155		**24**	3045	13.4	.182	.179
	13	736	11.7	.077	.074		**25**	2178	10.6	.101	.069
	14	264	5.6	.023	.024		**26**	1247	7.2	.055	.047
							27	107	.6	.002	.009
			37.4	.256	.260				33.3	.361	.328
↑↓	**33**	2223	36.6	.103	.017	↑↓	53	334	.6	.012	.007
	34	2221	44.0	.084	.021		**54**	2648	14.8	.043	.002
	35	708	12.1	.047	.021		**55**	3315	18.9	.049	.008
	36	60	.2	.002	.001		**56**	3793	22.3	.062	.032
							57	850	3.4	.013	.002
			82.9	.236	.060				60.2	.179	.054

4.4 Magnetische Struktur der Vielfachschichten

Aus den Dichten der Majoritäts- sowie der Minoritätselektronen läßt sich die Magnetisierungsdichte m(**r**) bestimmen

$$m(\mathbf{r}) \;=\; n^{\uparrow}(\mathbf{r}) \;-\; n^{\downarrow}(\mathbf{r}) \qquad . \tag{55}$$

Übersichtlicher ist es, die magnetischen Momente $\mu(\mathbf{R}_i)$ für die einzelnen Atomorte $\mathbf{R}_i$ zu bestimmen.

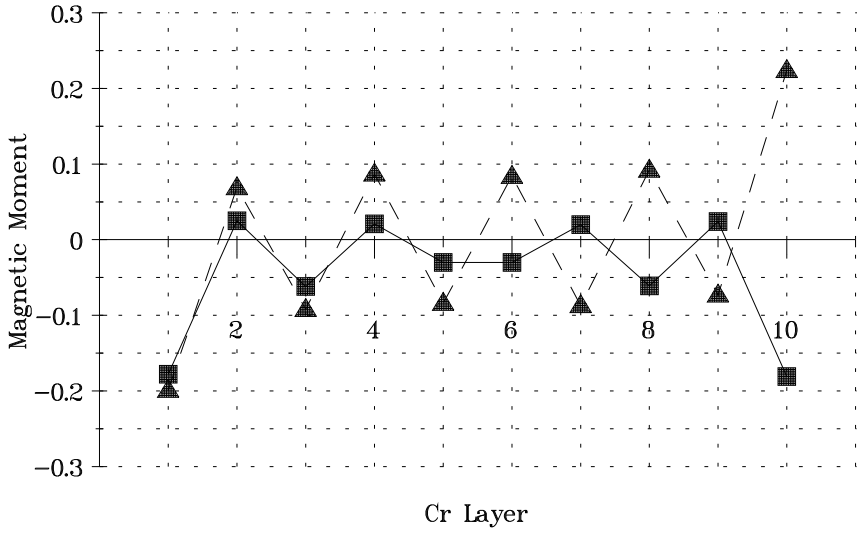


Abb. 9: Magnetische Momente im Fe_3Cr_{10}-Schichtsystem, LCAO-Superzellen-Rechnung
■ : ferromagnetische Konfiguration
▲ : antiferromagnetische Konfiguration

Für die Fe-Schicht ergeben sich in den Fe/Cr[001]-Schichtsystemen folgende Unterschiede zu den Volumen-Eigenschaften. Im Volumen-Material beträgt das magnetische Moment etwa 2.2 BOHRsche Magneton (μ_B) [73]. Die Monolagen werden im folgenden von der Grenzfläche Fe/Cr aus gezählt. In der 1. Monolage Fe ist das Moment stark verringert ($\mu \approx 1.7\mu_B$), während es in der 2. Monolage leicht überhöht ist ($\mu \approx 2.5\mu_B$). In Fe-Schichten mit einer Dicke m größer als 4 Monolagen ist das Moment in den mittleren m-4 Monolagen etwa gleich dem Volumen-Moment. Dieses Ergebnis stimmt mit anderen theoretischen Arbeiten überein [25, 56, 74].
Als Vergleich für die im Cr auftretenden magnetischen Momente wurde eine LCAO-Bandstrukturberechnung für antiferromagnetisches Cr mit einer Gitterkonstante von 5.40 a.u. durchgeführt. Dabei wurde eine kommensurable Spindichtewelle mit einer Periode von 2 Monolagen simuliert. Das erhaltene Moment von $\mu = 0.6\mu_B$ entspricht dem anderer Autoren [13, 26, 75, 76] . Experimentell wurde jedoch im Volumen-Cr

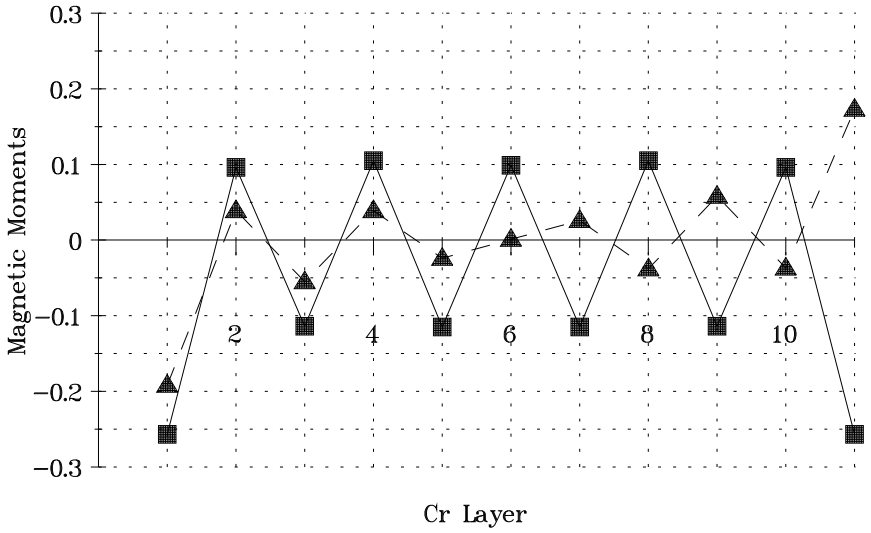


Abb. 10: Magnetische Momente im Fe_3Cr_{11}-Schichtsystem, LCAO-Superzellen-Rechnung
■ : ferromagnetische Konfiguration
▲ : antiferromagnetische Konfiguration

eine inkommensurable Spindichtewelle festgestellt. Das Moment der 1. Cr-Monolage richtet sich antiparallel zum benachbarten Fe-Moment aus. Dies wurde bereits experimentell nachgewiesen [8]. Für den Betrag des Cr-Moments wurde etwa ein Drittel des Volumen-Wertes erhalten. Die Momente benachbarter Cr-Monolagen koppeln antiferromagnetisch und nehmen bis zur Mitte der Schicht etwa auf ein Sechstel des Volumen-Wertes ab.
Wenn die Anzahl der Cr-Monolagen gerade ist und die Fe-Momente parallel ausgerichtet sind, bzw. die Anzahl der Cr-Monolagen ungerade und die Fe-Momente antiparallel liegen, ist die 2 ML-Oszillation im Cr zur Dicke der Cr-Schicht und zur Ausrichtung der Fe-Momente inkommensurabel. Da die Kopplung zu den Fe-Schichten stärker ist, tritt in der Mitte der Cr-Schicht eine Störung der antiferromagnetischen Ordnung auf. Die Energie dieses Defektes ist etwa gleich der Kopplungsstärke der ferromagnetischen Schichten [25]. In den Abbildungen 9 und 10 sind die beiden Typen dieser Störungen deutlich erkennbar. Außerdem verringern sich die magnetischen Momente aller Cr-Monolagen gegenüber der ungestörten Spindichtewelle bei der gleichen Cr-Dicke.

5 Einfluß der Streueigenschaften auf den Supermagnetwiderstand

Der elektrische Widerstand eines Metalls wird durch die Streuung der Elektronen an den Störungen der idealen Gitterstruktur hervorgerufen. In spinpolarisierten Systemen können die Majoritäts- und Minoritätselektronen unterschiedlich stark beeinflußt werden. Dies wird durch den Begriff der Spinanisotropie der Streuung beschrieben. Die Streueigenschaften der enthaltenen Defekte können durch spinabhängige Relaxationszeiten charakterisiert werden. Als Gitterstörungen können Punktdefekte, Defektcluster, Versetzungen und Korngrenzen auftreten. Für den Punktdefekt ist eine vollständige Beschreibung seiner Streueigenschaften aus ersten Prinzipien möglich [77, 78] und liegt insbesondere für einen Cr-Defekt in einem Fe-Kristall vor [79].

5.1 Bestimmung der Relaxationszeiten

Die spinpolarisierte Elektronendichte in einem idealen Kristall wird durch ungestörte Einteilchenwellenfunktionen $|\,\mathring{\Psi}_k^\sigma(\mathbf{r})\,\rangle$ beschrieben. Diese sind Bloch-Zustände im gitterperiodischen Potential $V^\sigma(\mathbf{r})$. Bringt man in dieses ideale Gitter eine Störung durch Fremdatome so ändert sich das Potential um den Betrag $\Delta V^\sigma(\mathbf{r})$. Diese Änderung kann für beide Spinbänder sehr verschieden sein. Der elektronische Zustand kann jetzt durch gestörte Bloch-Wellen $|\,\Psi_k^\sigma(\mathbf{r})\,\rangle$ beschrieben werden. Spinerhaltende Streuung am Defektpotential kann mittels der T-*transition*-Matrix charakterisiert werden. Diese beschreibt den Übergang der ungestörten Bloch-Welle $|\,\mathring{\Psi}_k^\sigma(\mathbf{r})\,\rangle$ durch Streuung an $\Delta V^\sigma(\mathbf{r})$ in den gestörten Zustand $|\,\Psi_{k'}^\sigma(\mathbf{r})\,\rangle$

$$T_{kk'}^{\sigma\sigma} = \frac{1}{V}\langle\, \mathring{\Psi}_k^\sigma(\mathbf{r})\,|\Delta V^\sigma(\mathbf{r})|\,\Psi_{k'}^\sigma(\mathbf{r})\,\rangle \qquad . \tag{56}$$

V ist das Volumen des betrachteten Systems. Im Grenzfall der verdünnten Legierung ist die mikroskopische Übergangswahrscheinlichkeit $P_{kk'}^{\sigma\sigma}$ für spinerhaltende, elastische Streuung durch Fermi's Goldene Regel

$$P_{kk'}^{\sigma\sigma} \;\propto\; cN\,|T_{kk'}^{\sigma\sigma}|^2\,\delta(\,\epsilon_k \,-\, \epsilon_{k'}) \tag{57}$$

gegeben. cN ist dabei die Anzahl der Störstellen, $\delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'})$ beschreibt die Energieerhaltung. Die Summation über alle Endzustände $|\,\Psi_{k'}^\sigma(\mathbf{r})\,\rangle$ ergibt $(\tau_k^\sigma)^{-1}$ (siehe Gl. (20)). Die Relaxationszeit τ_k^σ beschreibt die Verweildauer eines Elektrons im Zustand $|\,\Psi_k^\sigma(\mathbf{r})\,\rangle$.
In den weiteren Betrachtungen dieser Arbeit wird angenommen, daß die Relaxationszeiten $\tau^\uparrow$ und $\tau^\downarrow$, die für einen Cr-Defekt in Fe ermittelt wurden (s. Tab. V), auch für einen Cr-Defekt in einer Fe-Schicht relevant sind.

Tab. V: Mittlere spinabhängige Relaxationszeiten sowie Spinanisotropie für einen Cr-Punktdefekt in Fe, nach [79]

$\tau^{\uparrow}$	$\tau^{\downarrow}$	$\beta = \frac{\tau^{\uparrow}}{\tau^{\downarrow}}$
0.001618	0.01458	0.111

Im weiteren werden nur Cr-Defekte in den Fe-Schichten betrachtet. Der Einfluß der Streueigenschaften des Defektes auf den Supermagnetwiderstand läßt sich dadurch deutlicher hervorheben. Aufgrund der sehr unterschiedlichen Relaxationszeiten werden die Majoritätselektronen stark gestreut, wohingegen die Minoritätselektronen nur einer geringen Streuung unterliegen.

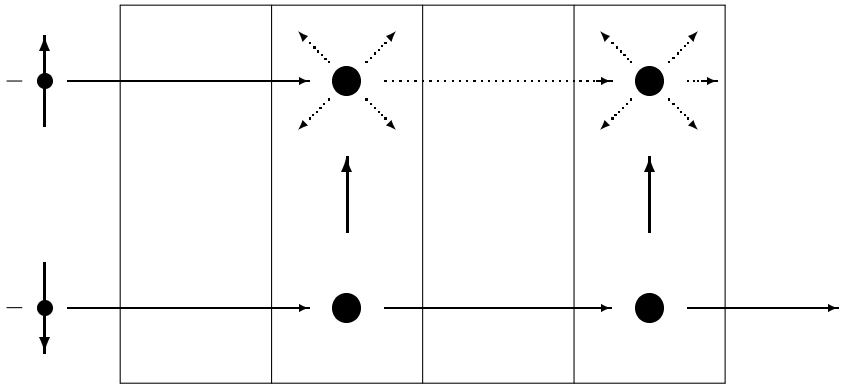


Abb. 11: Streuung der BLOCH-Wellen $|\,\Psi_k^{\uparrow}\,\rangle$ und $|\,\Psi_k^{\downarrow}\,\rangle$ an einem Cr-Defekt in ferromagnetischer Konfiguration der Fe-Momente

Liegen die Fe-Momente parallel, ist die Spinentartung aufgehoben. Jeder Elektronenzustand trägt eindeutig Majoritäts- oder Minoritätscharakter. Ein Zustand $|\,\Psi_k^{\sigma}(\mathbf{r})\,\rangle$ wird in jeder magnetischen Schicht gleichartig gestreut. Die Streuung der Majoritätselektronen wird durch $\tau^{\uparrow}$, die der Minoritätselektronen durch $\tau^{\downarrow}$ beschreiben (s. Abb. 11).
Liegen die Fe-Momente antiparallel, so sind die Zustände $|\,\Psi_k^{\uparrow}\,\rangle$ und $|\,\Psi_k^{\downarrow}\,\rangle$ entartet. Ein Zustand $|\,\Psi_k^{\uparrow(\downarrow)}\,\rangle$ trägt in der einen Fe-Schicht Majoritäts- und in der benachbarten Fe-Schicht Minoritätscharakter. Ebenso unterscheidet sich die Streuung an den Defekten in beiden magnetischen Schichten. Ist die Spinanisotropie groß, so werden die Elektronen in beiden Streukanälen stark gestreut und der Widerstand erhöht sich im Vergleich zur fm Konfiguration (s. Abb. 12).
Für die resultierende Relaxationszeit $\tau^{\uparrow\downarrow}$ der afm Konfiguration ergibt sich aufgrund der Additivität der Streuoperatoren

$$\tau^{\uparrow\downarrow} \;=\; 2\left(\frac{1}{\tau^{\uparrow}} \;+\; \frac{1}{\tau^{\downarrow}}\right)^{-1} \qquad . \tag{58}$$

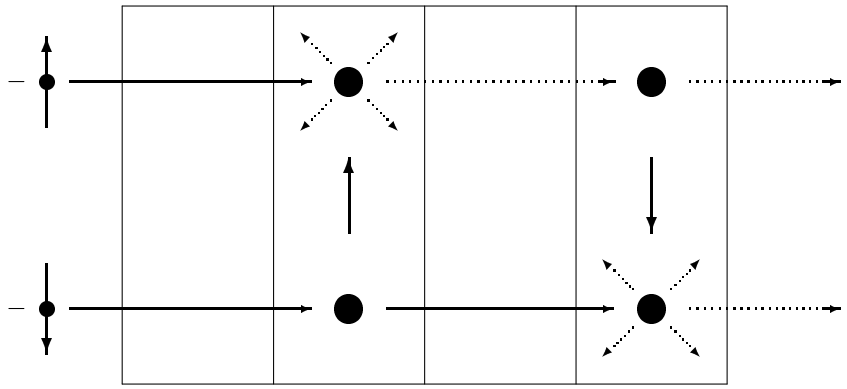


Abb. 12: Streuung der BLOCH-Wellen $|\Psi_k^{\uparrow}\rangle$ und $|\Psi_k^{\downarrow}\rangle$ an einem Cr-Defekt in antiferromagnetischer Konfiguration der Fe-Momente

Für den Fe(Cr)-Defekt ergibt sich damit eine Relaxationszeit $\tau^{\uparrow\downarrow}$ von 0.002913.
Mit den effektiven Relaxationszeiten $\tau^{\uparrow}$, $\tau^{\downarrow}$ und $\tau^{\uparrow\downarrow}$ sowie den FERMI-Flächen-Integralen $\tilde{\sigma}^{\uparrow}$, $\tilde{\sigma}^{\downarrow}$ und $\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow}$ sind alle Größen bekannt, um das Supermagnetwiderstandsverhältnis zu bestimmen.

