

Ab-initio BESCHREIBUNG
VON TRANSPORTKOEFFIZIENTEN
IN CO/CU-VIELFACHSCHICHTEN

DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat)

der

Naturwissenschaftlichen Fakultät II
Chemie, Physik und Mathematik

der

Martin-Luther-Universität
Halle-Wittenberg

vorgelegt von

Albert Lucas Hönemann

geboren am 30. April 1990 in Dinklage

Datum der Abgabe: 13. September 2021

Datum der öffentlichen Verteidigung: 23. März 2022

1. Gutachterin: Prof. Dr. Ingrid Mertig (*Betreuerin*)
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Halle (Saale)
2. Gutachter: Prof. Dr. Steffen Trimper
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Halle (Saale)
3. Gutachter: Prof. Dr. Tobias Kampfrath
Freie Universität Berlin
Berlin

Kurzzusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden der anomale Hall-Effekt, der Spin-Hall-Effekt, der Edelstein-Effekt, und der Spin-Orbit-Torque in ferromagnetisch/nichtmagnetischen-Vielfachschichten (Schichten bestehend aus abwechselnden ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schichten), mit substitutionellen Defekten untersucht. Die Beschreibung der elektronischen Struktur der ungestörten und gestörten ferromagnetisch/nichtmagnetischen-Vielfachschichten erfolgt im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie mithilfe einer vollrelativistischen *tight binding* Korringa-Kohn-Rostoker-Greenschen Funktionsmethode. Der elektronische Transport wird durch die linearisierte Boltzmann-Gleichung bestimmt.

Als Beispiel werden Co/Cu-Vielfachschichten sowohl mit Eigendefekten (Cu, Co) als auch mit Fremddefekten (Ir, Au, Bi) an verschiedenen Atompositionen innerhalb der Vielfachschichten betrachtet. Ferner werden Co/Cu-Vielfachschichten einerseits mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche und andererseits mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche behandelt. Insbesondere in Co/Cu-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche entsteht unter einem äußeren elektrischen Feld E parallel zur Co/Cu-Grenzfläche eine anomale Hall-Stromdichte und eine Spin-Hall-Stromdichte senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche. Im Vergleich mit den anomalen Hall-Winkeln und den Spin-Hall-Winkeln der zugrundeliegenden Volumensysteme (fcc-Cu, fcc-Co) sind die anomalen Hall-Winkel und Spin-Hall-Winkel in den Co/Cu-Vielfachschichten stark reduziert. Im Allgemeinen sind Defekte an Grenzflächenpositionen günstig für einen großen anomalen Hall-Winkel und Spin-Hall-Winkel. Durch Analyse der lokalen Beiträge sowohl der durch den Edelstein-Effekt induzierten Spin-Dichte als auch der lokalen Beiträge des Spin-Orbit-Torques kann der Spin-Orbit-Torque auf das Drehmoment zwischen der durch den Edelstein-Effekt induzierten Magnetisierungsdichte und der Magnetisierung zurückgeführt werden. Darüber hinaus zeigt sich, dass die Ausrichtung der vom Edelstein-Effekt induzierten Spin-Dichte von der Richtung der Magnetisierung abhängt.

Abstract

In this thesis, the anomalous Hall effect, the spin Hall effect, the Edelstein effect, and the spin orbit torque in ferromagnetic/nonmagnetic multilayers (layers consisting of alternating ferromagnetic and nonmagnetic layers) with substitutional impurities are considered. The description of the electronic structure of the unperturbed as well as of the perturbed ferromagnetic/nonmagnetic multilayers is based on density functional theory by means of a fully relativistic *tight binding* Korringa-Kohn-Rostoker-Green function method. The electronic transport is calculated using the linearized Boltzmann equation.

As an example, Co/Cu multilayers with intrinsic impurities (Cu, Co) as well as

extrinsic impurities (Ir, Au, Bi) delta-distributed in different atomic layers within the multilayers are considered. Furthermore, Co/Cu multilayers are taken into account with magnetization M perpendicular to the Co/Cu interface on the one hand and with magnetization M parallel to the Co/Cu interface on the other hand. In particular, Co/Cu multilayers with magnetization M parallel to the Co/Cu interface exhibit an anomalous Hall current as well as a spin Hall current perpendicular to the Co/Cu interface under an applied external electric field parallel to the Co/Cu interface. In comparison with the anomalous Hall angles and the spin Hall angles of the underlying bulk systems (fcc-Cu, fcc-Co), the anomalous Hall angles and spin Hall angles are significantly reduced in the Co/Cu multilayers. In general, impurities at the interface are beneficial for the anomalous Hall effect and spin Hall effect. By analyzing the local contributions of the Edelstein effect induced spin density and of the spin orbit torque, the spin orbit torque can be attributed to the torque between Edelstein effect induced magnetization density and the magnetization of the Co/Cu multilayers. Furthermore, the orientation of Edelstein effect induced spin density relies on the direction of the magnetization.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1.1. Einführung	1
1.2. Transportphänomene	5
1.2.1. Normaler Hall-Effekt und anomaler Hall-Effekt	5
1.2.2. Spin-Hall-Effekt	7
1.2.3. Edelstein-Effekt	7
1.2.4. Spin-Torque	8
1.2.4.1. Spin-Transfer-Torque	8
1.2.4.2. Spin-Orbit-Torque	9
1.2.4.2.1. Spin-Hall-Effekt induzierter Spin-Orbit-Torque	9
1.2.4.2.2. Edelstein-Effekt induzierter Spin-Orbit-Torque	9
2. Theoretische Grundlagen	11
2.1. Elektronische Struktur	11
2.1.1. Vielteilchensysteme und Born-Oppenheimer-Näherung	11
2.1.2. Dichtefunktionaltheorie	13
2.1.2.1. Nichtrelativistische Beschreibung	13
2.1.2.2. Relativistische Beschreibung	15
2.1.3. Korringa-Kohn-Rostoker Greensche Funktionsmethode	17
2.1.3.1. Die Greensche Funktion	17
2.1.3.2. Einfachstreuung	20
2.1.3.3. Vielfachstreuung	23
2.1.3.3.1. Greensche Funktion des Idealkristalls	23
2.1.3.3.2. Eigenfunktionen des Idealkristalls	28
2.1.3.3.3. Greensche Funktion des Defektsystems	29
2.1.3.3.4. Eigenfunktionen des Defektsystems	31
2.1.3.3.5. Screened KKR	31
2.1.3.4. Fermi-Fläche	32
2.1.3.5. Quantenmechanische Erwartungswerte	33
2.1.3.5.1. Elektrische Stromdichte	33
2.1.3.5.2. Spin-Dichte	35
2.1.3.5.3. Spin-Stromdichte	36
2.1.3.5.4. Spin-Orbit-Torque	37
2.1.3.6. Übergangswahrscheinlichkeit und Fermis Goldene Regel	38

Inhaltsverzeichnis

2.2. Elektronischer Transport	38
2.2.1. Semiklassische Beschreibung	39
2.2.1.1. Transportgrößen	42
2.2.1.1.1. Elektrische Leitfähigkeit	43
2.2.1.1.2. Spin-Leitfähigkeit	43
2.2.1.1.3. Edelstein-Tensor	44
2.2.1.1.4. Spin-Orbit-Torkance	44
2.2.1.2. Lineare Antwort bzgl. elektrischer Stromdichte	45
2.2.1.3. Beiträge der Basisatome zum Tensor	45
2.2.2. Mechanismen	46
2.2.3. Transformation von Transportkoeffizienten unter Raum inversion	48
3. Ergebnisse	51
3.1. Elektronische Struktur von Co/Cu-Vielfachschichten	51
3.1.1. Grundzustandseigenschaften	53
3.1.1.1. Lokale Zustandsdichten	53
3.1.1.2. Magnetische Momente	55
3.1.1.3. Zustände auf der Fermi-Fläche	57
3.2. Transporteigenschaften von Co/Cu-Vielfachschichten	58
3.2.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche	58
3.2.1.1. Tensor der elektrischen Leitfähigkeit	58
3.2.1.1.1. Longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ^L	58
3.2.1.1.1.1. Longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{xx}	59
3.2.1.1.1.2. Longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{zz}	65
3.2.1.1.2. Anomale Hall-Leitfähigkeit σ^{AHE}	68
3.2.1.1.2.1. Anomale Hall-Leitfähigkeit σ_{yx}^{AHE}	69
3.2.1.1.3. Anomaler Hall-Winkel α^{AHE}	74
3.2.1.1.3.1. Anomaler Hall-Winkel α_{yx}^{AHE}	74
3.2.1.1.4. Zusammenfassung	77
3.2.1.2. Tensor der Spin-Leitfähigkeit	79
3.2.1.2.1. Spin-Hall-Leitfähigkeit σ^{zSHE}	79
3.2.1.2.1.1. Spin-Hall-Leitfähigkeit σ_{yx}^{zSHE}	80
3.2.1.2.2. Spin-Hall-Winkel α^{zSHE}	82
3.2.1.2.2.1. Spin-Hall-Winkel α_{yx}^{zSHE}	82
3.2.1.2.3. Zusammenfassung	86
3.2.1.3. Edelstein-Tensor	88
3.2.1.3.1. Longitudinaler Edelstein-Effekt χ^L	89
3.2.1.3.1.1. Longitudinaler Edelstein-Effekt χ_{xx}	89
3.2.1.3.1.2. Longitudinaler Edelstein-Effekt χ_{zz}	91
3.2.1.3.2. Transversale Edelstein-Effekte χ^{T_1} und χ^{T_2}	93
3.2.1.3.2.1. Transversaler Edelstein-Effekt χ_{yx}	93
3.2.1.3.3. Zusammenfassung	97