5.2 Relaxationszeiten als freie Parameter

Die Streueigenschaften eines beliebigen Defektes in einer idealen Schichtstruktur können durch die spinabhängigen Relaxationszeiten $\tau^{\uparrow}$ und $\tau^{\downarrow}$ parametrisiert werden. Die Spinanisotropie β bezeichnet das Verhältnis dieser beiden Zeiten

$$\beta \;=\; \frac{\tau^{\uparrow}}{\tau^{\downarrow}} \qquad . \tag{59}$$

Mittels der Spinanisotropie läßt sich die effektive Relaxationszeit für die afm Konfiguration

$$\tau^{\uparrow\downarrow} \;=\; \frac{2}{1+\beta}\,\tau^{\uparrow} \tag{60}$$

ausdrücken (s. Gl. (58)). In Relaxationszeitnäherung sind die Komponenten des spinabhängigen Leitfähigkeitstensors eines Spinbandes als Produkt der Relaxationszeit τ^{σ} und dem entsprechenden FERMI-Flächen-Integral $\tilde{\sigma}^{\sigma}$ gegeben (vgl. Gl. (37))

$$\sigma^{\sigma} \;=\; \tau^{\sigma}\,\tilde{\sigma}^{\sigma} \qquad . \tag{61}$$

Für den Supermagnetwiderstand in CIP-Anordnung sind die Komponenten $\tilde{\sigma}^{\sigma}_{xx}$ bzw. $\tilde{\sigma}^{\sigma}_{yy}$ und für die CPP-Anordnung die Komponente $\tilde{\sigma}^{\sigma}_{zz}$ auszuwerten. Die Indizierung der Komponenten wird in den folgenden Betrachtungen zur Vereinfachung der Darstellung vernachlässigt. Für die Leitfähigkeit der ferromagnetischen Konfiguration $\sigma^{\uparrow\uparrow}$ ergibt sich

$$\sigma^{\uparrow\uparrow} \;=\; (\rho^{\uparrow\uparrow})^{-1} \;=\; \tau^{\uparrow}\,\tilde{\sigma}^{\uparrow} \;+\; \tau^{\downarrow}\,\tilde{\sigma}^{\downarrow} \qquad . \tag{62}$$

Dabei bezeichnen $\tilde{\sigma}^{\uparrow}$ und $\tilde{\sigma}^{\downarrow}$ die Summen der FERMI-Flächen-Integrale aller Blätter der Majoritäts- bzw. Minoritätselektronen der fm Konfiguration.
Bei antiparalleler Ausrichtung der Fe-Momente bestimmt sich die Leitfähigkeit $\sigma^{\uparrow\downarrow}$ zu

$$\sigma^{\uparrow\downarrow} \;=\; \tau^{\uparrow\downarrow}\,\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow} \qquad . \tag{63}$$

$\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow}$ ist dabei das entsprechende FERMI-Flächen-Integral im afm Zustand des Schichtsystems. Für das Supermagnetwiderstandsverhältnis ergibt sich mit Gl. (5)

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} \;=\; \frac{\tau^{\uparrow}\,\tilde{\sigma}^{\uparrow} \;+\; \tau^{\downarrow}\,\tilde{\sigma}^{\downarrow}}{\tau^{\uparrow\downarrow}\,\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow}} \;-\; 1 \qquad . \tag{64}$$

Unter Einbeziehung der Spinanisotropie β aus Gl. (59) erhält man

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} \;=\; \frac{1+\beta}{2}\left(\frac{\tilde{\sigma}^{\uparrow}}{\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow}} \;+\; \beta^{-1}\,\frac{\tilde{\sigma}^{\downarrow}}{\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow}}\right) \;-\; 1 \qquad . \tag{65}$$

Die Integrale $\tilde{\sigma}^{\uparrow}$, $\tilde{\sigma}^{\downarrow}$ und $\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow}$ sind durch die Grundzustandseigenschaften des Schichtsystems in fm bzw. afm Konfiguration bestimmt.
Der Einfluß der Defektkonzentration auf das Supermagnetwiderstandsverhältnis konnte in experimentellen Arbeiten nicht eindeutig geklärt werden. Es gab Experimente, bei denen der Supermagnetwiderstand mit der Anzahl der Defekte stieg [80, 81] und solche mit entgegengesetztem Ergebnis [82]. Im Rahmen dieses Modells ist das Supermagnetwiderstandsverhältnis von der Konzentration der Defekte unabhänig.

Da die in Gl. (65) auftretenden Integrale $\tilde{\sigma}$ positiv sind, ergibt sich für das Supermagnetwiderstandsverhältnis $\frac{\Delta\rho}{\rho}(\beta)$ genau ein globales Minimum für $\beta = \beta_{min}$

$$\frac{\partial\frac{\Delta\rho}{\rho}}{\partial\beta} \;=\; 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \beta_{min} \;=\; \sqrt{\frac{\tilde{\sigma}^{\downarrow}}{\tilde{\sigma}^{\uparrow}}} \qquad . \tag{66}$$

Es ist zu bemerken, daß β_{min} nur von Eigenschaften des Schichtsystems bei paralleler Ausrichtung der Fe-Momente bestimmt wird. Das minimale Supermagnetwiderstandsverhältnis $\frac{\Delta\rho}{\rho}_{min}$ beträgt damit

$$\frac{\Delta\rho}{\rho}_{min} \;=\; \frac{\Delta\rho}{\rho}\left(\,\beta_{min}\,\right) \;=\; \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\tilde{\sigma}^{\uparrow}}{\sigma^{\uparrow\downarrow}}} \;+\; \sqrt{\frac{\tilde{\sigma}^{\downarrow}}{\sigma^{\uparrow\downarrow}}}\right)^{2} \;-\; 1 \qquad . \tag{67}$$

Für das Verhalten von $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ in Abhängigkeit der Spinanisotropie sind zwei Fälle zu unterscheiden.

1. Die Grundzustandseigenschaften seien so, daß $\frac{\Delta\rho}{\rho}_{min} > 0$. Dann tritt bei jeder Art von Streumechanismus ein positiver Supermagnetwiderstands-Effekt auf. Besonders hervorzuheben ist, daß dies auch bei spinunabhängigen Streuprozessen ($\beta = 1$) zu erwarten ist.

2. Der Wert von $\frac{\Delta\rho}{\rho}_{min}$ sei negativ. Liegt die Anisotropie des vorhandenen Streumechanismus in der Nähe von β_{min}, welches durch die FERMI-Flächen-Integrale $\tilde{\sigma}$ bestimmt wird, so ist ein „inverser“ Supermagnetwiderstands-Effekt zu erwarten.

Die funktionale Abhängigkeit ist für beide Fälle in Abb. 13 veranschaulicht. Durch Veränderung der Spinanisotropie kann der Supermagnetwiderstands-Effekt verstärkt oder reduziert werden. Baumgart u.a. führten Experimente zum Einfluß von zusätzlichen Störungen in Fe/Cr-Vielfachschichten durch [23]. Es zeigte sich, daß Störungen

mit umgekehrter Spinanisotropie im Vergleich zu der des Fe(Cr)-Defektes, Al- und Ir-Defekte in Fe, den Supermagnetwiderstand stark reduzieren, was mit den Aussagen des beschriebenen Modells gut übereinstimmt.

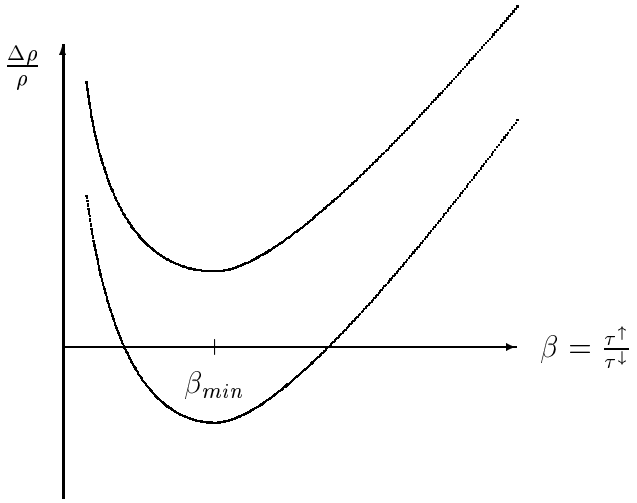


Abb. 13:
Supermagnetwiderstandsverhältnis in Abhängigkeit der Spinanisotropie β für unterschiedliche Parametersätze $\tilde{\sigma}^{\uparrow}$, $\tilde{\sigma}^{\downarrow}$ und $\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow}$, (willkürliche Einheiten)

Aus der Form von Gl. (66) ist ersichtlich, daß $|\frac{\Delta\rho}{\rho}|$ für den „inversen“ Supermagnetwiderstands-Effekt immer kleiner 100% ist. Bisher wurden in Experimenten Werte von $|\frac{\Delta\rho}{\rho}|$ bis 1% gefunden [59]. Durch weitere Streuprozesse und die damit verbundene Veränderung der Spinanisotropie kann der „inverse“ Supermagnetwiderstands-Effekt ausgelöscht bzw. in den normalen Supermagnetwiderstands-Effekt übergehen (vgl. Abb. 13).

6 Supermagnetwiderstand der Fe/Cr-Vielfachschichten

Die für das Supermagnetwiderstandsverhältnis erhaltenen Ergebnisse werden in diesem Kapitel vorgestellt und im Vergleich mit experimentellen Resultaten diskutiert.

6.1 Berechnung des Supermagnetwiderstandsverhältnisses

Es wurde der Supermagnetwiderstand verschiedener Fe/Cr[001]-Vielfachschichtsysteme berechnet. Dabei wurde die Dicke der Fe-Schicht d_{Fe} bzw. die der Cr-Schicht d_{Cr} variiert (s. Tab. III). Für jedes betrachtete System wurden für beide magnetische Konfigurationen die anisotrope FERMI-Fläche und FERMI-Geschwindigkeit ermittelt. Mit Hilfe der effektiven Relaxationszeiten ergaben sich daraus die FERMI-Flächen-Integrale $\tilde{\sigma}^{\uparrow}$, $\tilde{\sigma}^{\downarrow}$ und $\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow}$.

Da das Supermagnetwiderstandsverhältnis nicht von den Absolutwerten der Relaxationszeiten $\tau^{\uparrow}$ und $\tau^{\downarrow}$ abhängt, sondern nur von der Spinanisotropie $\beta = \frac{\tau^{\uparrow}}{\tau^{\downarrow}}$, wird $\frac{\Delta\rho}{\rho}$ als Funktion von $\tilde{\sigma}^{\uparrow}$, $\tilde{\sigma}^{\downarrow}$, $\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow}$ und β aufgefaßt (vgl. Gl. (65)). Für jeweils drei Werte von β wurde das Supermagnetwiderstandsverhältnis bestimmt:

1. Der Wert von β ist gleich der Anisotropie der Streuung an einem Cr-Punktdefekt im Fe-Kristall ($\beta = 0.111$, nach [79]).
   (Markierung in Diagrammen : ■)

2. Die effektive Spinanisotropie der in den Schichten vorhandenen Störungen sei so, daß der Supermagnetwiderstand minmal wird, $\beta = \beta_{min}(\tilde{\sigma}^{\uparrow}, \tilde{\sigma}^{\downarrow}, \tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow})$.
   (Markierung in Diagrammen : ▼)

3. Die Streuung in den Schichten sei spinunabhängig ($\beta = 1$).
   (Markierung in Diagrammen : •)

Die Ergebnisse sind für eine Temperatur $T = 0\,K$ abgeleitet. Bei Temperaturen $T > 0\,K$ besitzt die FERMI-DIRAC-Verteilung eine Flankenbreite der Größenordnung $k_B\,T$ (für Zimmertemperatur rund 1 mHartree). Die Bandbreite beträgt in den Vielfachschichten zwischen 20 und 80 mHartree. Deshalb ist der Einfluß der Temperatur auf die Transporteigenschaften als gering anzusehen.

6.2 Supermagnetwiderstand in Abhängigkeit der Zwischenschichtdicke

Zur Untersuchung der Abhängigkeit des Supermagnetwiderstandes von der Zwischenschichtdicke wurde die Dicke der Fe-Schicht bei 3 bzw. 5 Monolagen fixiert und die Dicke der Cr-Schicht variiert. Es ist zu berücksichtigen, daß die Ergebnisse mit einer Fe-Dicke

von 3 Monolagen bezüglich des Kristallpotentials im LCAO-Schema besser konvergiert sind. Die Ursache dafür bildet die deutlich langsamere Konvergenz der Spinordnung gegenüber der Gesamtladungsdichte bei diesem LCAO-Verfahren [83]. Aufgrund von Mängeln der Konvergenz tragen die Ergebnisse für die Systeme mit einer Fe-Dicke von 5 Monolagen nur vorläufigen Charakter. Für alle Schichtsysteme erfolgte eine Auswertung für den Supermagnetwiderstands-Effekt parallel zur Schicht (CIP-Anordnung) sowie senkrecht zur Schicht (CPP-Anordnung).

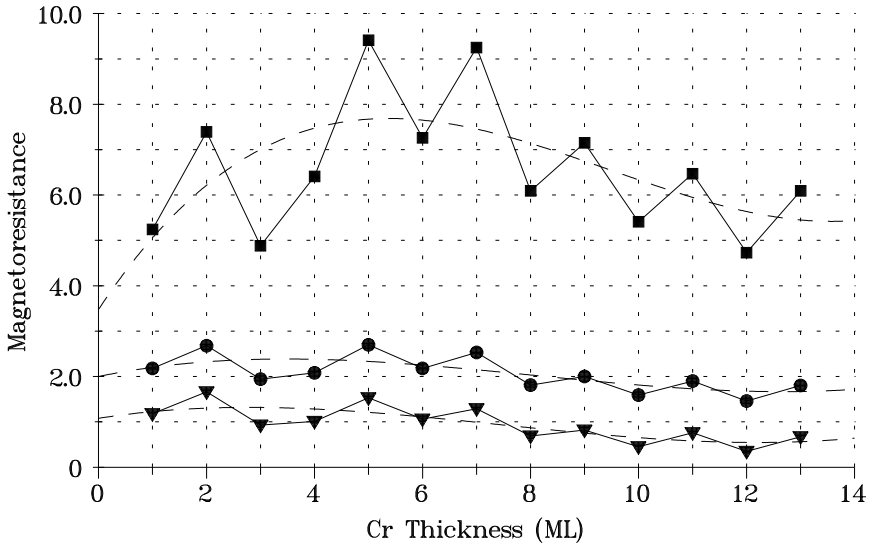


Abb. 14:
Supermagnetwiderstand von Fe_3Cr_n Superzellen in CIP-Anordnung
(Erläuterung siehe Text)

Für die CIP-Anordnung lassen sich folgende Aussagen gewinnen (s. Abb. 14 und 15).

1. Es existiert eine Oszillation des Supermagnetwiderstandsverhältnisses in Abhängigkeit der Zwischenschichtdicke mit einer Periodenlänge von 2 Monolagen.

2. Diese kurzperiodische Oszillation tritt für alle Werte der Spinanisotropie auf.

3. In Abb. 14 ist erkennbar, daß noch eine weitere Oszillation existiert. Deren Periodenlänge beträgt zwischen 13 und 17 Monolagen.

4. Für alle Werte der Spinanisotropie β ergibt sich ein positiver Supermagnetwiderstands-Effekt.

Die gefundenen Oszillationsperioden in der Abhängigkeit des Supermagnetwiderstandsverhältnisses von der Zwischenschichtdicke stimmen mit den Ergebnissen auf der Grundlage von Gesamtenergieberechnungen zum Verhalten der Zwischenschichtkopplung überein [12, 13]. Ähnliche Periodenlängen konnten im Rahmen der RKKY-Theorie auf der Grundlage der Bandstruktur für Cr gewonnen werden (s. Abb. 28, Anlage B). Die

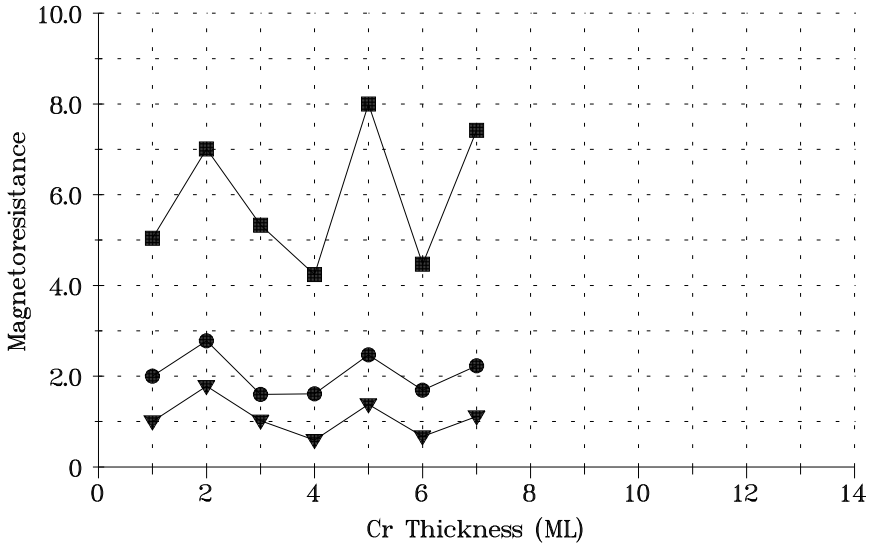


Abb. 15:
Supermagnetwiderstand von Fe_5Cr_n Superzellen in CIP-Anordnung
(Erläuterung siehe Text)

kurze sowie die lange Oszillationsperiode wurde in Experimenten zum Supermagnetwiderstand nachgwiesen [38, 39, 40].
Die experimentell ermittelten Abhängigkeiten der Zwischenschichtkopplung und des Supermagnetwiderstandes stehen in einem engen Zusammenhang. Bei einer Vielfachschicht mit extrem glatten Grenzflächen müßte die Zwischenschichtkopplung einen in Abb. 16 gezeigten Verlauf aufweisen. Nur für bestimmte Dicken (mit einem Abstand von 2 Monolagen) stellt sich eine antiferromagnetische Kopplung ein. Die Zwischenschichtdicken seien im Bereich eines antiferromagnetischen Maximums der langperiodischen Oszillation der Zwischenschichtkopplung. Sind die Grenzflächen etwas rauher, so wird sich auch in den Bereichen dazwischen eine, wenn auch schwächere, afm Kopplung einstellen. Der dabei gemessene Verlauf des Supermagnetwiderstands-Effektes in Abhängigkeit der Zwischenschichtdicke ist schematisch eingezeichnet. In den Zwischenbereichen wird aufgrund der nicht vollständigen Ausprägung der antiferromagnetischen Grundordnung ein kleinerer als der berechnete Effekt gemessen. Die Phasenverschiebung von einer Monolage der Ergebnisse dieser Arbeit gegenüber den experimentell gefundenen Resultaten [40] ist ebenfalls damit zu erklären.
Für beide Fe-Dicken ist in den Ergebnissen für den Supermagnetwiderstand ein Phasensprung im Bereich zwischen 3 und 4 Monolagen erkennbar. Für die Zwischenschichtkopplung konnte experimentell in diesem Bereich ebenfalls ein Phasensprung nachgewiesen werden [8].
Für den Fall, daß in den Schichten als einzige Streuzentren Cr-Defekte auftreten, wurden für das Supermagnetwiderstandsverhältnis Werte zwischen 500 und 950 % erhal-

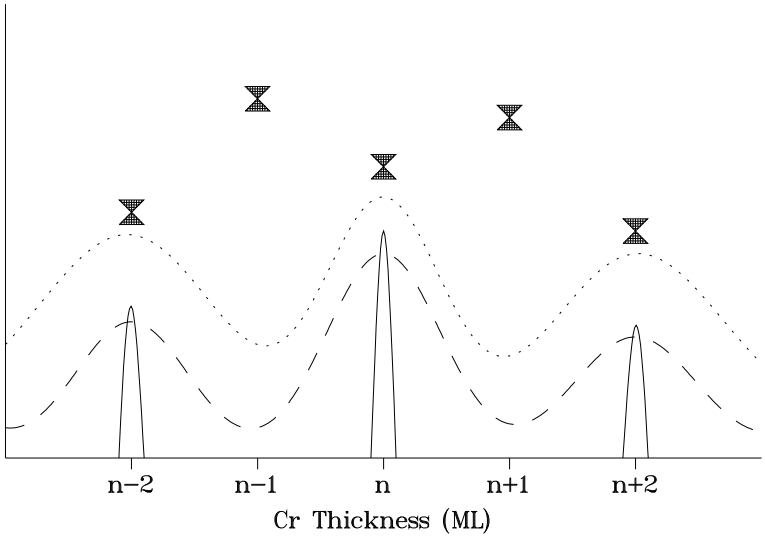


Abb. 16:
Zusammenhang der experimentellen Verläufe der Zwischenschichtkopplung und des Supermagnetwiderstandes
⧗ : Supermagnetwiderstand aus *ab-initio* Rechnungen
— : Zwischenschichtkopplung bei extrem glatten Grenzflächen,
- - : Zwischenschichtkopplung bei etwas gestörten Grenzflächen,
.... : Supermagnetwiderstand, experimentell ermittelt
alle Verläufe schematisch in willkürlichen Einheiten

ten. Solche drastischen Effekte werden in Experimenten nicht erzielt, da hier weitere Störungen eine Verringerung der Spinanisotropie bewirken. Dies wird bei höheren Temperaturen besonders durch die Streuung an Phononen und Magnonen verursacht.

Die in Abhängigkeit der Spinanisotropie der Streuung gefundenen minimalen Werte des Supermagnetwiderstandes sind für alle untersuchten Schichtsysteme positiv. Im Rahmen dieses Modells ist zu erwarten, daß bei Vorhandensein beliebiger, spinerhaltender Streumechanismen (im Grenzfall starker Verdünnung) in Fe/Cr[001]-Vielfachschichten ein positiver Supermagnetwiderstands-Effekt auftritt. Bisher sind keine experimentellen Ergebnisse mit gegenteiligen Aussagen bekannt.
Unter der Annahme, daß eine spinunabhängige Streuung in den Schichten erfolgt, ergeben sich bei der Berechnung des Supermagnetwiderstandsverhältnisses in Übereinstimmung mit experimentell erzielten Resultaten Werte im Bereich von 200 % (s. Tab. II). Es ist davon auszugehen, daß in epitaktisch gezüchteten Schichten eine große Anzahl unterschiedlicher Streuzentren vorliegt. Deshalb wird die Annahme einer mittleren spinunabhängigen Streuung diese Verhältnisse recht gut charakterisieren. Der Supermagnetwiderstands-Effekt wird in diesem Fall allein aufgrund der anisotropen Grundzustandseigenschaften bestimmt, die sich mit der magnetischen Ordnung stark verändern (s. Abschnitt 6.4).

Für den Effekt in CPP-Anordnung sind die Ergebnisse weniger stark differenziert. Das Supermagnetwiderstandsverhältnis ist etwa 3 bis 4 mal größer als in CIP-Anordnung. Dies stimmt mit experimentellen Aussagen überein (vgl. Tab. II).

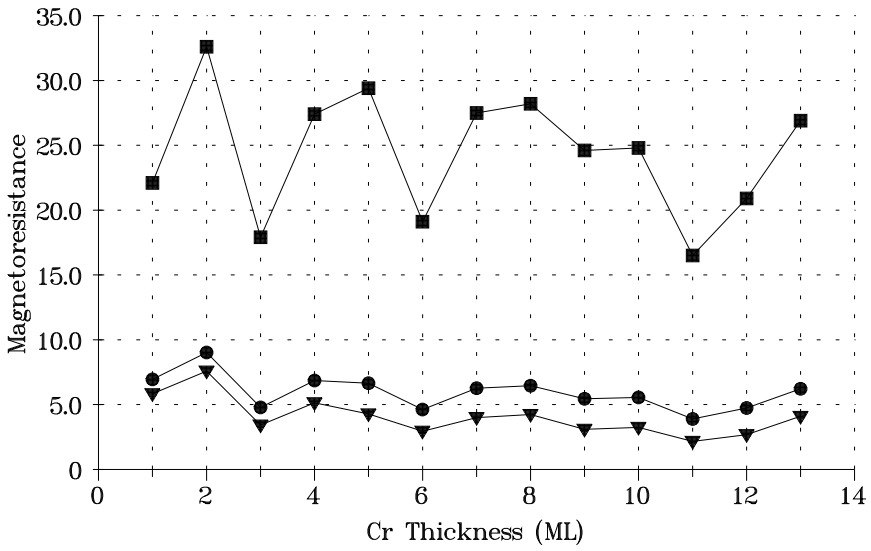


Abb. 17:
Supermagnetwiderstand von Fe_3Cr_n Superzellen in CPP-Anordnung (Erläuterung siehe Text)

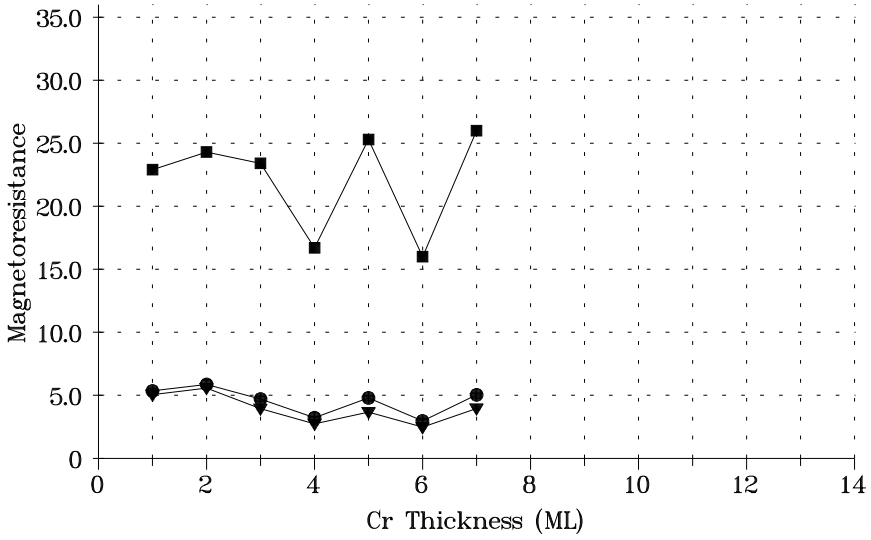


Abb. 18:
Supermagnetwiderstand von Fe_5Cr_n Superzellen in CPP-Anordnung (Erläuterung siehe Text)

Für spinunabhängige Streuung wurden Werte von etwa 500 % berechnet. Mit steigender Dicke der Cr-Schicht ist ein Abfall des Effektes zu erkennen. Die integralen

Grundzustandseigenschaften beider magnetischer Konfigurationen unterscheiden sich für größere Zwischenschichtdicken weniger voneinander. Diese Ergebnisse stimmen mit denen von T. Oguchi überein [56]. Im Experiment konnte bisher ein Supermagnetwiderstands-Effekt in der CPP-Anordnung bis 108% nachgewiesen werden (s. Tab. II). Die Abhängigkeit des Supermagnetwiderstandes von der Zwischenschichtdicke kann mit den in dieser Arbeit benutzten Näherungen und Methoden gut wiedergegeben werden.

6.3 Supermagnetwiderstand in Abhängigkeit der Dicke der ferromagnetischen Schicht

Zur Untersuchung der Abhängigkeit des Supermagnetwiderstandes von der Dicke der ferromagnetischen Schicht wurde eine Dicke der Cr-Schicht von 4 Monolagen gewählt. Dies entspricht der minimalen Cr-Dicke in einer Vielfachschicht, die im Experiment einen Supermagnetwiderstands-Effekt zeigt [38, 40].

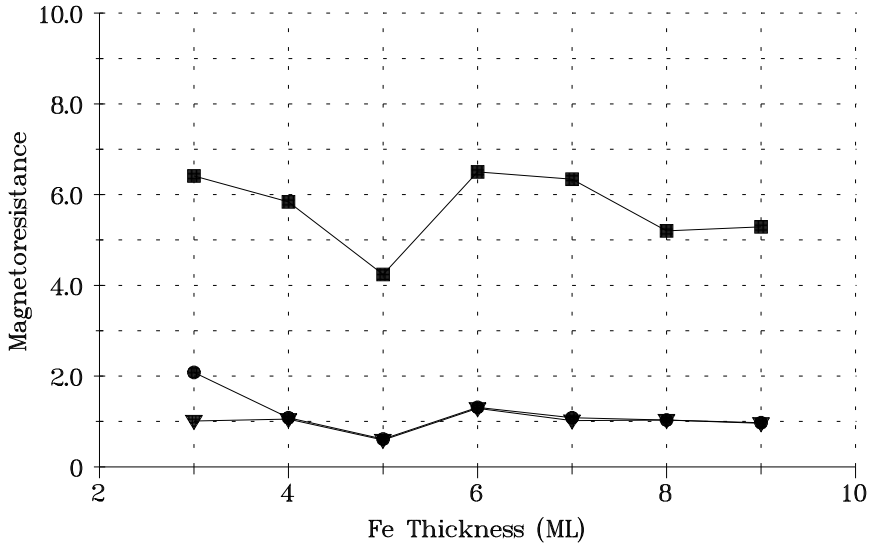


Abb. 19: Supermagnetwiderstand von Fe_nCr_4 Superzellen in CIP-Anordnung

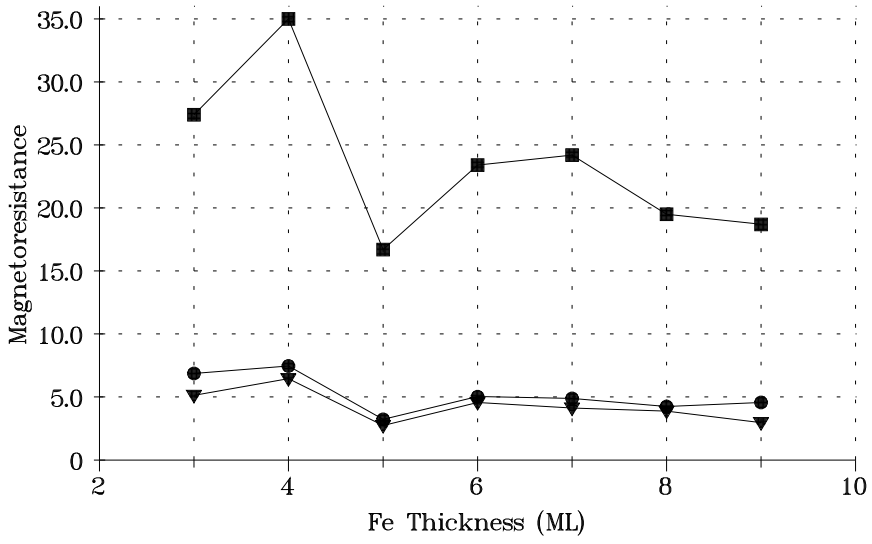


Abb. 20: Supermagnetwiderstand von Fe_nCr_4 Superzellen in CPP-Anordnung

Die experimentell ermittelte Oszillation mit einer Periodenlänge von etwa 5.7 Monolagen [10] deutet sich in den Ergebnissen nur an. Aufgrund der begrenzten Rechnerkapazität konnte das Verhalten für noch größere Dicken der Fe-Schicht nicht untersucht werden.
Für bcc-Fe mit einer Gitterkonstante von 5.40 a.u. wurde die FERMI-Fläche der Majoritätselektronen berechnet [71, 72]. Es konnte ein entsprechender Verbindungsvektor in [001]-Richtung gefunden werden, der einer Periodenlänge von 4.7 Monolagen entspricht (s. Abb. 30, Anlage B) und zur theoretischen Erklärung herangezogen werden kann [11].
Für größere Fe-Dicken erreicht der Supermagnetwiderstands-Effekt in CIP-Anordnung seinen minimalen Wert etwa bei einer Spinanisotropie von 1 (vgl. Abb. 19). Die Größenordnung des Effektes beträgt 100 %. Für größere Dicken ist ein leichter Abfall zu verzeichnen.