3.2.1.4.	Spin-Orbit-Torkance	99
3.2.1.4.1.	Longitudinale Spin-Orbit-Torkance t^L	100
3.2.1.4.1.1.	Longitudinale Spin-Orbit-Torkance t_{xx}	100
3.2.1.4.2.	Transversale Spin-Orbit-Torkance t^{T1} und t^{T2}	102
3.2.1.4.2.1.	Transversale Spin-Orbit-Torkance t_{yx}	102
3.2.1.4.3.	Zusammenfassung	105
3.2.2.	Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche	105
3.2.2.1.	Tensor der elektrischen Leitfähigkeit	105
3.2.2.1.1.	Anomaler Hall-Winkel α^{AHE}	106
3.2.2.1.1.1.	Anomaler Hall-Winkel α_{zx}^{AHE}	106
3.2.2.1.1.2.	Anomaler Hall-Winkel α_{xz}^{AHE}	110
3.2.2.1.2.	Zusammenfassung	113
3.2.2.2.	Tensor der Spin-Leitfähigkeit	116
3.2.2.2.1.	Spin-Hall-Winkel α^{ySHE}	116
3.2.2.2.1.1.	Spin-Hall-Winkel α_{zx}^{ySHE}	117
3.2.2.2.1.2.	Spin-Hall-Winkel α_{xz}^{ySHE}	120
3.2.2.2.2.	Zusammenfassung	121
3.2.2.3.	Edelstein-Tensor	125
3.2.2.3.1.	Transversale Edelstein-Effekte χ^{T1} und χ^{T2}	125
3.2.2.3.1.1.	Transversale Edelstein-Effekte χ_{xy} und χ_{zy}	125
3.2.2.3.1.2.	Transversale Edelstein-Effekte χ_{yx} und χ_{yz}	129
3.2.2.3.2.	Zusammenfassung	134
3.2.2.4.	Spin-Orbit-Torkance	134
3.2.2.4.1.	Transversale Spin-Orbit-Torkance t^{T1} und t^{T2}	135
3.2.2.4.1.1.	Transversale Spin-Orbit-Torkance t_{xy} und t_{zy}	135
3.2.2.4.2.	Zusammenfassung	137
4.	Zusammenfassung	141
A.	Quantenmechanische Erwartungswerte in globalen und zellzentrierten Koordinaten	143
B.	Transversale elektrische Leitfähigkeit und transversale Spin-Leitfähigkeit	145
B.1.	Zusammenhang zwischen elektrischer Leitfähigkeit und Spin-Leitfähigkeit	145
B.2.	Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	146
B.2.1.	Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche	149
B.2.1.1.	Tensor der elektrischen Leitfähigkeit	149
B.2.1.1.1.	Transversale elektrische Leitfähigkeit	149
B.2.1.1.1.1.	σ_{xy} und σ_{yx}	149
B.2.1.2.	Tensor der Spin-Leitfähigkeit ($\gamma := z$)	150
B.2.1.2.1.	Transversale Spin-Leitfähigkeiten	150
B.2.1.2.1.1.	σ_{xy}^z und σ_{yx}^z	150

Inhaltsverzeichnis

B.2.2.	Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche	151
B.2.2.1.	Tensor der elektrischen Leitfähigkeit	151
B.2.2.1.1.	Transversale elektrische Leitfähigkeiten	151
B.2.2.1.1.1.	σ_{xz} und σ_{zx}	151
B.2.2.2.	Tensor der Spin-Leitfähigkeit ($\gamma := y$)	152
B.2.2.2.1.	Transversale Spin-Leitfähigkeiten	152
B.2.2.2.1.1.	σ_{xz}^y und σ_{zx}^y	152
C.	Makroskopische Größen im Gleichgewicht	153
D.	Transformationsverhalten der mittleren freien Weglänge	157
D.1.	Transformationsverhalten der mittleren freien Weglänge unter Rauminversion	157
D.2.	Transformationsverhalten der mittleren freien Weglänge unter Zeitumkehr	160
E.	Transformationsverhalten von Tensoren	167
E.1.	Transformationsverhalten von Tensoren unter Rauminversion	167
E.2.	Transformationsverhalten von Tensoren unter Zeitumkehr	168
F.	Grundzustandseigenschaften von fcc-Cu, fcc-Co, und Co/Cu-Vielfachschichten	177
F.1.	Lokale Zustandsdichten	177
F.1.1.	fcc-Cu und fcc-Co	177
F.1.2.	Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	178
F.1.2.1.	Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche	178
F.1.2.2.	Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche	178
F.2.	Magnetische Momente	179
F.2.1.	Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	179
F.2.1.1.	Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche	179
F.3.	Fermi-Flächen	179
F.3.1.	fcc-Cu und fcc-Co	179
F.3.2.	Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	180
F.3.2.1.	Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche	180
F.3.2.2.	Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche	180
F.4.	Fermi-Geschwindigkeiten	181
F.4.1.	Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	181
F.4.1.1.	Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche	181
F.4.1.2.	Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche	181
F.5.	Spin-Erwartungswert	182
F.5.1.	Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	182
F.5.1.1.	Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche	182
G.	Transporteigenschaften für beliebiges äußeres elektrisches Feld	183
G.1.	Longitudinale Transporteigenschaften	185

G.2. Transversale Transporteigenschaften	185
G.2.1. Transversales Tensorelement T_1	185
G.2.1.1. $(\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z) = (1, 0, 0)$	185
G.2.1.2. $(\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z) = (0, 1, 0)$	186
G.2.1.3. $(\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z) = (0, 0, 1)$	186
G.2.2. Transversales Tensorelement T_2	187
G.3. Effizienz einer Größe	188
G.4. Winkel zwischen einer vektoriellen Größe und einer beliebigen Richtung	189
H. Transportkoeffizienten in anisotroper Relaxationszeitsnäherung	191
H.1. Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	191
H.1.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche	191
H.1.1.1. Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$	191
H.1.1.1.1. Longitudinale elektrische Leitfähigkeit	191
H.1.1.1.1.1. σ_{xx}	191
H.1.1.1.1.2. σ_{zz}	192
H.1.1.1.2. Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$	192
H.1.1.1.2.1. Longitudinale Edelstein-Tensorelemente	192
H.1.1.1.2.1.1. χ_{xx}	192
H.1.1.1.2.1.2. χ_{zz}	193
H.1.1.1.2.2. Transversale Edelstein-Tensorelemente	193
H.1.1.1.2.2.1. χ_{yx}	193
H.1.1.1.3. Spin-Orbit-Torkance \hat{t}	194
H.1.1.1.3.1. Longitudinale Spin-Orbit-Torkance	194
H.1.1.1.3.1.1. t_{xx}	194
H.1.1.1.3.2. Transversale Spin-Orbit-Torkance	194
H.1.1.1.3.2.1. t_{yx}	194
I. Güte des Edelstein-Tensors und der Spin-Orbit-Torkance	195
I.1. Problembeschreibung	195
I.2. Äquivalente Darstellung des Tensor \hat{a}	197
I.3. Numerische Fehler bei der Bestimmung von \hat{a}	197
I.4. Ursachen des numerischen Fehlers der mittleren freien Weglänge	198
I.5. Größenordnung des numerischen Fehlers der mittleren freien Weglänge	199
I.6. Einfluss des numerischen Fehler der mittleren freien Weglänge auf die	
Tensorelemente	202
I.6.1. $\eta_0 \in \{5, 13\}$	204
I.6.1.1. $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = -1$	204
I.6.1.2. $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = +1$	204
I.6.2. $\eta_0 \notin \{5, 13\}$	205
I.6.2.1. $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = -1$	205
I.6.2.2. $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = +1$	205

Inhaltsverzeichnis

I.7.	Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	207
I.7.1.	Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche	207
I.7.1.1.	Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$	207
I.7.1.2.	Spin-Orbit-Torkance \hat{t}	208
I.7.2.	Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche	209
I.7.2.1.	Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$	209
I.7.2.2.	Spin-Orbit-Torkance \hat{t}	210
J.	Zerlegung der Transportkoeffizienten	211
J.1.	Beiträge der ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schicht	211
J.2.	Beiträge der verschiedenen Klassen an Zuständen	211
J.3.	Beiträge der Majoritätselektronen und Minoritätselektronen	212
J.4.	Beiträge des symmetrischen und antisymmetrischen Beitrages	212
J.5.	Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	214
J.5.1.	Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche	214
J.5.1.1.	Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$	214
J.5.1.1.1.	Anomale Hall-Leitfähigkeit	214
J.5.1.1.1.1.	σ_{yx}^{AHE}	214
J.5.1.2.	Spin-Orbit-Torkance	215
J.5.1.2.1.	Longitudinale Spin-Orbit-Torkance	215
J.5.1.2.1.1.	t_{xx}	215
J.5.1.2.2.	Transversale Spin-Orbit-Torkance	216
J.5.1.2.2.1.	t_{yx}	216
J.6.	Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche	217
J.6.1.	Elektrische Leitfähigkeit	217
J.6.1.1.	Longitudinale elektrische Leitfähigkeit	217
J.6.1.1.1.	σ_{zz}	217
J.6.1.2.	Anomale Hall-Leitfähigkeit	217
J.6.1.2.1.	σ_{zx}^{AHE}	217
J.6.2.	Spin-Leitfähigkeit $\gamma := y$	218
J.6.2.1.	Spin-Hall-Leitfähigkeit	218
J.6.2.1.1.	$\sigma_{zx}^{\gamma\text{SHE}}$	218
J.6.3.	Spin-Orbit-Torkance	219
J.6.3.1.	Transversale Spin-Orbit-Torkance	219
J.6.3.1.1.	t_{xy}	219
J.6.3.1.2.	t_{zy}	219
K.	Bestimmung der Fermi-Fläche mittels Tetraedermethode	221
L.	Parameter in den numerischen Rechnungen	225
L.1.	Grundzustandseigenschaften von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	225
L.1.1.	Potential	225
L.1.2.	Lokale Zustandsdichten	225
L.1.3.	Greensche Funktion	226

Inhaltsverzeichnis

L.1.4. Fermi-Fläche	226
L.2. Eigenschaften der gestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten	227
M. Literatur	229
N. Eigene Veröffentlichungen	243
O. Danksagung	245
P. Eidesstattliche Erklärung	247
Q. Lebenslauf	249

1. Einleitung

Eine Schwierigkeit hört auf, eine solche zu sein, sobald ihr darüber lächelt und sie in Angriff nehmt.

Sir Robert Baden-Powell, Lord of Gilwell, Gründer der Weltpfadfinderbewegung

1.1. Einführung

Die Spintronik, zusammengesetzt aus „Spin“ und „Elektronik“, bietet neue Möglichkeiten den Spin, neben der elektrischen Ladung des Elektrons einen weiteren intrinsischen Freiheitsgrad des Elektrons, zu nutzen [1–4]. Prominentes Beispiel für die Spintronik bildet der Riesenmagnetowiderstand (engl. *giant magnetoresistance* (GMR)), für dessen Entdeckung Albert Fert [5] und Peter Grünberg [6] im Jahr 2008 den Nobelpreis für Physik [7, 8] erhalten haben. Der Riesenmagnetowiderstand tritt in Vielfachschichten mit abwechselnden magnetischen und nichtmagnetischen elektrisch leitenden Schichten auf, wobei die Magnetisierung in benachbarten magnetischen Schichten entweder parallel oder antiparallel ausgerichtet sein kann. Es zeigt sich, dass der elektrische Widerstand in der antiparallelen Anordnung um mehrere Größenordnungen größer als in der parallelen Anordnung ist. Durch den Unterschied in den Widerständen lassen sich Informationen in Form von Bits, d.h. in binärer Darstellung mit „0“ für die parallele Anordnung mit geringem Widerstand und „1“ für die antiparallele Anordnung mit hohem Widerstand, darstellen und speichern. Abb. 1.1.1 (a) stellt schematisch den Aufbau eines einzelnen Bit dar. Hierbei bildet eine magnetische Schicht die Referenzschicht (FM_R), dessen Magnetisierungsrichtung fixiert ist, die angrenzende Schicht ist die freie Schicht (FM_F), deren Magnetisierung sich entweder parallel oder antiparallel zur Magnetisierung der Referenzschicht orientieren kann. Getrennt sind beide durch eine nichtmagnetische Schicht (NM). Neben dem Speichern von Informationen ist es notwendig Informationen zu lesen und zu schreiben, wobei das Lesen idealerweise ohne Veränderung des Speicherzustandes erfolgen sollte. Das Schreiben bezeichnet hierbei die gezielte Veränderung der parallelen zur antiparallelen Anordnung bzw. umgekehrt. Das Schreiben kann durch ein kurzzeitiges äußeres magnetisches Feld H realisiert werden. Hierbei wird die Magnetisierung der freien Schicht gedreht, sodass zwischen den beiden Zuständen „0“ und „1“ geschaltet werden kann. Nachteilig ist hierbei, dass das magnetische Feld eine gewisse Ausdehnung hat und somit benachbarte Bits ebenfalls manipulieren kann. Eine lokale, d.h. auf einen Bit beschränkte Möglichkeit den Zustand des Bits zu verändern, kann durch den Spin-Transfer-Torque realisiert werden. Dieser wurde im Jahr 1996 von Slonczewski [9] und Berger [10] unabhängig voneinander vorgeschlagen. Wie in Abb. 1.1.1 (a) illustriert, fließt hierbei ein elektrischer Strom senkrecht