Für die CPP-Anordnung ergibt sich bei Vorhandensein spinunabhängiger Streumechanismen ein Supermagnetwiderstands-Effekt zwischen 400 und 700 %. Dies bestätigt die experimentellen Ergebnisse, bei denen in CPP-Anordnung ein deutlich größer Effekt als in CIP-Anordnung gefunden wird.

6.4 Fermi-Geschwindigkeit und Zustandsdichte

Für die untersuchten Fe/Cr-Schichtsysteme wurde die anisotrope FERMI-Geschwindigkeit ermittelt (s. Abschnittt 4.3). In einem Spinband wurden die quadratischen Mittelwerte der Richtungskomponenten der Geschwindigkeit wie folgt definiert

$$\begin{aligned} \overline{v_i^\sigma}^2 &= \frac{\sum\limits_k \delta(\epsilon_k^\sigma - \epsilon_F)\,(\mathbf{v}_k^\sigma\,\mathbf{e}_i)^2}{\sum\limits_k \delta(\epsilon_k^\sigma - \epsilon_F)} = \frac{\frac{1}{(2\pi)^3\,\hbar}\oint\limits_{FF}\frac{dS_k^\sigma}{v_k^\sigma}\,(\mathbf{v}_k^\sigma\,\mathbf{e}_i)^2}{\frac{1}{V}\oint\limits_{FF}\frac{dS_k^\sigma}{v_k^\sigma}} \\ &= \frac{1}{e^2}\,\frac{\tilde{\sigma}_{ii}^\sigma}{n^\sigma(\epsilon_F)} \quad . \end{aligned} \tag{68}$$

$\mathbf{e}_i$ bezeichnet den Einheitsvektor in Richtung i $(= x, y, z)$ und $n^\sigma(\epsilon_F)$ ist die Zustandsdichte des Spinbandes σ an der FERMI-Energie. In kubischen Systemen gilt $\overline{v_x^\sigma} = \overline{v_y^\sigma} = \overline{v_z^\sigma}$. In tetragonalen Systemen existieren die Mittelwerte der Parallelkomponenten $\overline{v_x^\sigma} = \overline{v_y^\sigma}$ sowie der senkrechten Komponente $\overline{v_z^\sigma}$. Das FERMI-Flächen-Integral $\tilde{\sigma}_{ii}^\sigma$ ist proportional der Zustandsdichte und dem Quadrat der entsprechenden mittleren Geschwindigkeit

$$\tilde{\sigma}_{ii}^\sigma \;\propto\; n^\sigma(\epsilon_F)\,\overline{v_i^\sigma}^2 \quad . \tag{69}$$

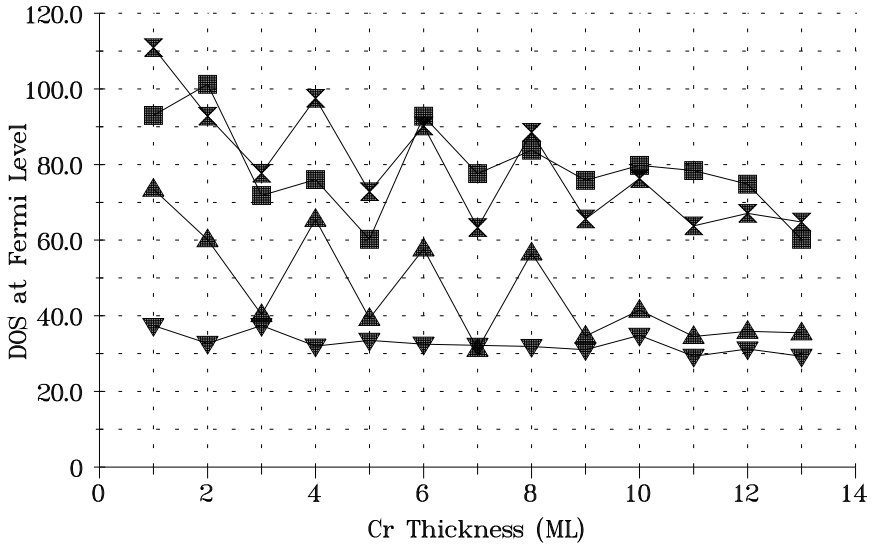


Abb. 21: Zustandsdichten an der FERMI-Energie

▲	$n^\uparrow(\epsilon_F)$	:	Majoritätsband, fm
▼	$n^\downarrow(\epsilon_F)$	:	Minoritätsband, fm
⧗	$n^\uparrow(\epsilon_F) + n^\downarrow(\epsilon_F)$	:	Gesamtzustandsdichte, fm
■	$n^{\uparrow\downarrow}(\epsilon_F)$	:	Gesamtzustandsdichte, afm

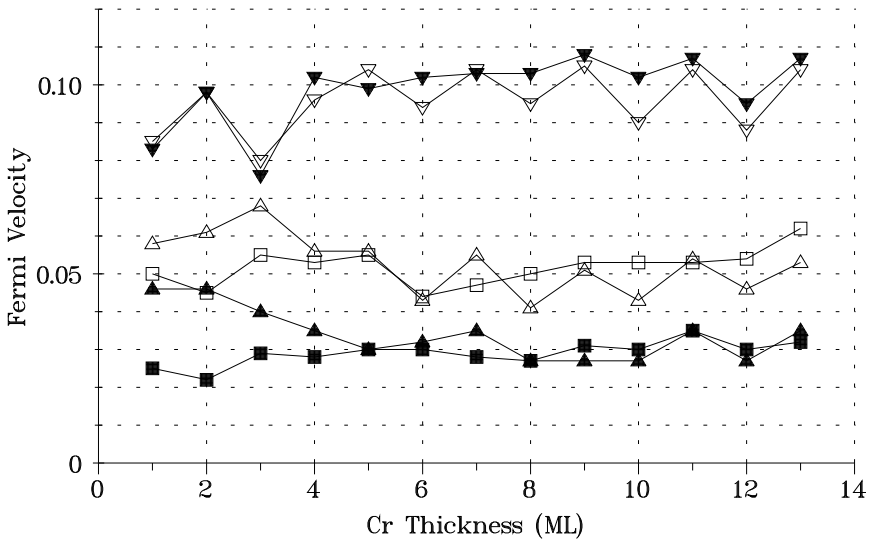


Abb. 22: Mittlere FERMI-Geschwindigkeiten

|| Schicht	△	$\overline{v_x^{\uparrow}}$	⊥ Schicht	▲	$\overline{v_z^{\uparrow}}$ Majoritätsband, fm
	▽	$\overline{v_x^{\downarrow}}$		▼	$\overline{v_z^{\downarrow}}$ Minoritätsband, fm
	□	$\overline{v_x^{\uparrow\downarrow}}$		■	$\overline{v_z^{\uparrow\downarrow}}$ afm

(Erläuterung siehe Text)

Betrachtet man eine Vielfachschicht in der die Spinanisotropie der Streuung aller enthaltenen Störungen verschwindet ($\beta \rightarrow 1$), so wird das Supermagnetwiderstandsverhältnis nur durch die FERMI-Flächen-Integrale bestimmt (vgl. Gl. (65))

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\tilde{\sigma}^{\uparrow} + \tilde{\sigma}^{\downarrow}}{\tilde{\sigma}^{\uparrow\downarrow}} - 1 \quad . \tag{70}$$

Die Gesamtzustandsdichte für die fm Konfiguration beträgt $n^{\uparrow}(\epsilon_F)+n^{\downarrow}(\epsilon_F)$. Die der afm Konfiguration wird mit $n^{\uparrow\downarrow}(\epsilon_F)$ bezeichnet. Diese unterscheiden sich relativ um maximal 20 % (s. Abb. 21). Aus dieser Differenz allein läßt sich die Größenordnung des Effektes nicht erklären. Ein größerer Unterschied tritt bei den mittleren FERMI-Geschwindigkeiten auf. Die Parallelkomponente des Minoritätsbandes $\overline{v}_x^{\downarrow}$ in fm Konfiguration ist etwa doppelt so groß wie die der Majoritätselektronen $\overline{v}_x^{\uparrow}$ und der entarteten Bänder in afm Konfiguration $\overline{v}_x^{\uparrow\downarrow}$ (s. Abb. 22). Für die senkrechten Komponenten $\overline{v}_z^{\downarrow}$ bzw. $\overline{v}_z^{\uparrow}$ und $\overline{v}_z^{\uparrow\downarrow}$ beträgt dieses Verhältnis etwa 3:1. Dies wird durch ein Abflachen der Bänder aufgrund von Hybridisierungen an den Grenzen der BRILLOUIN-Zone verursacht.
Im Rahmen dieser Näherung (spinunabhängige Streuung, Verwendung mittlerer FERMI-Geschwindigkeiten) bestimmt der Unterschied der mittleren FERMI-Geschwindigkeiten bei paralleler bzw. antiparalleler Ausrichtung der magnetischen Fe-Momente die Größe des Supermagnetwiderstands-Effektes.

7 Zusammenfassung

Das Supermagnetwiderstandsverhältnis von Fe/Cr-Vielfachschichten wurde aus ersten Prinzipien berechnet.

Grundlage für die Berechnung der Transporteigenschaften bildete die linearisierte BOLTZMANN-Gleichung in Relaxationszeitnäherung.

Die Kristallstrukur der Vielfachschichten konnte durch langgestreckte Superzellen modelliert werden. Die Dicken der Fe- und Cr-Schichten in den Systemen wurden variiert.

Mittels eines LCAO-Schemas war es im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie möglich, die Bandstruktur zu berechnen. Unter Verwendung einer modifizierten Tetraedermethode wurde die Topologie der FERMI-Fläche und die anisotrope FERMI-Geschwindigkeit ermittelt.

Die Streuung an Cr-Punkdefekten in den Fe-Schichten wurde durch gemittelte, spinabhängige Relaxationszeiten charakterisiert.

Durch Veränderung der Spinanisotropie der Streuung (verschiedene Punktdefekte, Phononen, Grenzflächenrauhigkeit) kann der Supermagnetwiderstands-Effekt verstärkt oder verringert werden.

Es wird festgestellt, daß die Größenordnung des Supermagnetwiderstandsverhältnisses im wesentlichen durch die Grundzustandseigenschaften der anisotropen FERMI-Fläche und FERMI-Geschwindigkeit der Schichtsysteme bestimmt wird.

Für des Verhalten des Supermagnetwiderstandsverhältnisses in Abhängigkeit der Zwischenschichtdicke konnten zwei Oszillationen mit Periodenlängen von 2 Monolagen bzw. zwischen 13 und 17 Monolagen ermittelt werden.

Das oszillierende Verhalten von Zwischenschichtkopplung und Supermagnetwiderstand wird durch die gleichen Periodenlängen bestimmt.

Mittels der vorgestellten Methode können das experimentell gefundene Verhalten des Supermagnetwiderstands-Effektes von Fe/Cr-Vielfachschichten in Abhängigkeit der Zwischenschichtdicke und die Größenordnung des Effekts gut beschrieben werden.

Die Streueigenschaften verschiedener Volumen- und Grenzflächendefekte in den Schichtsystemen können mittels anisotroper Relaxationszeiten beschrieben werden. Der Einfluß unterschiedlicher Streumechanismen auf den Supermagnetwiderstand läßt sich damit noch detaillierter untersuchen.

Literaturverzeichnis

[1] P. Grünberg, R. Schreiber, Y. Pang, M. B. Brodsky and H. Sowers, Phys. Rev. Lett. 57, 2442 (1986).

[2] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach and W. Zinn, Phys. Rev. B 39, 4828 (1989).

[3] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich and J. Chazelas, Phys. Rev. Lett. 61, 2472 (1988).

[4] R. Schad, C. D. Potter, P. Beliën, G. Verbanck, V. V. Moshchalkov and Y. Bruynseraede, Appl. Phys. Lett. 64, 3500 (1994).

[5] G. Lehmann, P. Rennert, M. Taut and H. Wonn, Phys. Stat. solid 37, K 27 (1970).

[6] S. Demokritov, J. A. Wolf, P. Grünberg and W. Zinn, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 231, 133 (1992).

[7] J. Unguris, R. J. Celotta and D. T. Pierce, Phys. Rev. Lett. 67, 140 (1991).

[8] J. Unguris, R. J. Celotta and D. T. Pierce, Phys. Rev. Lett. 69, 1125 (1992).

[9] M. Rührig, R. Schäfer, A. Hubert, R. Mosler, J. A. Wolf, P. Grünberg and S. Demokritov, Phys. Stat. solid (a) 125, 635 (1991).

[10] S. N. Okuno and K. Inomata, Phys. Rev. Lett. 72, 1553 (1994).

[11] D. M. Edwards, J. Mathon, R. B. Muniz and M. S. Phan, Phys. Rev. Lett. 67, 493 (1991), J. Phys. Cond. Matter 3, 4941 (1991).

[12] S. Mirbt, H. L. Skriver, M. Aldén and B. Johannson, Solid State Comm. 88, 331 (1993).

[13] M. v. Schilfgaarde and F.Herman, Phys. Rev. Lett. 71, 1923 (1993).

[14] S. T. Purcell, W. Folkerts, M. T. Johnson, N. W. E. McGee, K. Jager, J. aan de Stegge, W. B. Zeper, W. Hoving and P. Grünberg, Phys. Rev. Lett. 67, 903 (1991).

[15] S. Demokritov, J. A. Wolf, P. Grünberg and W. Zinn, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 231, 133 (1992).

[16] E. E. Fullerton, M. J. Conover, J. E. Mattson, C. H. Sowers and S. D. Bader, Phys. Rev. B 48, 15755 (1993).

[17] P. Bruno and C. Chappert, Phys. Rev. Lett. 67, 1602, 2592 (E) (1991).

[18] S. S. P. Parkin, R. Bhadra and K. P. Roche, Phys. Rev. Lett. 66, 2152 (1991).

[19] M. T. Johnson, S. T. Purcell, N. W. E. McGee, R. Coehoorn, J. aan de Stegge and W. Hoving , Phys. Rev. Lett. 68, 2688 (1992).

[20] Y. Wang, P. M. Levy and J. L. Fry, Phys. Rev. Lett. 65, 2732 (1990).

[21] P. Bruno and C. Chappert, Phys. Rev. Lett. 67, 1602, 2592 (E) (1991).

[22] J. L. Fry, E. C. Ethridge, P. M. Levy and Y. Wang, J. Appl. Phys. 69, 4780 (1991).

[23] P. Baumgart, B. A. Gurney, D. R. Wilhoit, T. Nguyen, B. Dieny and V. S. Speriosu, J. Appl. Phys. 69, 4792 (1991).

[24] H. Hasegawa, Phys. Rev. B 42, 2368 (1990).

[25] D. Stoeffler and F. Gautier, Prog. Theor. Phys. Suppl. 101, 139 (1990).

[26] F. Herman and R. Schrieffer, Phys. Rev. B 46, 5806 (1992).

[27] J. C. Slonczewski, Phys. Rev. B 39, 6995 (1989).

[28] D. M. Deaven, D. S. Rokshar and M. Johnson, Phys. Rev. B 44, 5977 (1991).

[29] R. P. Ericksson, K. B. Hathaway and J. R. Cullen, Phys. Rev. B 47, 2626 (1993).

[30] M. A. Ruderman and C. Kittel, Phys. Rev. 96, 99 (1954).

[31] T. Kasuya, Progr. Theor. Phys. (Japan) **16**, 45 (1956).

[32] K. Yosida, Phys. Rev. 106, 893 (1957).

[33] J.Friedel, Phil. Mag. 43, 153 (1952).

[34] P. H. Dederichs, 24. IFF Ferienkurs, KFA Jülich 1993.

[35] P. Bruno and C. Chappert, Phys. Rev. B 46, 261 (1992).

[36] G. E. W. Bauer, M. A. M. Gijs, S. K. L. Lenczowski and J. B. Giesbers, J. Mag. Mag. Mat. 126, 454 (1993).

[37] M. A. M. Gijs, S. K. L. Lenczowski and J. B. Giesbers, Phys. Rev. Lett. 70, 3343 (1993).

[38] S. S. P. Parkin, N. More and K. P. Roche, Phys. Rev. Lett. 64, 2304 (1990).

[39] E. E. Fullerton, M. J. Conover, J. E. Mattson, C. H. Sowers and S. D. Bader, Phys. Rev. B 48, 15755 (1993).

[40] C. D. Potter, R. Schad, P. Beliën, G. Verbanck, V. V. Moshchalkov, Y. Bruynseraede, M. Schäfer, R. Schäfer and P. Grünberg, Phys. Rev. B 49, 16055 (1994).

[41] A. Barthélémy, A. Fert, M. N. Baibich et al., J. Appl. Phys. 67, 5908 (1990).

[42] N.C. Mott, Adv. Phys. **13**, 325 (1964).

[43] I.A. Campbell and A. Fert, in *Ferromagnetic Materials*, edited by E.P. Wohlfahrt, North-Holland, New-York, 1982.

[44] P. M. Levy, S. Zhang and A. Fert, Phys. Rev. Lett. 65, 1643 (1990).

[45] P. M. Levy, K. Ounadjela, S. Zhang, Y. Wang and C. B. Sommers, J. Appl. Phys. 67, 5914 (1990).

[46] I. Inoue, H. Itoh and S. Maekawa, J. Mag. Mag. Mat. 121, 344 (1993).

[47] Z. Tešanovic, M. J. Jarič and S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. 57, 2760 (1986).

[48] K. Fuchs, Proc. Royal Soc. A 34, 100 (1938).

[49] E. H. Sondheimer, Adv. Phys. 1, 1 (1952).

[50] R. E. Camley and J. Barnaś, Phys. Rev. Lett. 63, 664 (1989).

[51] J. Barnaś, A. Fuss, R. E. Camley, P. Grünberg and W. Zinn, Phys. Rev. B 42, 8110 (1990).

[52] A. Barthélémy and A. Fert, Phys. Rev. B 43, 13124 (1991).

[53] B. L. Johnson and R. E. Camley, Phys. Rev. B 44, 9997 (1991).

[54] L. M. Falicov and R. Q. Hood, J. Mag. Mag. Mat. 121, 362 (1993).

[55] R. K. Nesbet, J. Phys. Cond. Matter 6, L 449 (1994).

[56] T. Oguchi, J. Mag. Mag. Mat. 126, 519 (1993).

[57] W. H. Butler, J. M. MacLaren and X. G. Zhang, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 313, 59 (1993).

[58] K. M. Scheep, P. J. Kelly and G. E. W. Bauer, submitted to Phys. Rev. Lett. , (1994).

[59] J. M. George, L. G. Pereira, A. Barthélémy, F. Petroff, L. Steren, J. L. Duvail and A. Fert, Phys. Rev. Lett. 72, 408 (1994).

[60] I. Mertig, Habilitationsschrift, TU Dresden (1994).

[61] W. Folkerts, W. Hoving and W. Coene, J. Appl. Phys. 71, 362 (1992).

[62] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, 864 (1964).

[63] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. 140, 1133 (1965).

[64] L. J. Sham and W. Kohn Phys. Rev. 145, 561 (1966).

[65] W. Kohn and P. Vashishta in *Theory of the Inhomogenous Electron Gas*, S. Lundquist and N. H. March (eds.), Plenum Press, New York, 1983.

[66] U. v.Barth and L. Hedin, J. Phys. C 5, 1629 (1972).

[67] S. H. Vosko, L. Wilk and M. Nusair, Can. J. Phys. 58, 1200 (1980).

[68] J. C. Slater and G. F. Koster, Phys. Rev. 94, 1498 (1954).

[69] H. Eschrig, in *Proc. 7th Symp. Electronic Structure, TU Dresden*, P. Ziesche (editor), 147 (1977).

[70] H. Eschrig and I. Bergert, Phys. Stat. solid (b) 90, 621 (1978).

[71] H. Eschrig, *Optimized LCAO Method and the Electronic Structure of Extended Systems*, Akademie-Verlag, Berlin 1988 and Springer-Verlag, Berlin 1989.

[72] M. Richter and H. Eschrig, Solid State Commun. 72, 263 (1989).

[73] E. P. Wohlfahrt, in *Ferromagnetic Materials*, edited by E.P. Wohlfahrt, North-Holland, New-York, 1980.

[74] C. L. Fu and A. J. Freeman, J. Mag. Mag. Mat. 54-57, 777 (1986).

[75] F. Herman, J. Sticht and M. v. Schilfgaarde, J. Appl. Phys. 69, 4783 (1991).

[76] D. Stoeffler and F. Gautier, Phys. Rev. B 44, 10389 (1991).

[77] I. Mertig, R. Zeller and P.H. Dederichs, Phys. Rev. B 47, 16178 (1993).

[78] I. Mertig, E. Mrosan, and P. Ziesche, *Multiple Scattering Theory of Point Defects in Metals: Electronic Properties*, Teubner-Verlag, Leipzig, 1987.

[79] I. Mertig, R. Zeller and P. H. Dederichs, in: *Metallic Alloys: Experimental and Theoretical Perspectives*, J. S. Faulkner and R. Jordan (eds.), NATO ASI Series E 256, 423 (1994).

[80] F. Petroff, A. Barthélémy, A. Hamzić, A. Fert, P. Etienne, S. Lequien and G. Creuzet, J. Mag. Mag. Mat. 93, 95 (1991).

[81] E. E. Fullerton, D. M. Kelly, J. Guimpel and J. K. Schuller, Phys. Rev. Lett. 68, 859 (1992).

[82] N. M. Rensing, A. B. Payne and B. M. Clemens, J. Mag. Mag. Mat. 121, 436 (1993).

[83] H. Eschrig, private communication (1994).

[84] W. H. Press, *Numerical Recipies, the art of scientific computing*, Cambrigde Univ. Press, 1992.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen meinen Dank aussprechen, die zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben.

Herrn Prof. K. Becker möchte ich danken für sein stetes Interesse an der Arbeit.

Meiner Betreuerin, Frau Dr. I. Mertig, gilt mein besonderer Dank für die Betreuung der interessanten Aufgabenstellung. Sie war mir stets eine aufgeschlossene und motivierende Gesprächspartnerin.

Herrn Dr. M. Richter danke ich für die Einführung in das Programm zur LCAO-Bandstrukturberechnung und sein stets offenes Ohr für die dabei auftretenden Probleme.

Herr Dr. H. Wonn konnte viele hilfreiche Hinweise zur Lösung von numerischen Problemen geben.

Herr Jörg Binder unterstützte mich bei der Erstellung des Layouts der vorliegenden Arbeit.

Frau Susann Götze möchte ich für die gründliche Korrektur des Manuskriptes und ihr Verständnis danken.

Eidesstattliche Erklärung

Ich erkläre hiermit, daß ich die vorliegende Arbeit

"Beiträge zur Theorie des Supermagnetwiderstandes magnetischer Vielfachschichten"

selbständig und nur mit den angegebenen Mitteln angefertigt habe.

Peter Zahn

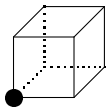
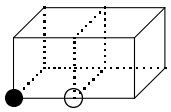
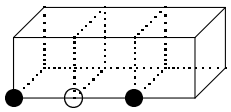
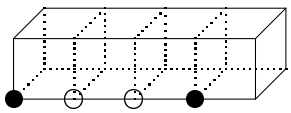
A Modellierung von Fermi-Flächen in Schichtsystemen

Die Transporteigenschaften von Schichtsystemen können durch Lösung der BOLTZMANN-Gleichung gewonnen werden. Dazu ist es notwendig, die anisotrope FERMI-Fläche und FERMI-Geschwindigkeit zu ermitteln. Im folgenden werden die Ergebnisse der Untersuchungen zum Verhalten der FERMI-Fläche bei wachsender Dicke der Schichten eines Modellsystems dargestellt.

A.1 Modellierung der Systeme

Die Modellsysteme seien folgendermaßen aufgebaut. Atome der Sorten A und B befinden sich auf den Plätzen eines einfach kubischen Gitters mit der Gitterkonstante a. Jedes Atom habe ein Valenzelektron in einem s-artigen Orbital. Die atomaren Potentiale seien sehr ähnlich. Die Orbitale benachbarter Atome überlappen sich wenig. Die Bandstruktur wird in einer Tight-Binding-Näherung berechnet. Dabei wird nur die Überlappung mit der 1. Nachbarschaftssphäre einbezogen.
In Tab. VI sind die geometrischen Parameter der untersuchten Systeme zusammengestellt. Die Vektoren $\mathbf{r}^{A_i}$ und $\mathbf{r}^{B_i}$ bezeichnen die Orte der Atome A bzw. B in der Elementarzelle, die Vektoren $\mathbf{R}_i$ die möglichen invarianten Translationen des Gitters.

Tab. VI: Geometrische Parameter der Modellsysteme,
alle Vektoren in Einheiten der Gitterkonstante a,
$\mathbf{r}^{A_i}$, $\mathbf{r}^{B_i}$: Orte der Atome A bzw. B
$\mathbf{R}_i$: Translationen des Gitters ($n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}$)

System	$\mathbf{r}^{A_i}$	$\mathbf{r}^{B_i}$	$\mathbf{R}_i$	Elementarzelle
A	(0,0,0)	-	(n_1, n_2, n_3)	
A_1B_1	(0,0,0)	(0,0,1)	$(n_1, n_2, 2n_3)$	
A_2B_1	(0,0,0) (0,0,2)	(0,0,1)	$(n_1, n_2, 3n_3)$	
A_2B_2	(0,0,0) (0,0,3)	(0,0,1) (0,0,2)	$(n_1, n_2, 4n_3)$	

A.2 Tight-Binding-Bandstrukturberechnung

Im folgenden wird die Konstruktion des Hamiltonoperators, der BLOCH-Wellenfunktionen, sowie des Gleichungssystems zur Bestimmung der Energieeigenwerte erläutert.
Die Atome A bzw. B befinden sich an den Orten $\mathbf{R}_i^{A_j}$ bzw. $\mathbf{R}_i^{B_j}$

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_i^{A_j} &= \mathbf{R}_i + \mathbf{r}^{A_j} \\ \mathbf{R}_i^{B_j} &= \mathbf{R}_i + \mathbf{r}^{B_j} \quad . \end{aligned} \tag{71}$$

Dabei ist i der Index der Elementarzelle und j der Platzindex innerhalb der Elementarzelle. Der Gesamthamiltonoperator $\mathcal{H}$ wird aus den einzelnen atomaren Hamiltonoperatoren $\hat{\mathcal{H}}_i^{A_j}$ und $\hat{\mathcal{H}}_i^{B_{j'}}$ konstruiert

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \hat{\mathcal{H}}_i^{A_j} + \sum_{i,j'} \hat{\mathcal{H}}_i^{B_{j'}} \tag{72}$$

Die Summen über j bzw. j' laufen von 1 bis n_A bzw. n_B, den Anzahlen der Atome A bzw. B pro Elementarzelle, die Summe i umfaßt alle Elementarzellen. Die atomaren Hamiltonoperatoren $\hat{\mathcal{H}}_i^{A_j}$ und $\hat{\mathcal{H}}_i^{B_{j'}}$ haben folgende Gestalt

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_i^{A_j} &= \hat{T}_i^{A_j} + \hat{V}_i^{A_j} \\ \hat{\mathcal{H}}_i^{B_{j'}} &= \hat{T}_i^{B_{j'}} + \hat{V}_i^{B_{j'}} \end{aligned} \tag{73}$$

Dabei seien die Potentiale $\hat{V}_i^{A_j}$ und $\hat{V}_i^{B_{j'}}$ um die Orte $\mathbf{R}_i^{A_j}$ bzw. $\mathbf{R}_i^{B_{j'}}$ zentriert. Die Operatoren der kinetischen Energie $\hat{T}_i^{A_j}$ und $\hat{T}_i^{B_{j'}}$ wirken auf die Koordinaten der Zustände $|\, A_i^j \,\rangle$ bzw. $|\, B_i^{j'} \,\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_i^{A_j} \,|\, A_i^j \,\rangle &= (\hat{T}_i^{A_j} + \hat{V}_i^{A_j}) \,|\, A_i^j \,\rangle = \varepsilon_A \,|\, A_i^j \,\rangle \\ \hat{\mathcal{H}}_i^{B_{j'}} \,|\, B_i^{j'} \,\rangle &= (\hat{T}_i^{B_{j'}} + \hat{V}_i^{B_{j'}}) \,|\, B_i^{j'} \,\rangle = \varepsilon_B \,|\, B_i^{j'} \,\rangle \quad . \end{aligned} \tag{74}$$

Die Zustände $|\, A_i^j \,\rangle$ und $|\, A_i^{j'} \,\rangle$ sind Eigenzustände der Operatoren $\hat{\mathcal{H}}_i^{A_j}$ und $\hat{\mathcal{H}}_i^{A_{j'}}$. Sie sind bis auf eine Translation um den Vektor $\mathbf{R}_i^{A_j} - \mathbf{R}_i^{A_{j'}}$ identisch. Aus den Zuständen

$| A_i^j \rangle$ und $| B_i^{j'} \rangle$ läßt sich ein Variationsansatz für die BLOCH-Wellenfunktion gewinnen

$$| \Psi_k \rangle \;=\; \sum_i e^{ik\mathbf{R}_i} \left[\sum_j^{n_A} \; a_k^j \; | A_i^j \rangle \;+\; \sum_{j'}^{n_B} \; b_k^{j'} \; | B_i^{j'} \rangle \right] \quad , \quad \underline{\alpha_k} \;=\; \begin{pmatrix} a_k^1 \\ : \\ a_k^{n_A} \\ b_k^1 \\ : \\ b_k^{n_B} \end{pmatrix} \qquad .(75)$$

Der Zustandsvektor $\underline{\alpha_k}$ faßt die Entwicklungskoeffizienten a_k^1 bis $a_k^{n_A}$ und b_k^1 bis $b_k^{n_B}$ zusammen. Aus der SCHRÖDINGER-Gleichung für die Ein-Teilchenzustände $| \Psi_k \rangle$

$$\mathcal{H} \, | \Psi_k \rangle \;=\; \epsilon_{k\nu} \, | \Psi_k \rangle \tag{76}$$

ergibt sich für jeden Wellenvektor $\mathbf{k}$ ein Eigenwertproblem für den Zustandsvektor $\underline{\alpha_k}$ und das Energiespektrum $\epsilon_{k\nu}$.
Im folgenden sollen die Koeffizienten i und j zu einem Index l = (i, j) zusammengefaßt werden.

$$| A_l \rangle \; , \; | B_{l'} \rangle$$

$$\mathcal{H} \;=\; \sum_l \left[\hat{T}_l^A \;+\; \hat{V}_l^A \right] \;+\; \sum_{l'} \left[\hat{T}_{l'}^B \;+\; \hat{V}_{l'}^B \right]$$

Um die Anwendung von $\mathcal{H}$ auf $| \Psi_k \rangle$ zu beschreiben, werden folgende lineare Näherungen eingeführt

$$(\hat{V}_l^A \;+\; \hat{T}_l^A) \, | A_l \rangle \;=\; \varepsilon_A \, | A_l \rangle \tag{77}$$

$$(\hat{V}_l^B \;+\; \hat{T}_l^B) \, | B_l \rangle \;=\; \varepsilon_B \, | B_l \rangle \tag{78}$$

$$\hat{V}_l^A \, | A_{l'} \rangle \;=\; V_{AA} \, | A_{l'} \rangle + K_{AA} \, | A_l \rangle \tag{79}$$

$$\hat{V}_l^B \, | B_{l'} \rangle \;=\; V_{BB} \, | B_{l'} \rangle + K_{BB} \, | A_l \rangle \tag{80}$$

$$\hat{V}_l^B \, | A_{l'} \rangle \;=\; V_{BA} \, | A_{l'} \rangle + K_{BA} \, | B_l \rangle \tag{81}$$

$$\hat{V}_l^A \, | B_{l'} \rangle \;=\; V_{AB} \, | A_{l'} \rangle + K_{AB} \, | B_l \rangle \qquad . \tag{82}$$

Dabei sollen die Plätze l und l' im Gitter benachbart sein. Für nicht benachbarte Gitterplätze l und l' werden die Terme $\hat{V}_l^A \, | A_{l'} \rangle$, $\hat{V}_l^B \, | B_{l'} \rangle$, $\hat{V}_l^B \, | A_{l'} \rangle$ und $\hat{V}_l^A \, | B_{l'} \rangle$ vernachlässigt.