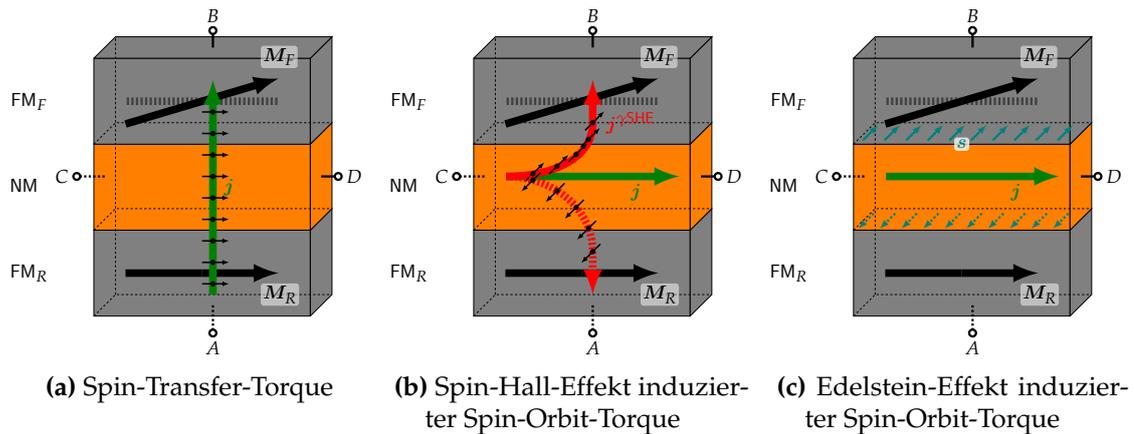


Abbildung 1.1.1: (a), (b), und (c) stellen skizzenhaft die Ideen hinter dem Spin-Transfer-Torque, dem Spin-Hall-Effekt induzierten Spin-Orbit-Torque, und dem Edelstein-Effekt induzierten Spin-Orbit-Torque dar. Die Probe besteht aus zwei ferromagnetischen metallischen Schichten (FM_R und FM_F), die durch eine nichtmagnetische metallische Schicht (NM) getrennt sind. Die Magnetisierung der unteren ferromagnetischen Schicht, die ferromagnetische Referenzschicht, sei fixiert, während die Magnetisierung der oberen ferromagnetischen Schicht, die freie Schicht, variabel sei. Zum Lesen des Zustandes („1“ $\hat{=} M_R \uparrow \downarrow M_F$ oder „0“ $\hat{=} M_R \uparrow \uparrow M_F$) wird in (a), (b), und (c) der Widerstand zwischen A und B gemessen. Für Details sei auf den Text verwiesen.

zur Grenzfläche, der durch die erste Schicht spin-polarisiert wird. Der spin-polarisierte Strom bzw. die ihn tragenden Elektronen übertragen ihren Spin in der freien Schicht auf die Magnetisierung und ermöglichen bei hinreichender Stärke der elektrischen Stromdichte die Umkehr der Magnetisierung [11, 12]. Da weniger die Ladung des Elektrons als der Spin des Elektrons für den Spin-Transfer-Torque wesentlich ist, stellt sich die Frage, ob es möglich ist, Spin-Ströme ohne begleitenden Ladungsstrom zu generieren. Eine Möglichkeit Spin-Ströme ohne begleitenden Ladungsstrom zu erzeugen bildet der Spin-Hall-Effekt (SHE) in nichtmagnetischen Systemen [13]. Hierbei wird ein longitudinaler elektrischer Strom in einen transversalen Spin-Strom umgewandelt. Ähnlich zum Spin-Hall-Effekt ist der anomale Hall-Effekt (AHE) [14–16], dargestellt in Abb. 1.1.2 (a), der in magnetischen Systemen auftritt. Hierbei erzeugt ein longitudinaler elektrischer Strom einen transversalen elektrischen Strom. In magnetischen Systemen tritt der Spin-Hall-Effekt ebenfalls auf, dargestellt in Abb. 1.1.2 (b), wobei der durch den Spin-Hall-Effekt hervorgerufene Spin-Strom im Allgemeinen durch einen Ladungsstrom, erzeugt durch den anomalen Hall-Effekt, begleitet wird. Weitere Effekte bilden der Edelstein-Effekt in Abb. 1.1.2 (c) und der Spin-Orbit-Torque in Abb. 1.1.2 (d). Ersterer wurde erstmalig unabhängig von Aronov und Lyanda-Geller [17] im Jahr 1989 bzw. von Edelstein [18] im Jahr 1990 beschrieben. Hierbei erzeugt ein äußeres elektrisches Feld eine Spin-Dichte. Die Idee des Spin-Orbit-Torques wurde von Manchon und Zhang im Jahr 2008 [19, 20]

vorgeschlagen, in dem durch ein äußeres elektrisches Feld ein Drehmoment auf die Magnetisierung erzeugt wird [21, 22]. Die Grundlage dieser Effekte bildet die Spin-Bahn-Wechselwirkung (engl. *spin-orbit interaction* (SOI)) bildet, sodass dieses Forschungsgebiet unter dem Begriff „Spin-Orbitronik“ („Spin-Orbit“ und „Elektronik“) zusammengefasst wird. Sowohl mit dem Spin-Hall-Effekt als auch mit dem Edelstein-Effekt ist es möglich die Magnetisierung der freien ferromagnetischen Schicht zu manipulieren.

Während der anomale Hall-Effekt direkt als elektrische Spannung messbar ist [23, 24], ist der Spin-Hall-Effekt schwieriger direkt zu beobachten. Eine Möglichkeit den Spin-Hall-Effekt eines metallischen Materials zu bestimmen, ist unter Verwendung des Spin-Pumpens (engl. *spin pumping*) [25, 26] zur Generierung von Spin-Strömen und unter Verwendung des inversen Spin-Hall-Effektes [27–30]. Hierzu betrachtet man eine ferromagnetisch/nichtmagnetische-Schicht. Die Magnetisierung der ferromagnetischen Schicht präzediert durch ein äußeres magnetisches Wechselfeld um die Richtung eines statischen magnetischen Feldes, wobei ein Spin-Strom in das angrenzende nichtmagnetische Material gepumpt wird. In diesem wird der Spin-Strom über den inversen Spin-Hall-Effekt in einen hierzu transversalen elektrischen Strom umgewandelt. Die daraufhin sich einstellende elektrische Spannung kann gemessen werden und daraus der Spin-Hall-Effekt der nichtmagnetischen Schicht bestimmt werden [28, 30, 31]. Umgekehrt kann die Veränderung der Magnetisierungsdynamik in einem ferromagnetischen Material durch den Spin-Hall-Effekt einer angrenzenden nichtmagnetischen Schicht untersucht werden. Hierbei wird ein elektrisches Wechselfeld parallel zur Grenzfläche angelegt und durch den Spin-Hall-Effekt in der nichtmagnetischen Schicht fließt ein Spin-Strom senkrecht zur Grenzfläche in die ferromagnetische Schicht und beeinflusst durch den Übertrag von Drehimpuls auf die Magnetisierung deren Dynamik [32, 33].

Wie entgegengesetzt und abhängig vom experimentellen Aufbau die experimentell bestimmten Spin-Hall-Winkel, dem Verhältnis von transversaler Spin-Stromdichte zu longitudinaler elektrischer Stromdichte, für Materialien sein können [13, 34], sei am Beispiel von Gold demonstriert. Der Spin-Hall-Winkel für Gold wurde von Wang *et al.* mittels inversen Spin-Hall-Effekt an YIG/Au-Schichten zu 0.084 bestimmt [31], während Seki *et al.* in FePt/Au-Schichten 2008 einen Spin-Hall-Winkel von 0.113 für Gold angaben [35]. Mihajlović *et al.* gaben 2009 hingegen 0.023 als obere Grenze für den Spin-Hall-Winkel in Gold an [36]. Systematische Untersuchungen von Chen *et al.* 2019 zeigten, dass der Spin-Hall-Winkel abhängig von der Schichtdicke der Gold-Schicht ist, und konnten die scheinbar widersprüchlichen Beobachtungen von Seki *et al.* und Mihajlović *et al.* erklären [37]. Während Seki *et al.* eine Schichtdicke von 10 nm für Gold wählten, verwendeten Mihajlović *et al.* eine Schichtdicke von 60 nm für die Gold-Schicht. Die Bedeutung von Schichtdicken wurden auch von Skinner *et al.* in Co/Pt sowohl für den Spin-Hall-Effekt als auch für den Spin-Orbit-Torque hervorgehoben [38–40]. Neben dem Einfluss der Abmessungen der Probe, wurde insbesondere die Bedeutung von Grenzflächen [41] für spintronische Effekte von Wang *et al.* am Beispiel einer Py/Pt-Schicht demonstriert [42]. Amin *et al.* präsentierten 2016 eine Theorie des Spin-Transport an Grenzflächen mit Spin-Bahn-Wechselwirkung [43, 44]. Insbesondere zeigten sie, dass in ferromagnetisch/nichtmagnetischen-Schichten elektrische Felder parallel zur Grenz-

fläche Spin-Ströme beliebiger Polarisation erzeugen können [43–45]. Im Vergleich zu Gold besitzt Kupfer eine relative schwache Spin-Bahn-Wechselwirkung [31] und somit einen geringen Spin-Hall-Effekt. Eine Möglichkeit gezielt den Spin-Hall-Effekt zu vergrößern, ist durch das Einbringen von schweren Defekten wie Bi und Ir möglich [46–49]. Ursächlich für den Spin-Hall-Effekt ist hierbei die Streuung der Leitungselektronen an Defekten.

Die bisherigen theoretischen Betrachtungen betrachten oftmals Volumensysteme, in denen weder die Abhängigkeit von der Abmessungen der zu untersuchenden Probe noch der Einfluss von Grenz- und Oberflächen berücksichtigt werden kann [48, 50–54]. Eine umfassende theoretische Beschreibung, die dem realen Experiment näher kommt, sollte daher unter anderem den Einfluss von Magnetismus [21], Spin-Bahn-Wechselwirkung [13], Grenzflächen [41] und Defekten [55, 56] berücksichtigen. Hierzu werden in dieser hier vorliegenden Arbeit neben dem anomalen Hall-Effekt und dem Spin-Hall-Effekt ferner der Edelstein-Effekt und der Spin-Orbit-Torque in ferromagnetisch/nichtmagnetischen-Vielfachschichten am Beispiel von Co/Cu-Vielfachschichten untersucht.

Im folgenden Abschnitt werden der anomale Hall-Effekt, der Spin-Hall-Effekt, der Edelstein-Effekt, und der Spin-Orbit-Torque qualitativ eingeführt und schließen die Einleitung der vorliegenden Arbeit ab. Als exemplarisches Beispiel für nichtmagnetisch/ferromagnetische Vielfachschichten werden Co/Cu-Vielfachschichten betrachtet. Hierbei werden zwei Orientierungen der Magnetisierung \mathbf{M} mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche bzw. mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche betrachtet. Als Defekte werden sowohl Eigendefekte als auch Fremddefekte untersucht. Die theoretischen Grundlagen sowohl zur Beschreibung der elektronischen Struktur der ungestörten als auch der gestörten Systeme als auch zur Beschreibung des elektronischen Transports werden in Kapitel 2 behandelt. Die elektronische Struktur wird hierbei im Rahmen der relativistischen Dichtefunktionaltheorie [57, 58] unter Verwendung der Greenschen Funktionsmethode nach Korringa [59], Kohn und Rostoker [60] beschrieben. Die semiklassische Boltzmann-Gleichung bildet die Grundlage für den elektronischen Transport [51, 61, 62]. Nach einer kurzen Darstellung der Grundzustandseigenschaften der Co/Cu-Vielfachschichten für beide Orientierungen der Magnetisierung in Abschnitt 3.1 werden in Abschnitt 3.2.1 die Ergebnisse für den anomalen Hall-Effekt, den Spin-Hall-Effekt, den Edelstein-Effekt, und den Spin-Orbit-Torque für Co/Cu-Vielfachschichten für Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) betrachtet. Besonderes Augenmerk fällt hierbei der Abhängigkeit der entsprechenden Größen von der Defektposition innerhalb der Co/Cu-Vielfachschichten zu. Im Folgenden werden in Abschnitt 3.2.2 entsprechende Größen in Co/Cu-Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) betrachtet und mit den Größen in Co/Cu-Vielfachschichten für Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) verglichen. Eine Zusammenfassung in Kapitel 4 schließt die Arbeit ab.

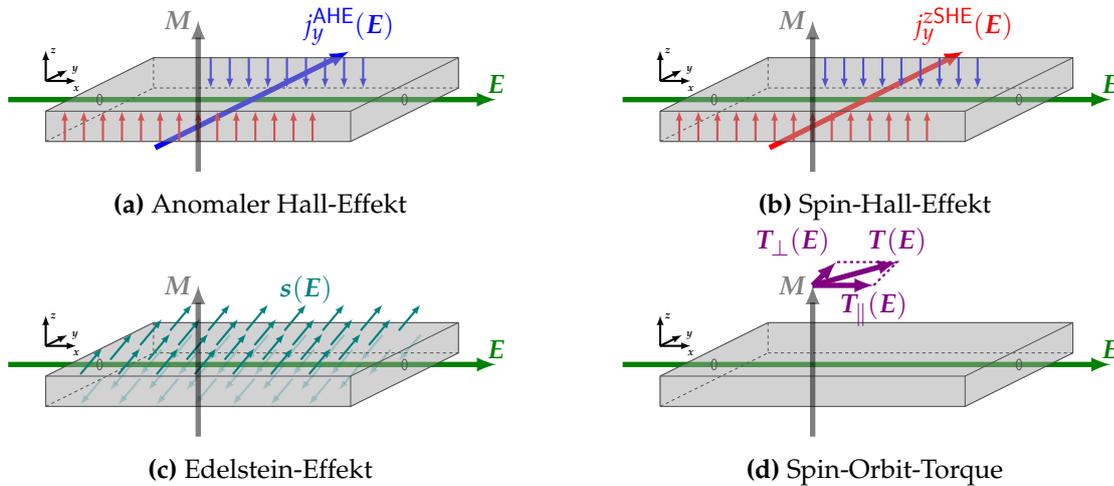


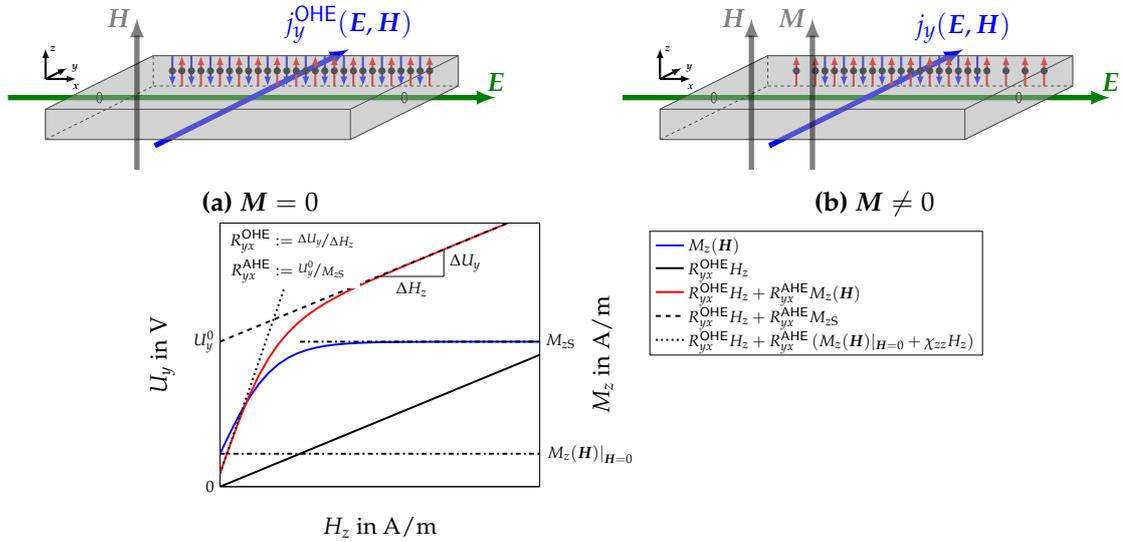
Abbildung 1.1.2.: Schematische Darstellung des (a) anomalen Hall-Effekts, des (b) Spin-Hall-Effekts, des (c) Edelstein-Effekts, und des (d) Spin-Orbit-Torques in magnetischen Systemen mit Magnetisierung M in z -Richtung. Das äußere elektrische Feld E sei in x -Richtung orientiert.

1.2. Transportphänomene

1.2.1. Normaler Hall-Effekt und anomaler Hall-Effekt

Die Proben in Abb. 1.2.1 (a) und 1.2.1 (b) seien ein nichtmagnetischer elektrischer Leiter ($\widehat{M} = 0$) und ein magnetischer elektrischer Leiter ($\widehat{M} \neq 0$), wobei die Magnetisierung in z -Richtung zeige. In beiden Fällen sei ein äußeres elektrisches Feld E in x -Richtung und ein äußeres magnetisches Feld H in z -Richtung orientiert. Betrachtet man zunächst den nichtmagnetischen elektrischen Leiter in Abb. 1.2.1 (a). Die Elektronen werden im äußeren elektrischen Feld in $-x$ -Richtung beschleunigt und durch die Lorentz-Kraft $F_B = qv \times B(H) = -ev \times B(H)$ aus ihrer ursprünglichen geradlinigen Bewegung in $-x$ -Richtung in y -Richtung abgelenkt. Hierbei ist $q := -e$ die elektrische Ladung des Elektrons mit $e > 0$, v die Geschwindigkeit des Elektrons, und B die magnetische Flussdichte. Zwischen der magnetischen Feldstärke H und der magnetischen Flussdichte B gilt im einfachsten Fall ein linearer Zusammenhang der Form $B(H) = \mu_0 \mu H$, wobei μ_0 und μ die Permeabilität des Vakuums bzw. die materialspezifische relative Permeabilität bezeichnen.

Besteht ein elektrischer Kontakt zwischen den Rändern der Probe bei $y < 0$ und $y > 0$, so fließt ein elektrischer Strom in y -Richtung j_y^{OHE} , d.h. senkrecht zum äußeren elektrischen Feld. Falls ein offener Stromkreis vorliegt, entsteht ein Überschuss an Elektronen am Rand der Probe bei $y > 0$, sodass sich eine Potentialdifferenz, die Hall-Spannung U_y , senkrecht zum äußeren elektrischen Feld ausbildet. Das Auftreten eines transversalen Stromes bzw. einer transversalen Spannung wird normaler Hall-Effekt



(c) Abhängigkeit der Hall-Spannung $U_y(H)$ für (a) und (b) von H_z inklusive der asymptotischen Verhalten für $H_z \ll H_S$ (\dots) und $H_z \gg H_S$ ($- - -$) sowie Magnetisierung $M_z(H)$

Abbildung 1.2.1.: Schematische Darstellung des (a) normalen Hall-Effektes in einer nichtmagnetischen Probe und der (b) Überlagerung von normalen und anomalen Hall-Effekt in einer magnetischen Probe. Das äußere magnetische Feld H sei in z -Richtung orientiert, das äußere elektrische Feld E in x -Richtung, sodass die Hall-Spannung in y -Richtung beobachtet werden kann. In (c) ist die Abhängigkeit der Hall-Spannung U_y und der Magnetisierung M von einem äußeren magnetischen Feld H für (a) und (b) dargestellt. Die Graphen $(H_z, U_y(H_z))$ für eine nichtmagnetische und für eine magnetische Probe sind in schwarz bzw. rot dargestellt. Die Magnetisierung in Abhängigkeit vom magnetischen Feld ist in blau dargestellt. Hierbei kennzeichnet M_{zS} die Sättigungsmagnetisierung der magnetischen Probe in z -Richtung.