Benutzt man die Gleichungen (77) bis (82) und den Ansatz für die Wellenfunktion aus Gl. (75) so erhält man aus Gl. (76) für den Zustandsvektor $\underline{\alpha}_k$ ein Eigenwertproblem vom Rang $n_A + n_B$ der Form

$$\hat{D}_k \, \underline{\alpha}_k \;=\; \epsilon_{k\nu} \, \underline{\alpha}_k \qquad . \tag{83}$$

Die Matrix $\hat{D}_k$ ist dabei vom Wellenvektor **k** abhängig. Für die einzelnen untersuchten Strukturen ergaben sich folgende Lösungen bzw. Eigenwertgleichungen.
Die Gitterstrukturen sind in Tab. VI näher erläutert. k_x, k_y und k_z bezeichnen die kartesischen Komponenten des Wellenvektors **k**.

einfach kubische Struktur

$$\epsilon_k \;=\; 1 + 6V + 2K \left(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a\right) \tag{84}$$

Schichtstruktur A_1B_1

$$\hat{D}_k = \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon_A} & K_{BA}\left(1 + e^{2ik_z a}\right) \\ K_{AB}\left(1 + e^{-2ik_z a}\right) & \tilde{\varepsilon_B} \end{pmatrix} \tag{85}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon_A} &= \varepsilon_A + 2V_{BA} + 4V_{AA} + 2K_{AA}\left(\cos k_x a + \cos k_y a\right) \\ \tilde{\varepsilon_B} &= \varepsilon_A + 2V_{AB} + 4V_{BB} + 2K_{BB}\left(\cos k_x a + \cos k_y a\right) \\ C &= 2K_{AB}\, K_{BA}\left(1 + \cos 2k_z a\right) \\ \epsilon_k^{\pm} &= \frac{\tilde{\varepsilon_A} + \tilde{\varepsilon_B}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\tilde{\varepsilon_A} - \tilde{\varepsilon_B}}{2}\right)^2 + C} \end{aligned} \tag{86}$$

Schichtstruktur A_2B_1

$$\hat{D}_k = \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon_A} & K_{AB} & K_{AA}\left(1 + e^{3ik_z a}\right) \\ K_{BA} & \tilde{\varepsilon_B} & K_{BA} \\ K_{AA}\left(1 + e^{-3ik_z a}\right) & K_{AB} & \tilde{\varepsilon_A} \end{pmatrix} \tag{87}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon_A} &= \varepsilon_A + V_{BA} + 5V_{AA} + 2K_{AA}\left(\cos k_x a + \cos k_y a\right) \\ \tilde{\varepsilon_B} &= \varepsilon_A + 2V_{AB} + 4V_{BB} + 2K_{BB}\left(\cos k_x a + \cos k_y a\right) \end{aligned}$$

Schichtstruktur A_2B_2

$$\hat{D}_k = \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon_A} & K_{AB} & 0 & K_{AA}\left(1+e^{4ik_z a}\right) \\ K_{BA} & \tilde{\varepsilon_B} & K_{BB} & 0 \\ 0 & K_{BB} & \tilde{\varepsilon_B} & K_{BA} \\ K_{AA}\left(1+e^{-4ik_z a}\right) & 0 & K_{AB} & \tilde{\varepsilon_A} \end{pmatrix} \tag{88}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon_A} &= \varepsilon_A + V_{BA} + 5V_{AA} + 2K_{AA}\left(\cos k_x a + \cos k_y a\right) \\ \tilde{\varepsilon_B} &= \varepsilon_A + V_{AB} + 5V_{BB} + 2K_{BB}\left(\cos k_x a + \cos k_y a\right) \end{aligned}$$

Das Eigenwertproblem wurde mit Hilfe von Standardroutinen auf einem Netz von k-Punkten im irreduziblen Teil der BRILLOUIN-Zone gelöst [84]. Dabei wurden die auftretenden Koeffizienten folgendermaßen parametrisiert

$$\begin{aligned} \varepsilon_A &= 1 \quad , \quad \varepsilon_B = 1+\delta \\ K_{AA} &= K \quad , \quad V_{AA} = V \\ K_{BB} &= K(1+\delta) \quad , \quad V_{BB} = V(1+\delta) \\ K_{AB} &= K_{BA} = K(1+2\delta) \quad , \quad V_{AB} = V_{BA} = V(1+2\delta) \qquad . \end{aligned} \tag{89}$$

Zur Berechnung der Bandstruktur wurden die Werte $K = V = 0.4$ und $\delta = 0.1$ gewählt. Es wurde angenommen, daß alle Zustände spinentartet sind. Die FERMI-Energie konnte aus der Bedingung ermittelt werden, daß genau die Hälfte aller vorhandenen Zustände besetzt ist. Aus der Bandstruktur $\epsilon_{k\nu}$ wurde mittels des in Abschnitt 4.3 beschriebenen Verfahrens die FERMI-Fläche ermittelt.

A.3 Fermiflächen der Modellsysteme

Für unterschiedliche Schichtdicken wurden die FERMI-Flächen ermittelt. Mit wachsender Dicke der Schichten nimmt die Anzahl der Blätter der FERMI-Fläche zu, da sich auch die Anzahl der Bänder erhöht.
Das prinzipielle Verhalten der FERMI-Flächen kann mit den folgenden Modellbetrachtungen beschrieben werden.
Bei Vergrößerung der Elementarzelle in eine kristallographische Richtung reduziert sich die BRILLOUIN-Zonenausdehnung in eben diese Richtung. Eine Verdopplung der Elementarzelle bewirkt eine Reduktion der BRILLOUIN-Zone um die Hälfte (siehe Abb. 23 und 24). Durch Bandaufspaltung an den Zonengrenzen entstehen aus dem ursprünglichen Blatt der FERMI-Fläche für ein Atom/Elementarzelle zwei Blätter (s. Abb. 24). Die Entstehung dieser Blätter kann man sich durch Aufteilung der ursprünglichen BRILLOUIN-Zone in mehrere Teile und der Verschiebung um kleinstmögliche reziproke Gittervektoren veranschaulichen (siehe Abb. 24, rechter Teil).
Die Entstehung der FERMI-Fläche für Verdreifachung bzw. Vervierfachung des Volumens der Elementarzelle ist in den Abbildungen 25 und 26 dargestellt.
In den Abbildungen 31 und 32 sind die FERMI-Flächen der Schichtsysteme Fe_3Cr_1 und Fe_3Cr_5 in ferromagnetischer Konfiguration dargestellt. Das Verhalten der FERMI-Flächen der Minoritätselektronen läßt sich mit der obigen Konstruktion nachvollziehen.

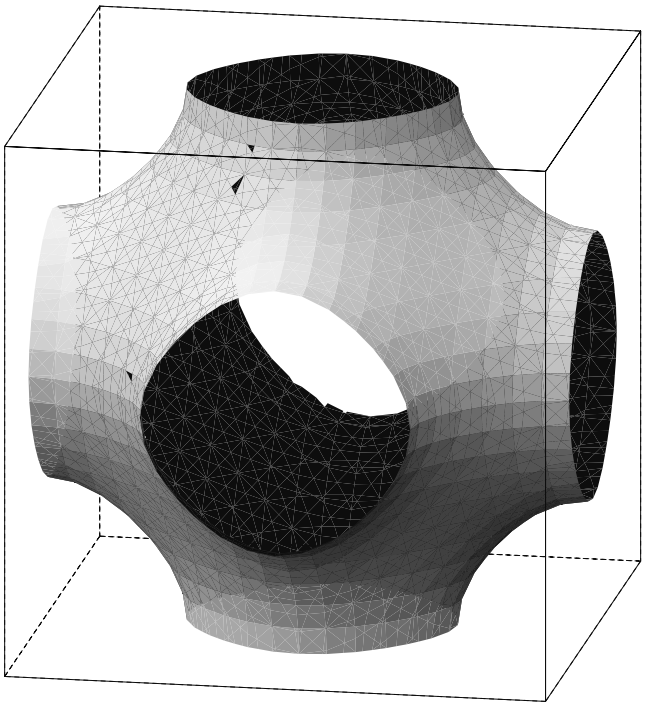


Abb. 23: FERMI-Fläche eines einfach kubischen Modellsystems, Bandstruktur in Tight-Binding-Näherung, Erläuterung in (A.2)