(engl. *ordinary Hall effect* (OHE)) [23, 63, 64] genannt. Zwischen der Hall-Spannung U_y und der z -Komponente der magnetischen Feldstärke H gilt ein linearer Zusammenhang der Form

$$U_y(\mathbf{H}) = R_{yx}^{\text{OHE}} H_z, \quad (1.1)$$

wie er in Abb. 1.2.1 (c) in schwarz dargestellt ist. Hierbei bezeichnet R_{yx}^{OHE} die normale Hall-Konstante. Während für nichtmagnetische Proben ein linearer Zusammenhang zwischen Hall-Spannung und äußerer magnetischer Feldstärke besteht, beobachtet man in magnetischen Systemen einen nichtlinearen Zusammenhang zwischen Hall-Spannung U_y und äußerem magnetischen Feld H_z . Die Hall-Spannung setzt sich additiv aus zwei Beiträgen entsprechend

$$U_y(\mathbf{H}) = R_{yx}^{\text{OHE}} H_z + R_{yx}^{\text{AHE}} M_z(\mathbf{H}) \quad (1.2)$$

zusammen, wobei der erste Beitrag vom normalen Hall-Effekt stammt, während der zweite Beitrag den anomalen Hall-Effekt (engl. *anomalous Hall effect* (AHE)) [24, 65] beschreibt. Entsprechend ist R_{yx}^{AHE} die anomale Hall-Konstante. Da die Magnetisierung \mathbf{M} in magnetischen Systemen im Allgemeinen nichtlinear vom äußeren magnetischen Feld abhängt, überträgt sich dieses auf den Beitrag zur Hall-Spannung. Sei H_S die magnetische Sättigungsfeldstärke. Für die Grenzfälle $H_z \ll H_S$ und $H_z \gg H_S$ gelten $M_z(\mathbf{H}) \approx M_z(\mathbf{H})|_{H=0} + \chi_{zz}H_z$ bzw. $M_z(\mathbf{H}) \approx M_{zS}$, wobei $\chi_{zz} := \left. \frac{\partial M_z(\mathbf{H})}{\partial H_z} \right|_{H=0}$ die lineare magnetische Suszeptibilität bezeichnet. Somit kann Gleichung (1.2) in den Grenzfällen $H_z \ll H_S$ und $H_z \gg H_S$ durch

$$U_y(\mathbf{H}) \approx \begin{cases} R_{yx}^{\text{OHE}}H_z + R_{yx}^{\text{AHE}}(M_z(\mathbf{H})|_{H=0} + \chi_{zz}H_z) & \text{für } H_z \ll H_S \\ R_{yx}^{\text{OHE}}H_z + R_{yx}^{\text{AHE}}M_{zS} & \text{für } H_z \gg H_S \end{cases} \quad (1.3)$$

bzgl. des magnetischen Feldes H_z linearisiert werden. Durch Anpassen einer linearen Funktion an die Messkurve im Bereich $H_z \gg H_S$ lassen sich die normale Hall-Konstante R_{yx}^{OHE} und die anomale Hall-Konstante R_{yx}^{AHE} bestimmen.

Erst mehr als 70 Jahre nach seiner Entdeckung konnten Karplus und Luttinger [66] und Smit [67, 68] eine Beschreibung der mikroskopischen Ursachen für den anomalen Hall-Effekt geben. Ferner hat sich in der gegenwärtigen Forschung die Unterteilung in einen intrinsischen und extrinsische Beiträge [13] etabliert. Der intrinsische Beitrag [66] wird hierbei ausschließlich durch die Eigenschaften des Idealkristalls bestimmt. Extrinsische Beiträge berücksichtigen die Streuung von Leitungselektronen an Störstellen. Bei der Elektron-Defekt-Streuung wird zwischen dem Beitrag vom *skew scattering*-Mechanismus [67, 68] und dem Beitrag des *side jump*-Mechanismus [69–71] unterschieden. Näheres zum *skew scattering*- und zum *side jump*-Mechanismus findet sich in Abschnitt 2.2.2.

1.2.2. Spin-Hall-Effekt

Der Spin-Hall-Effekt beschreibt, wie in Abb. 1.1.2 (b) dargestellt, das Auftreten eines transversalen Spin-Stroms unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes. Obwohl dessen theoretische Beschreibung bereits 1965 von Mott und Massey [72] bzw. Landau und Lifschitz [73], und 1971 von Dyakonov und Perel [74, 75] gegeben wurde, rückte dieser erst 1999 durch eine Beschreibung eines experimentellen Aufbaus von Hirsch [76] und der experimentellen Beobachtung von Kato et al. [77] in den Mittelpunkt der Forschung. Ursprünglich wurde der Spin-Hall-Effekt nur in nichtmagnetischen Systemen diskutiert [13, 48, 49, 51, 78, 79], jedoch tritt dieser in magnetischen Systemen gleichermaßen auf. Insbesondere können in magnetischen Systemen Spin-Hall-Effekt und anomaler Hall-Effekt zusammen beobachtet werden. Siehe hierzu [62, 80] sowie [H3, H4]. Letzterer verschwindet in nichtmagnetischen Systemen.

1.2.3. Edelstein-Effekt

Der Edelstein-Effekt, auch als Rashba-Edelstein-Effekt oder inverser spin-galvanischer Effekt [22] bezeichnet, beschreibt, wie in Abb. 1.1.2 (c) dargestellt, das Auftreten einer

Nichtgleichgewichts-Spin-Dichte s als Antwort auf ein äußeres elektrisches Feld E . Voraussetzung für das Auftreten einer makroskopischen Nichtgleichgewichts-Spin-Dichte ist neben der Spin-Bahn-Wechselwirkung gebrochene Rauminversionssymmetrie. Zunächst nur in nichtmagnetischen Systemen betrachtet z. B. in Rashba-Systemen [81–84], tritt dieser ebenfalls in magnetischen Systemen auf [53, 85]. Insbesondere hier entstehen durch die Wechselwirkung der induzierten Spin-Dichte mit der Magnetisierung neue Effekte wie der Spin-Orbit-Torque.

1.2.4. Spin-Torque

In isotropen Festkörpern ist in niedrigster Ordnung bzgl. der Magnetisierung das Drehmoment auf die Magnetisierung M_F durch

$$T(E) = t_{\text{FL}}^{\text{P}}(\widehat{M})\widehat{M} \times \widehat{P}(E) + t_{\text{DL}}^{\text{P}}(\widehat{M})\widehat{M} \times (\widehat{M} \times \widehat{P}(E)) \quad (1.4)$$

gegeben, wobei der Vektor $P(E)$ vom zugrundeliegenden Mechanismus, d.h. Spin-Transfer-Torque, Spin-Hall-Effekt induzierter Spin-Orbit-Torque, Edelstein-Effekt induzierter Spin-Orbit-Torque, usw. abhängt [21, 86]. Hierbei stellt \widehat{M} den Einheitsvektor der Magnetisierung $\widehat{M} = M/M$ dar. Entsprechendes gilt für \widehat{P} . Die Koeffizienten t_{FL}^{P} und t_{DL}^{P} , die die Größe des Drehmomentes beschreiben, hängen einerseits von dem zugrundeliegenden Mechanismus ab und andererseits von der Richtung der Magnetisierung [21]. Der erste Summand hat die Struktur wie der Präzessionsterm oder Feldterm in der Landau-Lifschitz-Gilbert-Gleichung und wird als *field-like term* bezeichnet, während der zweite Summand die Struktur des Dämpfungstermes besitzt und *damping-like term* genannt wird [21]. Die Geometrien für den Spin-Transfer-Torque, für den Spin-Hall-Effekt induzierten Spin-Orbit-Torque, und dem Edelstein-Effekt induzierten Spin-Orbit-Torque sind in Abb. 1.1.1 dargestellt.

1.2.4.1. Spin-Transfer-Torque

Die Idee des Spin-Transfer-Torque ist in Abb. 1.1.1 (a) skizziert. Hierbei fließt senkrecht zur Grenzfläche zwischen den Kontakten A und B ein elektrischer Strom, der durch die ferromagnetische Referenzschicht (FM_R) spin-polarisiert wird. Ist der Elektronenspin bzw. das zugehörige magnetische Moment nicht parallel zur Magnetisierung der freien Schicht M_F ausgerichtet, so wird Drehimpuls vom Elektronenspin auf die Magnetisierung M_F übertragen. Beim Spin-Transfer-Torque ist $\widehat{P}(E)$ in Gleichung (1.4) mit

$$\widehat{P}(E) := \widehat{M}_R \quad (1.5)$$

durch die Magnetisierung der ferromagnetischen Referenzschicht gegeben [11, 12].

1.2.4.2. Spin-Orbit-Torque

1.2.4.2.1 Spin-Hall-Effekt induzierter Spin-Orbit-Torque

Ausgehend von der Idee des Spin-Transfer-Torques kann ein Spin-Strom Drehmoment auf die Magnetisierung übertragen und ist in Abb. 1.1.1 (b) skizziert. Hierbei fließt der elektrische Strom j parallel zur Grenzfläche zwischen den Kontakten C und D . Durch den Spin-Hall-Effekt wird in der nichtmagnetischen Schicht ein zum elektrischen Strom transversaler Spin-Strom $j^{\gamma\text{SHE}}$ erzeugt. Dieser dringt in die freie ferromagnetische Schicht FM_F ein, wobei sich die zum Elektronenspin zugehörigen magnetischen Momente entlang der Magnetisierung ausrichten, Drehimpuls auf diese übertragen, und somit ein Drehmoment auf die Magnetisierung ausüben. Der zugehörige Vektor $P(E)$ ist hierbei durch

$$P(E) := \sum_{\gamma} \frac{\hbar}{2e} \frac{1}{d_{\text{FM}_F}} \hat{\gamma} j_{\alpha}^{\gamma\text{SHE}}(E) \quad (1.6)$$

gegeben [21], wobei α die Bewegungsrichtung des transversalen Spin-Stroms beschreibt. d_{FM_F} stellt die Dicke der freien ferromagnetischen Schicht FM_F dar. Die Koeffizienten t_{FL}^{P} und t_{DL}^{P} sind in diesem Fall durch $P(E) = |P(E)|$ gegeben. Überdies bietet der Spin-Hall-Effekt induzierte Spin-Orbit-Torque zusammen mit der ferromagnetischen Resonanz die Möglichkeit den Spin-Hall-Winkel zu bestimmen [32, 33, 87].

1.2.4.2.2 Edelstein-Effekt induzierter Spin-Orbit-Torque

Beim Edelstein-Effekt als Ursache, dargestellt in Abb. 1.1.1 (c), geht man davon aus, dass durch das äußere elektrische Feld durch den Edelstein-Effekt eine Nichtgleichgewichts-Spin-Dichte induziert wird. Durch einen elektrischen Strom parallel zur Grenzfläche zwischen den Kontakten C und D wird durch den Edelstein-Effekt als Antwort auf einen elektrischen Strom eine Spin-Dichte s bzw. eine Magnetisierungsdichte $m = -\gamma_s s$ im Bereich der Grenzflächen NM/FM_F induziert. Hierbei ist γ_s das gyromagnetische Verhältnis. Durch die Austauschwechselwirkung in der ferromagnetischen Schicht FM_F bewirkt diese Magnetisierungsdichte ein Drehmoment auf die Magnetisierung. In diesem Fall ist das Drehmoment durch Gleichung (1.4) mit

$$P(E) := s(E) \quad (1.7)$$

gegeben [21].

2. Theoretische Grundlagen

Seid nicht zufrieden mit dem Was, sondern erforscht das Warum und das Wie.

Sir Robert Baden-Powell, Lord of Gilwell, Gründer der Weltpfadfinderbewegung

2.1. Elektronische Struktur

2.1.1. Vielteilchensysteme und Born-Oppenheimer-Näherung

Ein Festkörper mit den positiv geladenen Atomkernen, bestehend aus Protonen und Neutronen, und den negativ geladenen Elektronen stellt ein quantenmechanisches Vielteilchensystem dar. Die zeitliche Entwicklung dieses quantenmechanischen Systems, das vollständig durch die Wellenfunktion $\Psi(r_1, \dots, r_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N, t)$ charakterisiert ist, wird durch das Anfangswertproblem

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(r_1, \dots, r_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N, t) \Psi(r_1, \dots, r_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N, t) \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r_1, \dots, r_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N, t) \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\Psi(r_1, \dots, r_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N, t)|_{t=0} = \Psi_0(r_1, \dots, r_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N), \quad (2.2)$$

bestehend aus der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (2.1) und der Anfangsbedingung, beschrieben. Hierbei stellen r_1, \dots, r_N die Ortskoordinaten der N Elektronen, und $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N$ die Ortskoordinaten der \mathcal{N} Atomkerne dar. Das Elektron i besitzt die Ladung $q_i = -e$, wobei e mit $e > 0$ die Elementarladung darstellt. Die interne Struktur der Atomkerne und die Ausdehnung der Atomkerne werden vernachlässigt, sodass diese als punktförmige Teilchen angenommen werden. Die Ladung des Atomkerns \mathcal{I} ist $Q_{\mathcal{I}} = Z_{\mathcal{I}}e$, wobei $Z_{\mathcal{I}}$ die Ordnungszahl des Atoms darstellt. Die Wellenfunktion Ψ muss neben der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (2.1) ferner auch der Normierungsbedingung

$$\int_{V_1} d\mathbf{r}_1 \cdots \int_{V_N} d\mathbf{r}_N \int_{V_1} d\mathbf{R}_1 \cdots \int_{V_N} d\mathbf{R}_N |\Psi(r_1, \dots, r_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N, t)|^2 = 1 \quad (2.3)$$

für alle $t \geq 0$ genügen. Der nicht-relativistische Hamilton-Operator \mathcal{H} dieses Vielteilchensystems [64, 88]

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N, t) &= T_e(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + T_K(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \\ &\quad + V_{ee}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + V_{KK}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \\ &\quad + V_{eK}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{\mathcal{I}=1}^{\mathcal{N}} \frac{\mathbf{P}_{\mathcal{I}}^2}{2M_{\mathcal{I}}} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{\mathcal{I}=1}^{\mathcal{N}} \sum_{\substack{\mathcal{J}=1 \\ \mathcal{I} \neq \mathcal{J}}}^{\mathcal{N}} \frac{Z_{\mathcal{I}} Z_{\mathcal{J}} e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{R}_{\mathcal{I}} - \mathbf{R}_{\mathcal{J}}|} \\ &\quad - \sum_{i=1}^N \sum_{\mathcal{I}=1}^{\mathcal{N}} \frac{Z_{\mathcal{I}} e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_{\mathcal{I}}|} \end{aligned} \quad (2.5)$$

besteht aus der kinetischen Energie der Elektronen T_e mit dem Impulsoperator $\mathbf{p}_i := \hbar/i\partial/\partial\mathbf{r}_i$, der kinetischen Energie der Atomkerne T_K mit dem Impulsoperator $\mathbf{P}_{\mathcal{I}} := \hbar/i\partial/\partial\mathbf{R}_{\mathcal{I}}$, der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen den Elektronen V_{ee} , der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen den Atomkernen V_{KK} , und der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen Elektronen und Atomkernen V_{eK} , sodass sich mit Hilfe eines Separationsansatzes der Form

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N, t) = \Xi(t)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \quad (2.6)$$

aus der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (2.1) die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \\ = \mathcal{E}\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \end{aligned} \quad (2.7)$$

gewinnen lässt. Die zeitliche Entwicklung ist hierbei durch $\Xi(t) = \exp(-i/\hbar\mathcal{E}t)$ gegeben, und die Separationskonstante stellt die Energie des Vielteilchensystems \mathcal{E} dar. Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (2.7) stellt eine Eigenwertgleichung dar, sodass die Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung (2.7) die Bestimmung der Eigenwerte und Eigenfunktionen des Hamilton-Operators \mathcal{H} entspricht. In einem ersten Schritt zur Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung (2.7) nutzt man aus, dass die Massen der Atomkerne sich um mehrere Größenordnungen von der Masse des Elektrons unterscheiden. In nullter Näherung gilt $\frac{m}{M_{\mathcal{I}}} \ll 1$ für alle $\mathcal{I} \in \{1, \dots, \mathcal{N}\}$, so dass T_K vernachlässigt wird. Man betrachtet somit das Vielteilchensystem im Grenzfalle ruhender Atomkerne, deren Ruhelage durch die Ortskoordinaten $\{\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{\mathcal{N}}\}$ gegeben ist. Diese Approximation wird als Born-Oppenheimer-Näherung [89] bezeichnet. Für diesen Fall einer beliebigen, aber festen Konfiguration der Atomkerne stellt die elektrostatische Wechselwirkung der Atomkerne V_{KK} lediglich eine Konstante, die

Madelung-Konstante, dar. Der elektronische Hamilton-Operator im Fall beliebiger, aber fest gewählter Konfiguration der Atomkerne H und die zugehörige elektronische Schrödinger-Gleichung sind durch

$$H(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) = T_e(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + V_{ee}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + V_{eK}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \quad (2.8)$$

bzw.

$$H(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) = \left[\underbrace{E'(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) - V_{KK}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)}_{=: E(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N)} \right] \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) \quad (2.9)$$

gegeben. Die elektronische Wellenfunktion ψ hängt wie die Energie des elektronischen Systems E parametrisch von den Ortskoordinaten der Atomkerne ab. Im weiteren wird ausschließlich das elektronische System mit dem Hamilton-Operator in Gleichung (2.8) und die dazugehörige elektronische Schrödinger-Gleichung (2.9) betrachtet. Zugunsten einer übersichtlichen Darstellung wird die parametrische Abhängigkeit von den Ortskoordinaten der Atomkerne nicht explizit ausgeschrieben.

2.1.2. Dichtefunktionaltheorie

2.1.2.1. Nichtrelativistische Beschreibung

Anstelle der Wellenfunktion wird in der Dichtefunktionaltheorie [90] die Dichte $n(\mathbf{r})$ betrachtet, die ausgehend von der Vielteilchenwellenfunktion des elektronischen Systems $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ durch

$$n(\mathbf{r}_1) = N \int_{V_2} d\mathbf{r}_2 \cdots \int_{V_N} d\mathbf{r}_N |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)|^2 \quad (2.10)$$

definiert ist. Die elektronische Dichte ist entsprechend

$$N = \int_{V_1} d\mathbf{r}_1 n(\mathbf{r}_1) \quad (2.11)$$

auf die Gesamtzahl der Elektronen N normiert. Da die Elektronen ununterscheidbar sind, wird im folgenden \mathbf{r}_1 durch \mathbf{r} und V_1 durch V ersetzt. Die ersten Ideen anstelle der Vielteilchenwellenfunktion die elektronische Dichte als zentrale Größe zu nutzen finden sich bei Thomas [91] und Fermi [92]. Die wegweisende Arbeit, die die Dichtefunktionaltheorie auf eine solide mathematische Grundlage stellte, und die Dichte als gleichberechtigt neben die Wellenfunktion stellte, war die Arbeit von Hohenberg und Kohn [93] im Jahre 1964. Ausgangspunkt bildet hierbei ein Hamilton-Operator der Form

$$H = T + U + V_{\text{ext}}, \quad (2.12)$$

wobei der Operator der kinetischen Energie der Elektronen durch T , der Operator der Wechselwirkung der Elektronen untereinander durch U , und der Operator der Wechselwirkung der Elektronen mit einem externen Potential durch V_{ext} gegeben sind. Hohenberg und Kohn [93] zeigten, dass sich erstens die Energie E als eindeutiges Funktional der Dichte $n(\mathbf{r})$, d.h.

$$E[n(\mathbf{r})] = T[n(\mathbf{r})] + U[n(\mathbf{r})] + V_{\text{ext}}[n(\mathbf{r})] \quad (2.13)$$

darstellen lässt und zweitens, dass die Energie für die Dichte des Grundzustandes $n_0(\mathbf{r})$ einen stationären Punkt hat, d.h.

$$\left. \frac{\delta E[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} \right|_{n(\mathbf{r})=n_0(\mathbf{r})} = 0. \quad (2.14)$$

Die Schwierigkeit besteht nun darin, dass die explizite Abhängigkeit des Energiefunktional $E[n(\mathbf{r})]$ von der Dichte mit Ausnahme der Wechselwirkung mit dem externen Potential V_{ext} mit $V_{\text{ext}}[n(\mathbf{r})] = \int_V d\mathbf{r} V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})$ im Allgemeinen unbekannt ist. Wenngleich das Funktional der kinetischen Energie wechselwirkender Elektronen von der Dichte $T[n(\mathbf{r})]$ unbekannt ist, ist hingegen das entsprechende Funktional nicht-wechselwirkender Elektronen $T_0[n(\mathbf{r})]$ bekannt. Zusammen mit dem bekannten Ausdruck für die klassische Wechselwirkung zweier Ladungsdichten $U_0[n(\mathbf{r})]$ mit

$$U_0[n(\mathbf{r})] = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_V d\mathbf{r} \int_{V'} d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.15)$$

lässt sich das Energiefunktional zu

$$\begin{aligned} E[n(\mathbf{r})] &= T_0[n(\mathbf{r})] + U_0[n(\mathbf{r})] + \int d\mathbf{r} V_{\text{ext}}(\mathbf{r})n(\mathbf{r}) \\ &\quad + \underbrace{(T[n(\mathbf{r})] - T_0[n(\mathbf{r})]) + (U[n(\mathbf{r})] - U_0[n(\mathbf{r})])}_{=: E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]} \end{aligned} \quad (2.16)$$

umschreiben. Das Funktional $E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]$ wird Austausch- und Korrelationsfunktional (engl. *exchange and correlation functional* (xc functional)) genannt. Trotz allem ist eine Lösung zur Bestimmung des Grundzustandsdichte $n_0(\mathbf{r})$ nicht möglich. Erst die Arbeiten von Kohn und Sham [94] ermöglichten eine Lösung. Hierbei wird ein fiktives System nicht-wechselwirkender Elektronen $\{\psi_i(\mathbf{r})\}_{i \in \{1, \dots, N\}}$ betrachtet, das die gleiche Dichte $n(\mathbf{r})$ wie das physikalische System besitzt. Die Dichte

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \psi_i^*(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

und die kinetische Energie nicht-wechselwirkender Elektronen

$$T_0[n(\mathbf{r})] = \sum_{i=1}^N \int_V d\mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r}) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

lassen sich somit explizit bestimmen. Die Variation des Energiefunktional in Gleichung (2.14) führt wegen

$$H(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = E_i\psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

mit

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_{\text{eff}}[n(\mathbf{r})] = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{V'} d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} \quad (2.20)$$

auf die Lösung von N Ein-Teilchen-Schrödinger-Gleichungen. Die Gleichungen (2.19) werden als Kohn-Sham-Gleichungen bezeichnet. Letztendlich bleibt trotz Rückführung auf N effektive Ein-Teilchen-Probleme die Unkenntnis über die explizite Abhängigkeit des Austausch- und Korrelationsfunktionals von der Dichte ein nicht exakt zu lösendes Problem.