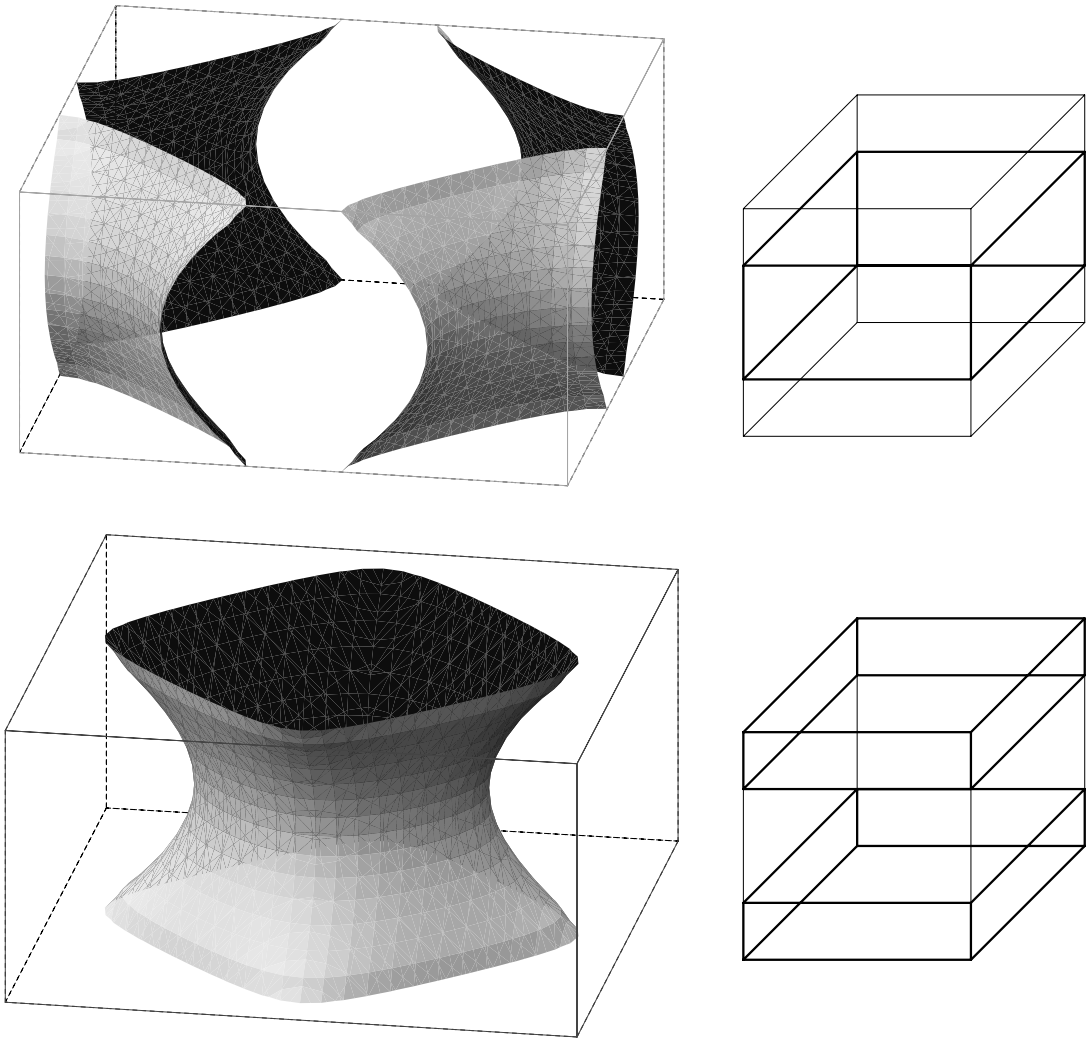


Abb. 24: FERMI-Fläche einer einfach kubischen Modellschichtstruktur A_1B_1

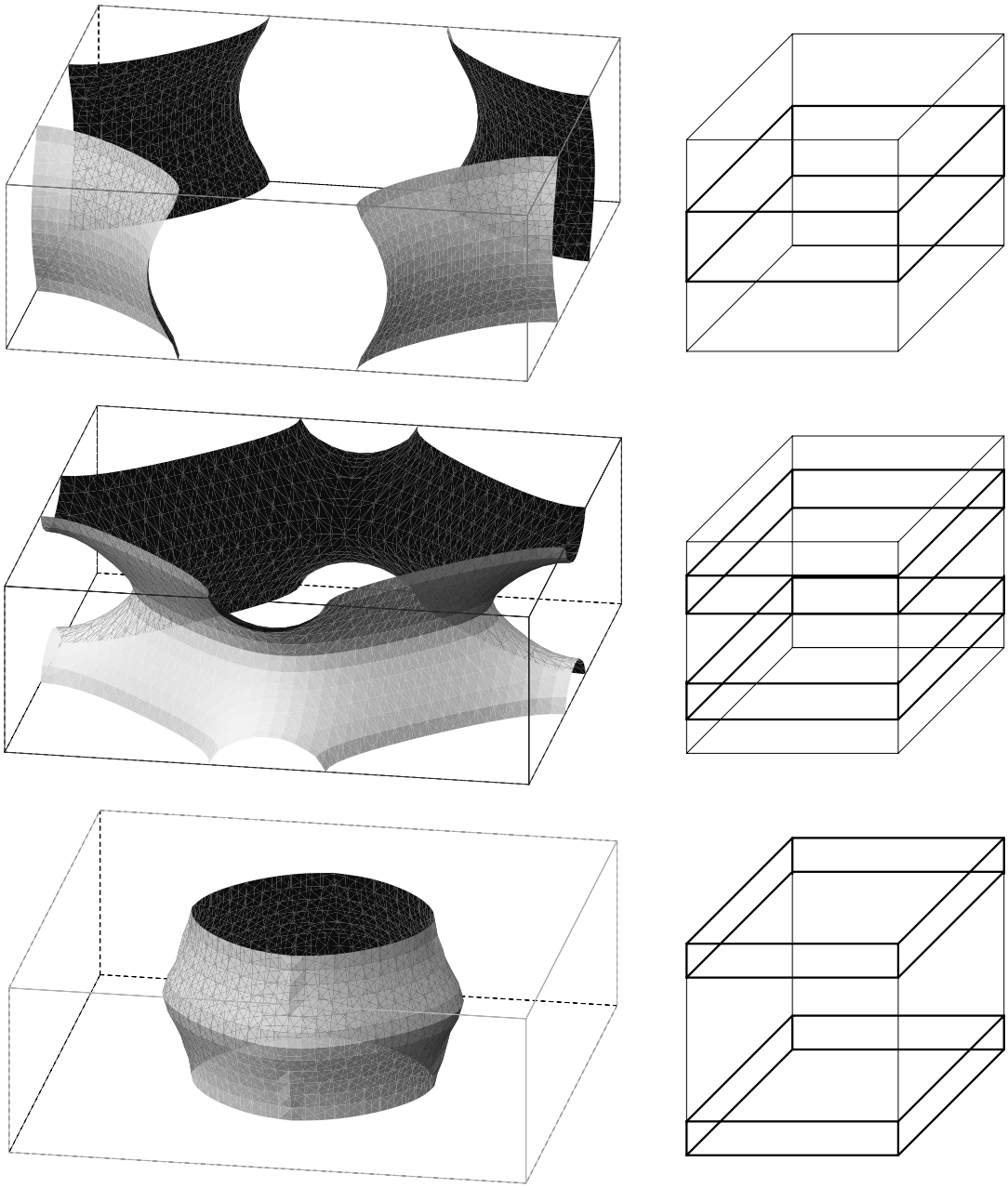


Abb. 25: FERMI-Fläche einer einfach kubischen Modellschichtstruktur A_2B_1

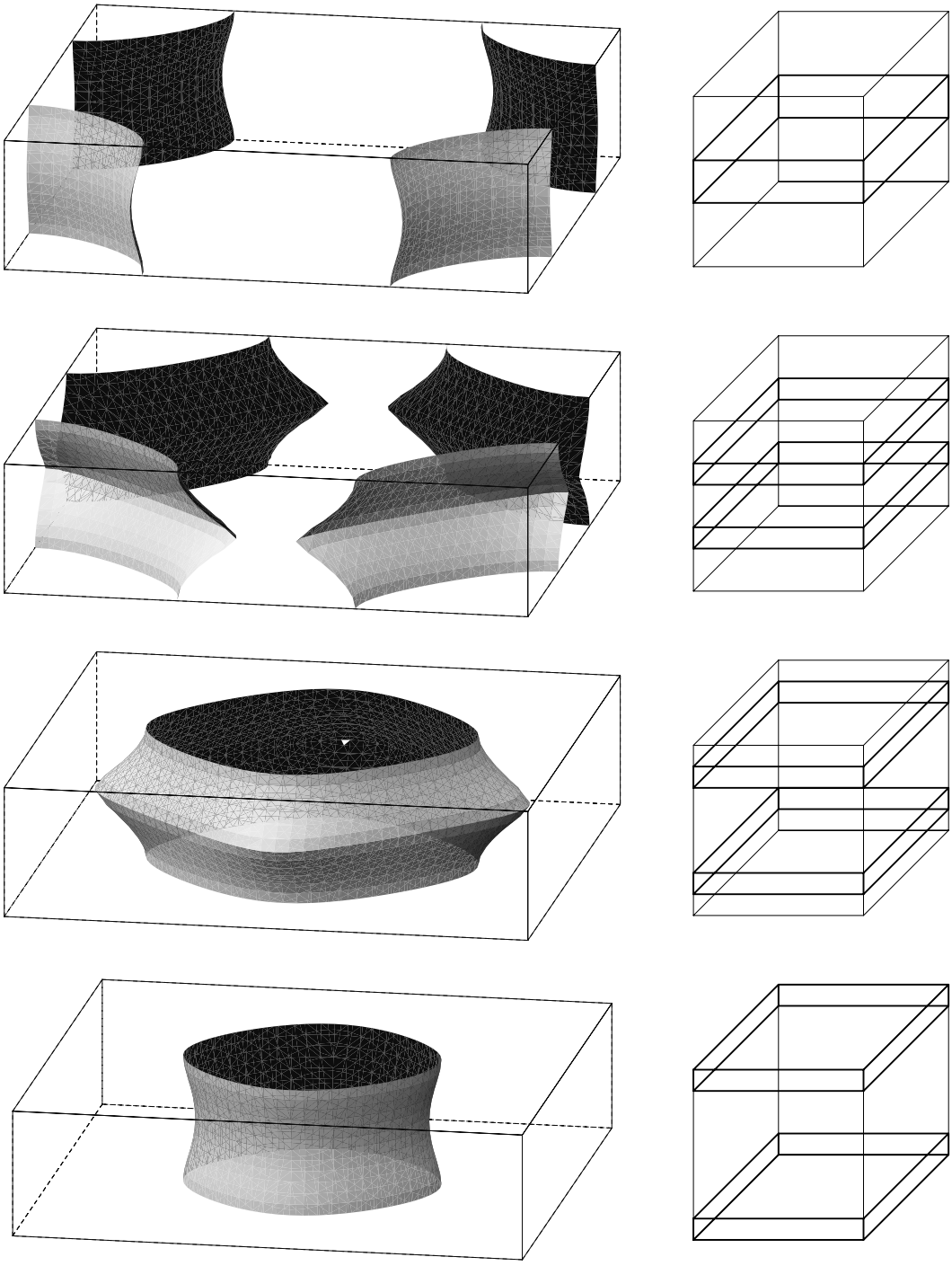


Abb. 26:
FERMI-Fläche einer einfach kubischen Modellschichtstruktur A_2B_2

B Fermi-Flächen ausgewählter Systeme

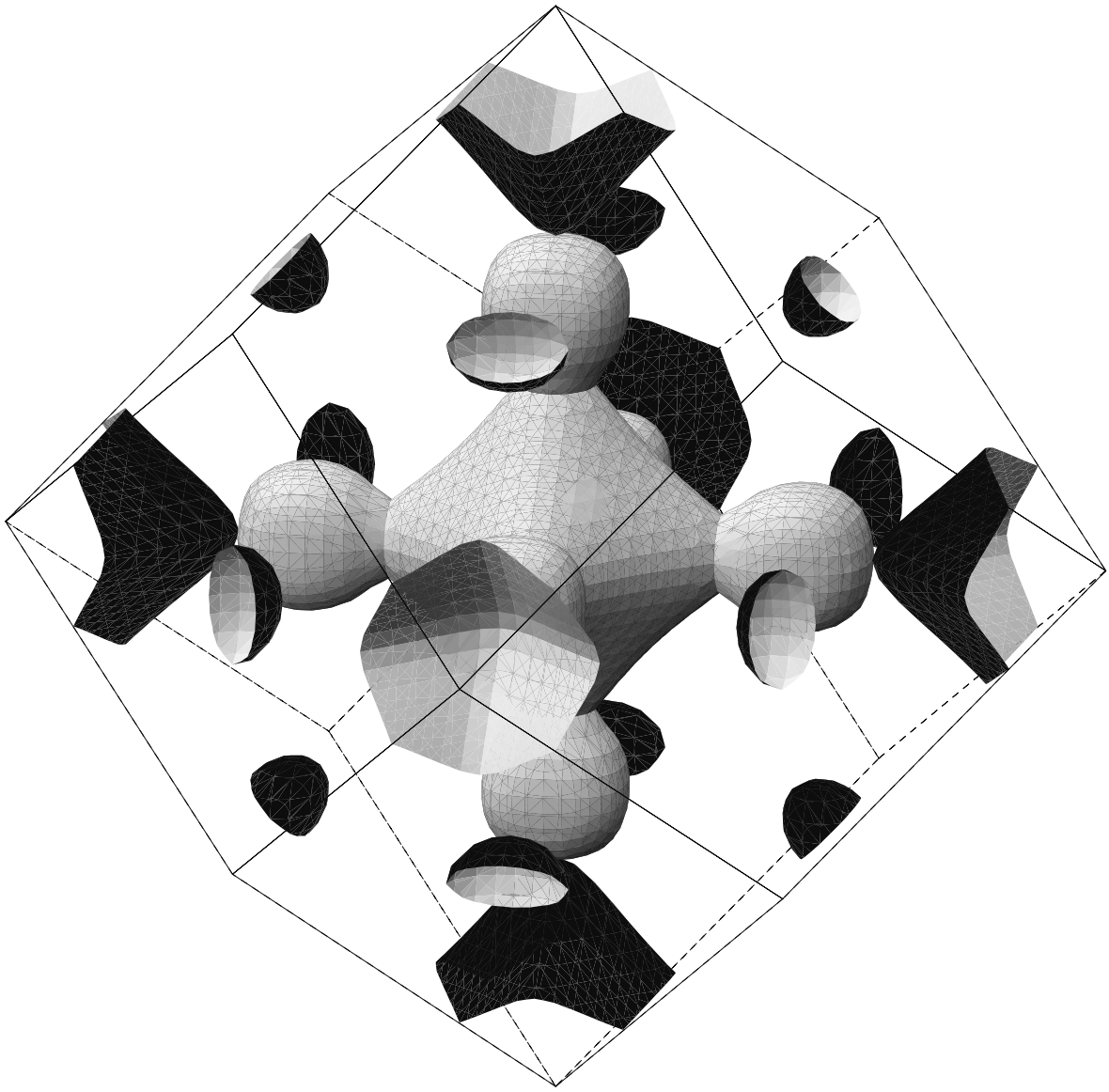


Abb. 27: FERMI-Fläche von Cr, paramagnetisch, a = 5.4 a.u., 3., 4., 5. Band

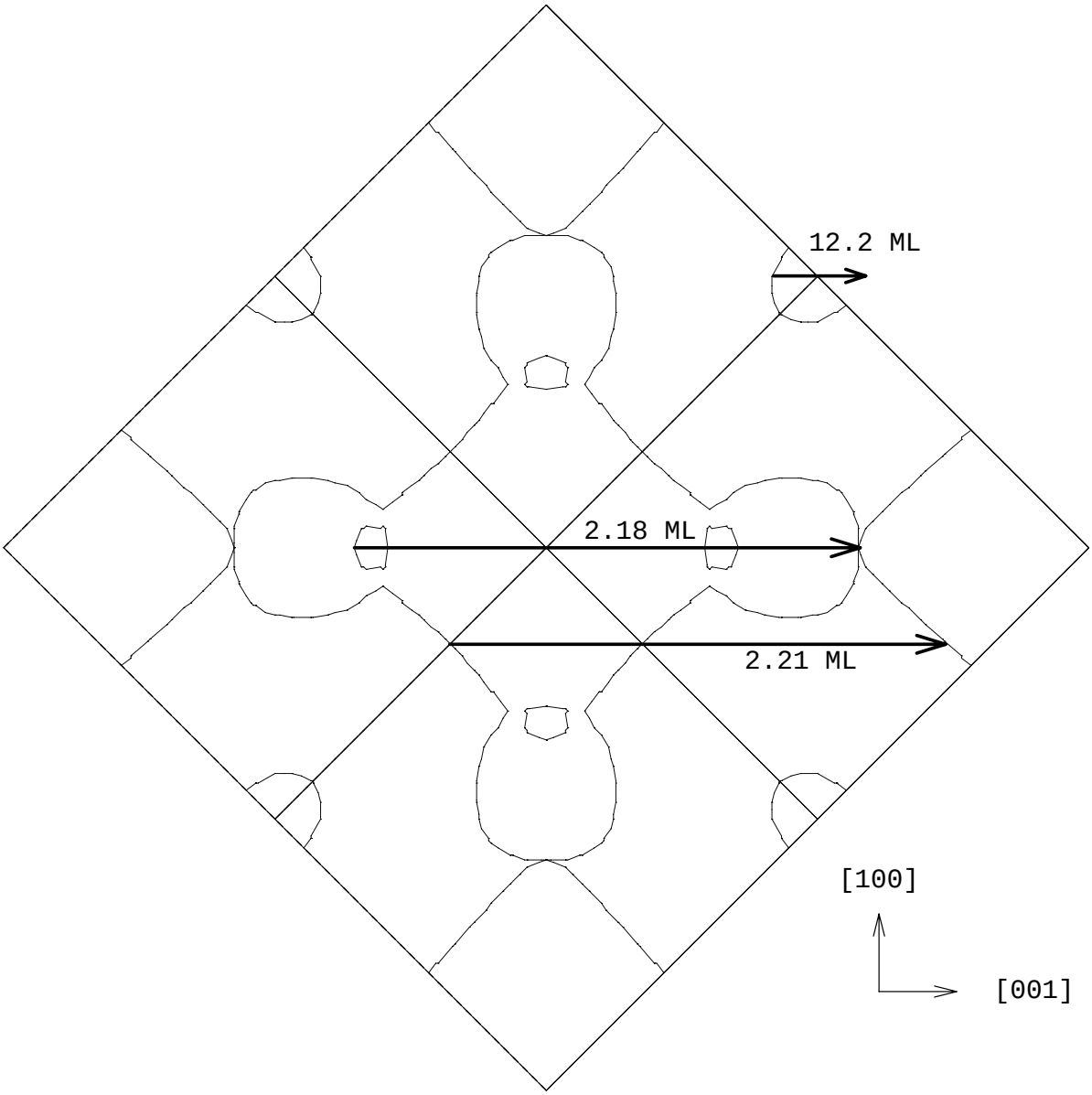


Abb. 28: FERMI-Fläche von Cr, paramagnetisch, a = 5.4 a.u.,
Vektoren bestimmen nach RKKY-Theorie das oszillierende Verhalten der Zwischenschichtkopplung in [001]-Richtung (angegeben sind die resultierenden Periodenlängen)

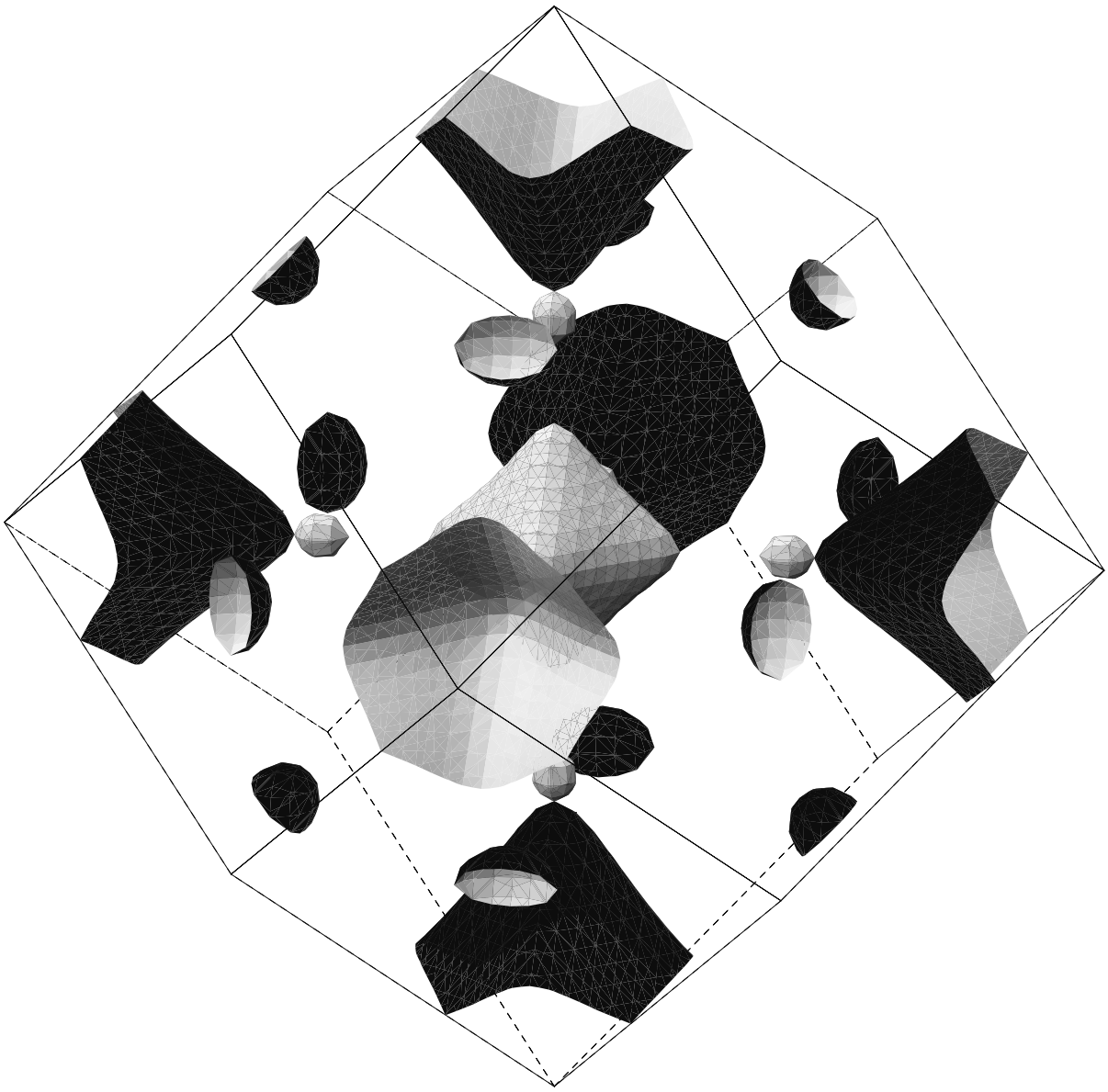


Abb. 29: FERMI-Fläche der Minoritätselektronen von Fe, a = 5.4 a.u., $\mu = 2.16\mu_B$, 3. und 4. Band