Die erste und einfachste Näherung für das Austausch- und Korrelationsfunktional ist die lokale Dichtenäherung (engl. *local density approximation* (LDA)). Hierbei wird das Austausch- und Korrelationsfunktional durch

$$E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})] \approx E_{\text{xc}}^{\text{LDA}}[n(\mathbf{r})] = \int_V d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) E_{\text{xc}}^0[n(\mathbf{r})] \quad (2.21)$$

approximiert, wobei $E_{\text{xc}}^0[n(\mathbf{r})]$ das Austausch- und Korrelationsfunktional des homogenen Elektronengases darstellt [94]. Da selbst die explizite Abhängigkeit des Austausch- und Korrelationsfunktionals des homogenen Elektronengases von der Dichte nicht bekannt ist, existieren eine Vielzahl an Parametrisierungen [95, 96]. Den numerischen Rechnungen in der vorliegenden Arbeit liegt die Parametrisierung von Vosko, Wilk, und Nusair [96] zugrunde. Diese Parametrisierung interpoliert die Werte, die für das Austausch- und Korrelationsfunktional auf Grundlage von Monte-Carlo-Simulationen gewonnen wurden [97]. Erweiterungen der lokalen Dichtenäherung sind die generalisierte Gradientennäherung (engl. *generalized gradient approximation* (GGA)), wobei neben der Dichte auch der Gradient $\partial n(\mathbf{r})/\partial r$ berücksichtigt wird [98].

2.1.2.2. Relativistische Beschreibung

Mit dem Ziel einer relativistischen Wellengleichung entwickelte Dirac im Jahre 1928 die später nach ihm benannte Dirac-Gleichung [99, 100]. Diese ist Lorentz-invariant und geht im nichtrelativistischen Grenzfall in die Schrödinger-Gleichung über. Insbesondere berücksichtigt die Dirac-Gleichung den Spin des Elektrons. Die zeitunabhängige Dirac-Gleichung des freien Elektrons ist durch

$$h_0(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + (\beta - \mathbb{1}_4) mc^2] \psi(\mathbf{r}) = (W - mc^2) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

gegeben, in der h_0 den Hamilton-Operator darstellt, der neben der kinetischen Energie des Elektrons, gegeben durch den Operator $h_0^1 := c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}$, die Ruheenergie bzw.

Ruhemasse $h_0^{\text{II}} := \beta mc^2$ enthält. Die Standard-Darstellung der Dirac-Matrizen

$$\boldsymbol{\alpha} := \begin{pmatrix} \alpha_x \\ \alpha_y \\ \alpha_z \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} 0_2 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0_2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0_2 \\ 0_2 & -\mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

lässt sich auf die Pauli-Matrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

und die 2×2 -Einheitsmatrix $\mathbb{1}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ zurückführen. Die Wellenfunktion als Lösung der Dirac-Gleichung $\psi(\mathbf{r}) = (\psi_{(1)}(\mathbf{r}), \psi_{(2)}(\mathbf{r}), \psi_{(3)}(\mathbf{r}), \psi_{(4)}(\mathbf{r}))^T$ ist ein Bi-Spinor bestehend aus vier skalaren Wellenfunktionen $\psi_{(i)}$. Die Spinoren $\psi_L := (\psi_{(1)}, \psi_{(2)})^T$ und $\psi_S := (\psi_{(3)}, \psi_{(4)})^T$ werden als große (engl. *large* (L)) bzw. kleine (engl. *small* (S)) Komponente des Bi-Spinors ψ bezeichnet. Anstelle der komplexen Konjugation der Wellenfunktion tritt in der relativistischen Quantenmechanik die Adjunktion. Die zur Wellenfunktion ψ adjungierte Wellenfunktion ist $\psi^\dagger(\mathbf{r}) = (\psi_{(1)}^*(\mathbf{r}), \psi_{(2)}^*(\mathbf{r}), \psi_{(3)}^*(\mathbf{r}), \psi_{(4)}^*(\mathbf{r}))$. Der ursprünglichen Formulierung der Dichtefunktionaltheorie von Hohenberg und Kohn lag die Schrödinger-Gleichung zugrunde, doch lässt sie sich auch auf Grundlage der Dirac-Gleichung formulieren [101]. In der relativistischen Dichtefunktionaltheorie bilden die Dichte $n(\mathbf{r})$ und die Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ zusammen die Basisgrößen. Unter Verwendung der Gordon-Zerlegung für die Stromdichte und bei Vernachlässigung diamagnetischer Effekte [101], können als Basisgrößen die Dichte $n(\mathbf{r})$ und die Magnetisierungsdichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ verwendet werden [101]. Ausgehend hiervon lassen sich in einer ähnlichen Art und Weise wie in der nichtrelativistischen Dichtefunktionaltheorie die Kohn-Sham-Dirac-Gleichungen [101]

$$H(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) = [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + (\beta - \mathbb{1}_4) mc^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r})\mathbb{1}_4 - \mu_B \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{r})] \psi_i(\mathbf{r}) = E_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.25)$$

ableiten, wobei neben einem effektiven skalaren Potential $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ ein effektives magnetisches Feld $\mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ mit

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_{\text{eff}}[n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r})] = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int_{V'} d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} \quad (2.26)$$

$$\mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}_{\text{eff}}[n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r})] = \mathbf{B}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r})]}{\delta \mathbf{m}(\mathbf{r})} \quad (2.27)$$

verwendet werden. Der Kohn-Sham-Dirac-Hamilton-Operator $H(\mathbf{r})$ enthält lediglich die Wechselwirkung des magnetischen Momentes hervorgerufen durch den Spin des Elektrons mit dem effektiven magnetischen Feld. Im Rahmen der relativistischen Quantenmechanik stellt

$$\mathbf{S}' = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\mathcal{S}} = \frac{\hbar}{2} \beta \boldsymbol{\Sigma} \quad (2.28)$$

den relativistischen Spin-Operator mit $\boldsymbol{\Sigma} = (\Sigma_x, \Sigma_y, \Sigma_z)^T$ und $\Sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}$ dar [101]. Mit Hilfe der Einteilcheneigenfunktionen zum Kohn-Sham-Dirac-Hamilton-Operator lassen sich die Dichte $n(\mathbf{r})$ entsprechend Gleichung (2.17), wobei hier die skalare Wellenfunktion durch den Bi-Spinor und die komplexe Konjugation durch die Adjunktion ersetzt wird, und die Magnetisierungsdichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ gemäß

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = -\mu_B \sum_{i=1}^N \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \boldsymbol{\Sigma} \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.29)$$

bestimmen. Das Austausch- und Korrelationsenergiefunktional $E_{xc}[n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r})]$ wird im Rahmen der lokalen Spin-Dichte-Näherung (engl. *local spin density approximation* (LSDA)) durch

$$E_{xc}[n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r})] \approx E_{xc}^{\text{LSDA}}[n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r})] = \int_V d\mathbf{r} n(\mathbf{r}) E_{xc}^0[n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r})] \quad (2.30)$$

beschrieben, wobei hier $E_{xc}^0[n(\mathbf{r}), \mathbf{m}(\mathbf{r})]$ das Austausch- und Korrelationsenergiefunktional des homogenen Elektronengases darstellt [102, 103].

2.1.3. Korrington-Kohn-Rostoker Greensche Funktionsmethode

2.1.3.1. Die Greensche Funktion

Die Methode der Greenschen Funktion hat ihren historischen Ursprung in der Lösung von inhomogenen linearen partiellen Differentialgleichungen [104]. Im selbstkonsistenten Zyklus zur Bestimmung der Grundzustandsdichte im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie ist es in jedem Schritt erforderlich die Kohn-Sham-Dirac-Gleichungen

$$H(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) = E_i\psi_i(\mathbf{r}) \quad \text{bzw.} \quad [E_i - H(\mathbf{r})]\psi_i(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.31)$$

mit der Nebenbedingung $\int_V d\mathbf{r} \psi_i^\dagger(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) = 1$ für alle $i \in \{1, \dots, N\}$ zu lösen. Die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators H seien $\psi_i(\mathbf{r})$ und die dazugehörigen Eigenwerte seien E_i und werden durch einen vollständigen Satz von Quantenzahlen i indiziert. Anstelle der Lösung von N Differentialgleichungen zur Bestimmung der Eigenfunktionen $\psi_i(\mathbf{r})$ und Eigenwerten E_i wird hier unter Verwendung der Methode der Greenschen Funktion eine äquivalente Formulierung zur Lösung von Gleichung (2.31) vorgestellt. Die Eigenfunktionen zum Hamilton-Operator H sollen entsprechend

$$\int_V d\mathbf{r} \psi_i^\dagger(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) = \delta_{ii} \quad \text{und} \quad \sum_i \psi_i(\mathbf{r})\psi_i^\dagger(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.32)$$

orthonormiert sein bzw. ein vollständiges Funktionensystem im zugrundeliegenden Hilbert-Raum bilden. Der Hamilton-Operator H in Gleichung (2.31) ist ein linearer Differentialoperator und die zugehörige Greensche Funktion $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ erfüllt

$$[E - H(\mathbf{r})]G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.33)$$

Hervorzuheben ist hierbei, dass $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ strenggenommen nicht die Greensche Funktion von H , sondern von $E - H$ darstellt. Sofern im Folgenden von der Greenschen Funktion zum Hamilton-Operator H gesprochen wird, ist im eigentlichen Sinne anstelle von H stets $E - H$ gemeint. Im Gegensatz zur Schrödinger-Gleichung bzw. Dirac-Gleichung in Gleichung (2.31) stellt E in Gleichung (2.33) nicht einen Eigenwert dar, sondern eine kontinuierliche reelle Variable. Die Greensche Funktion lässt sich bezüglich E analytisch in die komplexe Ebene fortsetzen. Zu diesem Zweck definiert man für $z := E + i\eta$ mit $\eta \in \mathbb{R}$ die Greensche Funktion $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$, die der Beziehung

$$[z - H] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.34)$$

genügt. Anhand der Spektraldarstellung der Greenschen Funktion

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \sum_{i=1}^N \frac{\psi_i(\mathbf{r})\psi_i^\dagger(\mathbf{r}')}{z - E_i} \quad (2.35)$$

zeigt sich, dass die Greensche Funktion Polstellen erster Ordnung an den Eigenwerten E_i des Hamilton-Operators H hat. Die Greensche Funktion $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ lässt sich aus deren analytischen Fortsetzung in der komplexen Ebene $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ über einen Grenzwertprozess

$$G^\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) := \lim_{\eta \rightarrow \pm 0} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E \pm i\eta) \quad (2.36)$$

bestimmen. Abhängig davon ob man sich mit positivem oder negativem Imaginärteil $\text{Im } z = \eta$ der reellen Achse annähert, erhält man entweder die retardierte Greensche Funktion $G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ oder die avancierte Greensche Funktion $G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$. Ausgehend von der zeitabhängigen Greenschen Funktion $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t - t')$ zeigt sich, dass aus Kausalitätsgründen die retardierte Greensche Funktion zu verwenden ist [104, 105]. Mit Hilfe der Spektraldarstellung aus Gleichung (2.35) verifiziert man