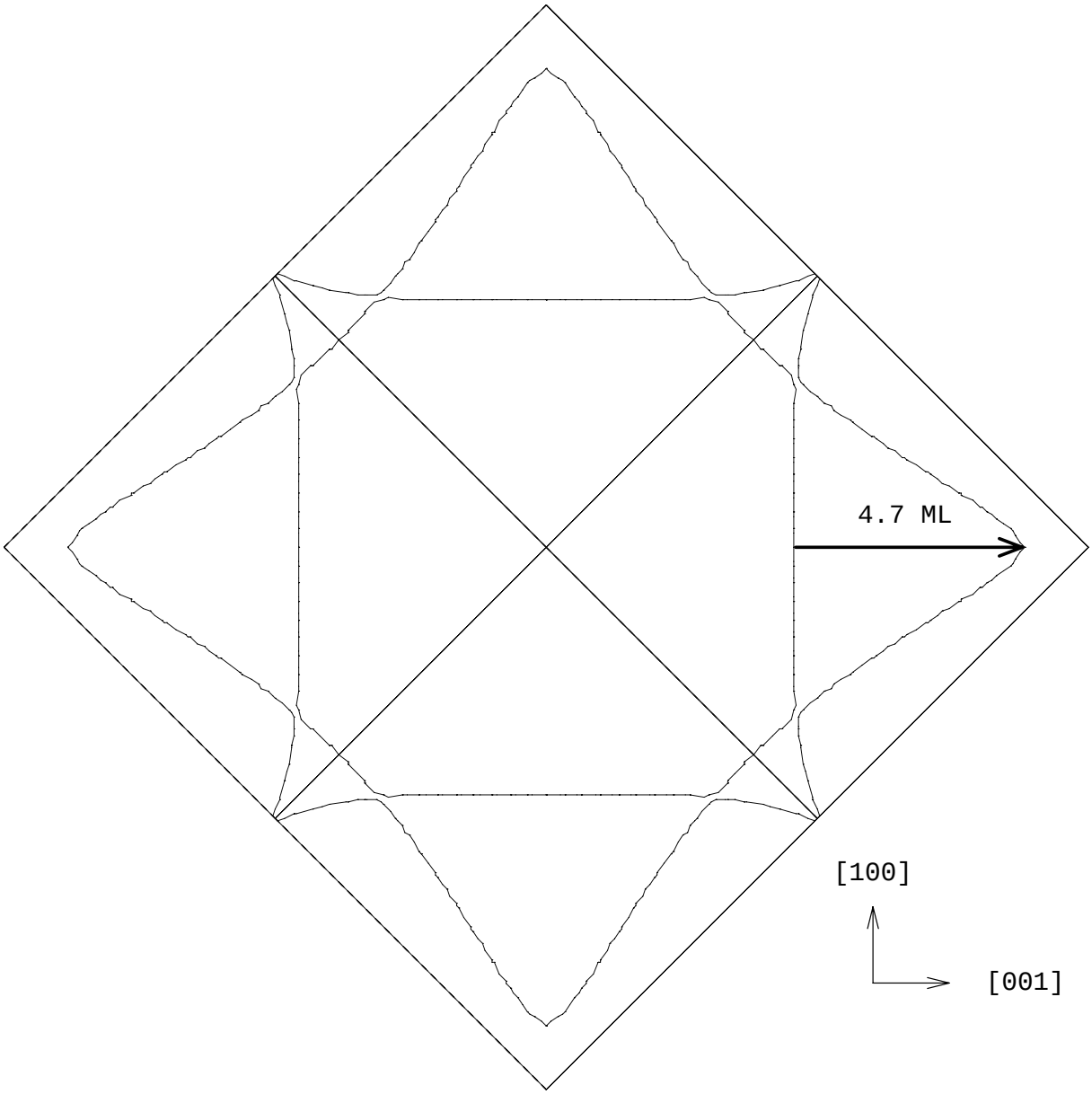


Abb. 30: FERMI-Fläche der Majoritätselektronen von Fe, a = 5.4 a.u.,
Schnitt ⊥ [010], Länge des Vektors entspricht einer Periodenlänge von 4.7 ML

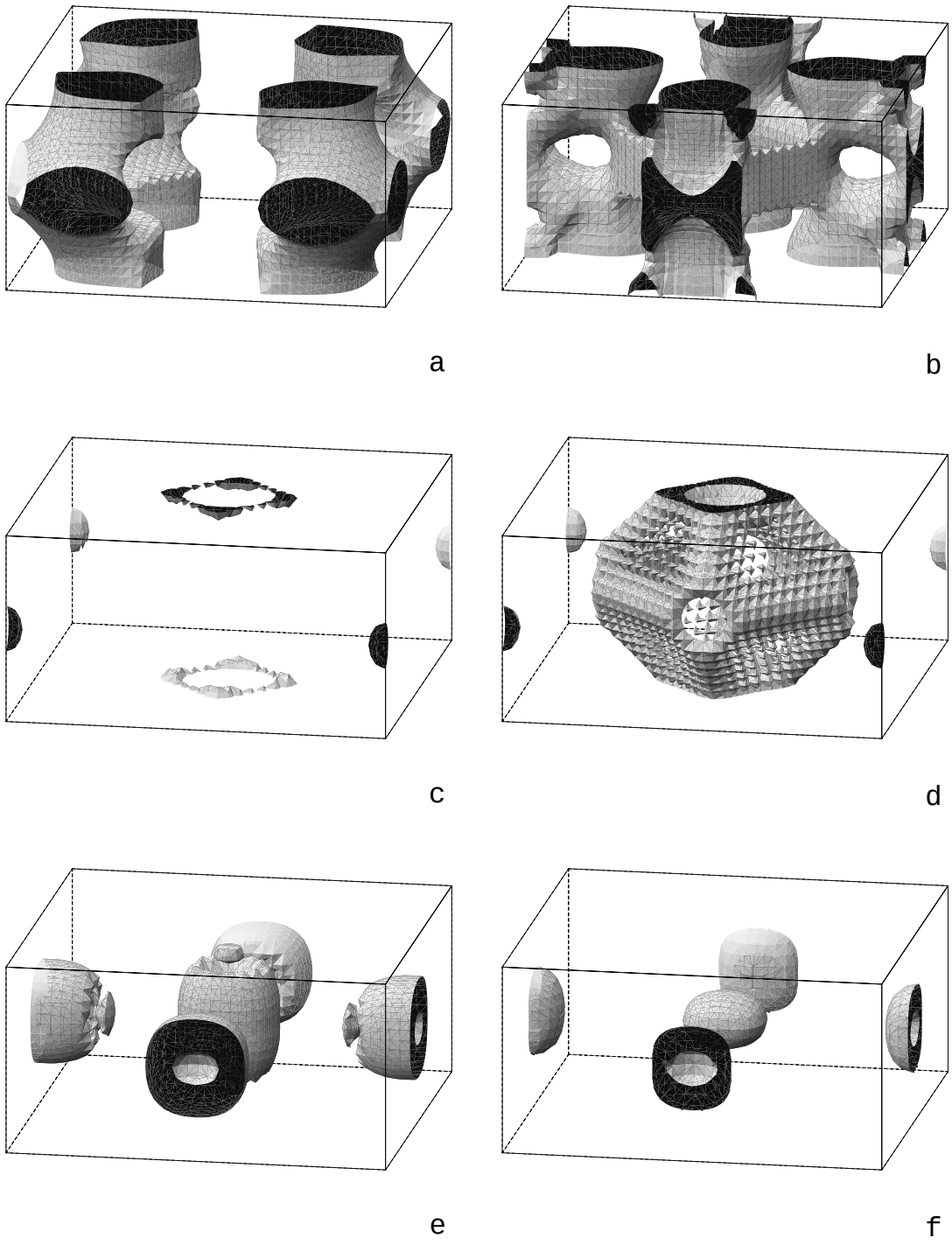


Abb. 31: FERMI-Fläche des Fe_3Cr_1-Schichtsystems (fm Konfiguration), Bänder : a) $18^{\uparrow}$, b) $19^{\uparrow}$, c) $11^{\downarrow}$, d) $12^{\downarrow}$, e) $13^{\downarrow}$, f) $14^{\downarrow}$,

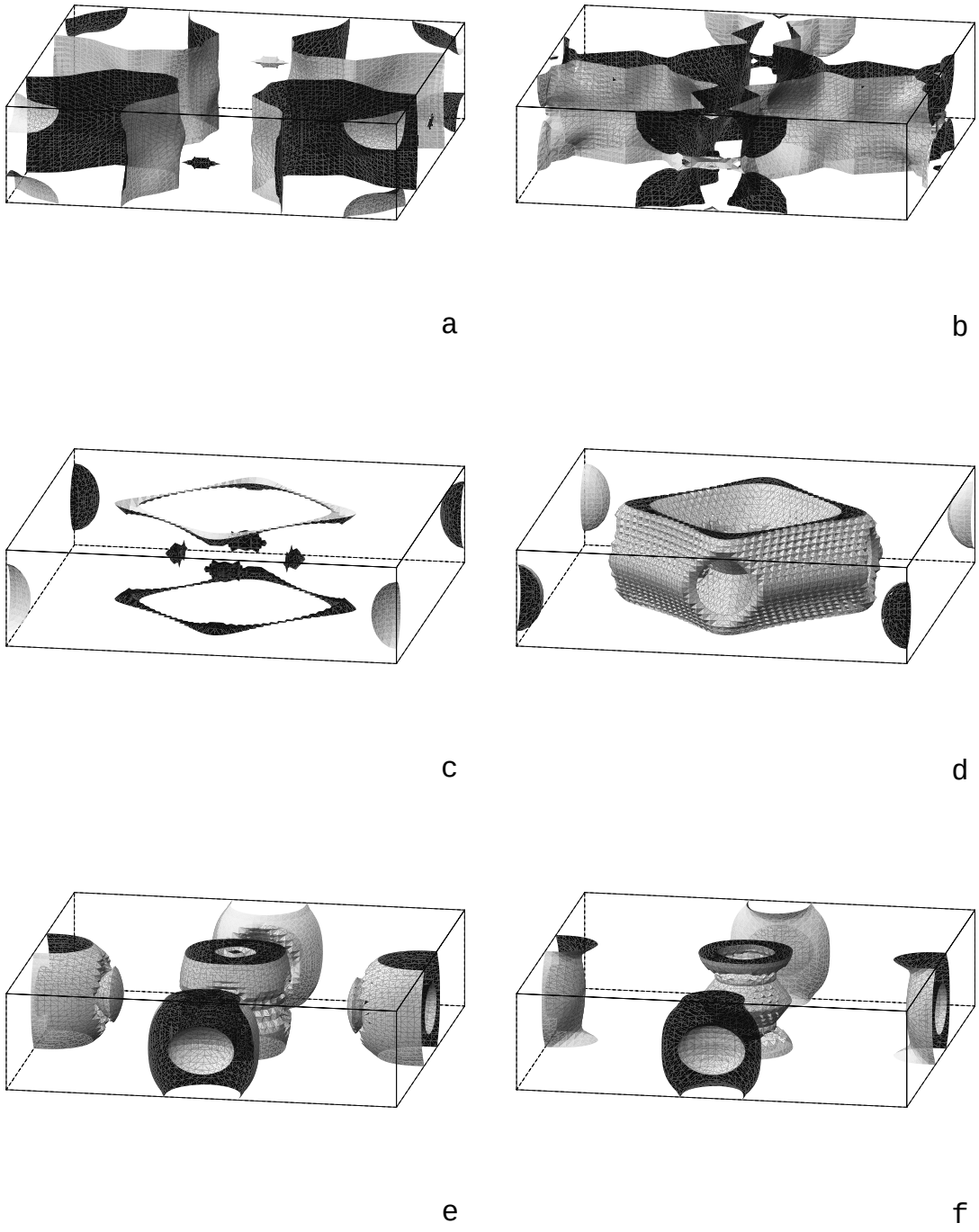


Abb. 32: FERMI-Fläche des Fe_3Cr_5-Schichtsystems (fm Konfiguration), Bänder : a) $30^{\uparrow}$, b) $31^{\uparrow}$, c) $23^{\downarrow}$, d) $24^{\downarrow}$, e) $25^{\downarrow}$, f) $26^{\downarrow}$,

C Atomare Einheiten

Naturkonstanten

PLANCKsches Wirkungsquantum	$\hbar$	=	$1,0545887 \cdot 10^{-34}\ Ws^2$
Permeabilitätskonstante	μ_0	=	$4\pi \cdot 10^{-7}\ Vs/Am$
Dielektrizitätskonstante	ϵ_0	=	$8,854187817 \cdot 10^{-12}\ As/Vm$
Vakuum-Lichtgeschwindigkeit	$c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$	=	$2,99792458 \cdot 10^{8}\ m/s$
Elektronenmasse	m	=	$9,1093897 \cdot 10^{-31}\ kg$
Elektronenladung	e	=	$-1,6021773 \cdot 10^{-19}\ As$
	$\epsilon = e/\sqrt{4\pi\epsilon_0}$	=	$-1,518907 \cdot 10^{14}\ \sqrt{Wsm}$
Feinstrukturkonstante	$\alpha = \epsilon^2/\hbar c$	=	$7,29735308 \cdot 10^{-3}\ =\ 1/137,04$

Atomare Einheiten im Hartree-System

Es wird zur Vereinfachung der Schreibung von Formeln und der Angabe von Werten folgende Konvention getroffen.

Energie	$E_0 = m\epsilon^4/\hbar^2$	=	$27,21\ eV$
		=	$4,3590 \cdot 10^{-18}\ Ws$
Länge	$a_0 = \hbar^2/m\epsilon^2$	=	$0,529177249 \cdot 10^{-10}\ m$
Zeit	$t_0 = \hbar^3/m\epsilon^4$	=	$2,419 \cdot 10^{-17}\ s$
Relaxationszeit	τ_0	=	$1,070635 \cdot 10^{-11}\ s\,at\%$
Zustandsdichte	$n_0 = m^2\epsilon^2/(2\pi)^3\hbar^4$	=	$6,2412 \cdot 10^{45}\ 1/Wsm^3$
		=	$1,48 \cdot 10^{-4}\ 1/eVa_0^3$
FERMI-Flächen-Integral	$\tilde{\sigma}_0 = e^2m^2\epsilon^6/(2\pi)^3\hbar^6$	=	$7,665657 \cdot 10^{22}\ 1/\Omega ms$
Geschwindigkeit	$v_0 = \epsilon^2/\hbar$	=	$2,188 \cdot 10^{6}\ m/s$