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E + i\eta) - G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E - i\eta) = 2i \text{Im } G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E + i\eta), \quad (2.37)$$

die nach dem Grenzübergang entsprechend Gleichung (2.36) in

$$G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) - G^-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = 2i \text{Im } G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \quad (2.38)$$

übergeht. Mit Hilfe der Dirac-Identität¹

$$\lim_{y \rightarrow 0} \frac{f(x)}{x - x_0 \pm iy} = \text{PV} \left(\frac{f(x)}{x - x_0} \right) \mp i\pi f(x) \delta(x - x_0) \quad (2.39)$$

¹Strenggenommen gilt die Beziehung in Gleichung (2.39) ausschließlich in der Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \lim_{y \rightarrow 0} \frac{f(x)}{x - x_0 \pm iy} = \text{PV} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{f(x)}{x - x_0} \right) \mp i\pi \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(x - x_0),$$

wobei man unter PV den Cauchyschen Hauptwert (engl. *principal value* (PV)) versteht.

und der Spektraldarstellung der Greenschen Funktion in Gleichung (2.35) gilt

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im } G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_{i=1}^N \psi_i(\mathbf{r}) \psi_i^\dagger(\mathbf{r}') \delta(E - E_i). \quad (2.40)$$

Mit Hilfe von Gleichung (2.40) im Falle von $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ gilt unter Verwendung der Invarianz der Spur bei zyklischer Vertauschung

$$n(\mathbf{r}; E) = \sum_{i=1}^N \psi_i^\dagger(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) \delta(E - E_i) = -\frac{1}{\pi} \text{Sp } \text{Im } G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E), \quad (2.41)$$

die die lokale Zustandsdichte darstellt. Ausgehend von dieser Größe lässt sich einerseits durch Integration über den gesamten Raum die lokale Zustandsdichte

$$n(E) = \int_V d\mathbf{r} n(\mathbf{r}; E) = -\frac{1}{\pi} \int_V d\mathbf{r} \text{Sp } \text{Im } G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) \quad (2.42)$$

gewinnen [106], wobei hier die Definition der Zustandsdichte $n(E) := \sum_i \delta(E - E_i)$, die die Anzahl der Zustände pro Energieintervall $[E, E + dE]$ angibt, verwendet wurde. Andererseits lässt sich ausgehend von $n(\mathbf{r}; E)$ durch Integration über die Energie die Dichte $n(\mathbf{r})$ gemäß

$$n(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} dE n(\mathbf{r}; E) f^0(E, T) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Sp } \text{Im } G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) f^0(E, T) \quad (2.43)$$

bestimmen [106]. Hierbei stellt f^0 die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion dar. Für $T = 0$ K gilt

$$f^0(E, T)|_{T=0\text{K}} = \Theta(E_F - E) \quad (2.44)$$

wobei Θ die Heaviside-Funktion $\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \geq 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases}$ und E_F die Fermi-Energie bezeichnet. Diese trennt am absoluten Temperaturnullpunkt die besetzten von den unbesetzten Zustände. Die Fermi-Energie E_F wird über die Forderung nach Teilchenzahlerhaltung mit Hilfe von

$$N = \int_{-\infty}^{E_F} dE n(E) \quad (2.45)$$

bestimmt, wobei hier N der Anzahl an Elektronen im System entspricht. Im Rahmen der Spin-Dichtefunktionaltheorie stellt neben der Dichte $n(\mathbf{r})$ die Magnetisierungsdichte $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ definiert über

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = -\frac{\mu_B}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Sp } (\beta \Sigma \text{Im } G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E)) f^0(E, T) \quad (2.46)$$

die zweite gleichberechtigte Größe dar [107, 108].

Ein wesentlicher Vorteil der Methode der Greenschen Funktion bildet die hierarchische Struktur von Greenschen Funktionen [56]. Sei das System $\overset{\circ}{S}$ beschrieben durch den Hamilton-Operator $\overset{\circ}{H}$ und sei das System S beschrieben durch den Hamilton-Operator H , wobei sich beide Hamilton-Operatoren lediglich um einen Potentialunterschied

$$H(\mathbf{r}) = \overset{\circ}{H}(\mathbf{r}) + \Delta H(\mathbf{r}) \quad (2.47)$$

unterscheiden sollen. Die Greensche Funktion $\overset{\circ}{G}$ zum Hamilton-Operator $\overset{\circ}{H}$ einerseits und die Greensche Funktion G zum Hamilton-Operator H andererseits genügen den Beziehungen

$$\left[z - \overset{\circ}{H}(\mathbf{r}) \right] \overset{\circ}{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.48)$$

und

$$\left[z - H(\mathbf{r}) \right] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.49)$$

Die Greensche Funktion G lässt sich durch die Dyson-Gleichung

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) = \overset{\circ}{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) + \int_{V''} d\mathbf{r}'' \overset{\circ}{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; z) \Delta H(\mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; z) \quad (2.50)$$

unter Verwendung der Greenschen Funktion $\overset{\circ}{G}$ und dem Potentialunterschied ΔH bestimmen [56], und stellt eine Umformulierung der Gleichung (2.49) in Form einer Integralgleichung für die Greensche Funktion G dar. Hervorzuheben ist, dass die Greensche Funktion G ebenfalls im Integranden vorkommt, sodass eine direkte Lösung in Ortsraumdarstellung nicht möglich ist. Eine Möglichkeit zur Lösung der Dyson-Gleichung besteht in der Iteration der Gleichung (2.50), wobei die Iterationsvorschrift für $n > 0$ durch

$$G^{(n+1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) := \overset{\circ}{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) + \int_{V''} d\mathbf{r}'' \overset{\circ}{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; z) \Delta H(\mathbf{r}'') G^{(n)}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; z) \quad (2.51)$$

mit $G^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z) := \overset{\circ}{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ gegeben ist. Neben der zuvor dargestellten Ortsdarstellung der Methode der Greenschen Funktion kann die Methode der Greenschen Funktion abstrakt im Rahmen der Funktionalanalysis dargestellt werden. Für Details sei exemplarisch auf [56, 109, 110] verwiesen.

2.1.3.2. Einfachstreuung

Ein makroskopischer Festkörper stellt mikroskopisch ein Arrangement von Atomen bzw. Potentialen dar, deren Anzahl in der Größenordnung der Avogadro-Konstanten liegt. Die Idee der Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) Greenschen Funktionsmethode [106, 111] ist es, die zugehörige Greensche Funktion eines Arrangements von beliebigen Potentialen in einen Anteil, der entsprechend Abb. 2.1.1 (a) von der Streuung an einem einzelnen

isolierten Potential (Einfachstreuung) stammt, und in einen Anteil, der von der Vielfachstreuung herrührt wie in Abb. 2.1.1 (b), zu zerlegen. Letzterer hängt ausschließlich von der räumlichen Anordnung der Potentiale ab. Insbesondere in kristallinen Festkörpern bietet sich diese Zerlegung an, da die räumliche Anordnung der Potentiale translationsinvariant ist. Man kann sich somit auf die Eigenschaften der Einheitszelle und auf die Eigenschaften des zugrundeliegenden Bravais-Gitter zurückziehen. Die folgenden Darstellungen folgen den Darstellungen in den Dissertationen von Jörg Binder [110], Michael Czerner [112], Martin Gradhand [113], Katarina Tauber [114], und Christian Herschbach [109] und sind hier skizziert.

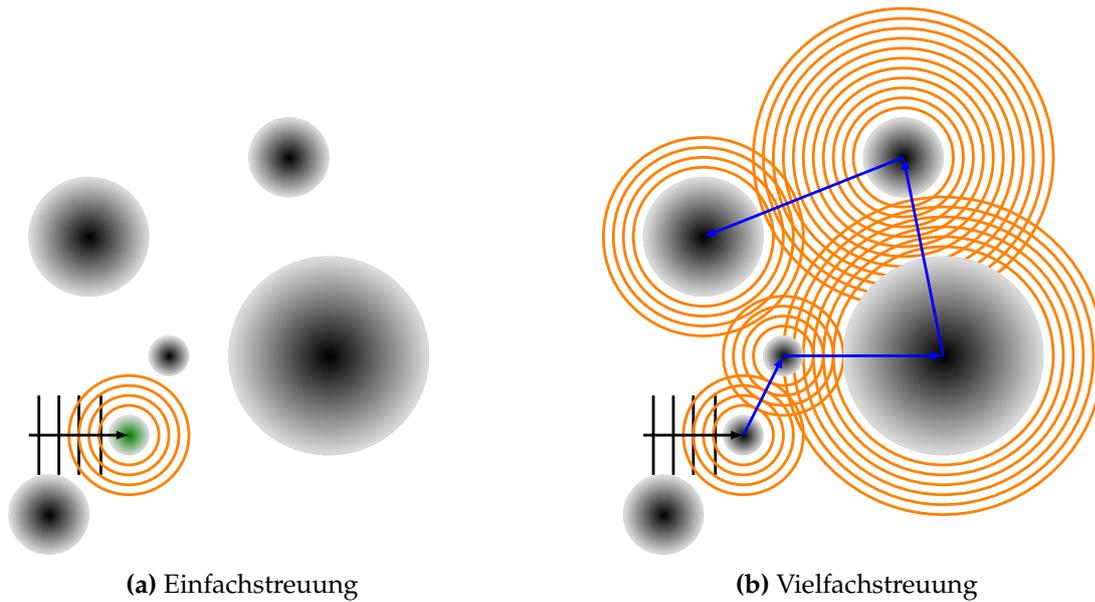


Abbildung 2.1.1.: In (a) wird die Streuung einer einlaufenden Welle an einem einzelnen isolierten Potential betrachtet. Die Streuung hängt ausschließlich von dem Potentialverlauf $V(\mathbf{r})$ ab. In (b) ist die Streuung einer einlaufenden Welle an einem Arrangement von Potentialen dargestellt. Die Vielfachstreuung hängt nur von der räumlichen Anordnung der Potentiale ab. Abbildung verändert nach [115].

Zunächst betrachtet man ein einzelnes Potential, wobei zur Vereinfachung die Beschreibung auf ein skalares sphärisches Potential beschränkt wird. Ausgehend von Gleichung (2.25) mit der Abkürzung $V(\mathbf{r}) := V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ ist die zugehörige Kohn-Sham-Dirac-Gleichung durch

$$[E - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - (\beta - \mathbb{1}_4)mc^2 - V(\mathbf{r})\mathbb{1}_4] \psi(\mathbf{r}; E) = 0 \quad (2.52)$$

gegeben. In den zugehörigen linear unabhängigen Lösungen [58, 101]

$$R_Q(\mathbf{r}; E) = \begin{pmatrix} g_Q(\mathbf{r}; E)\chi_Q(\hat{\mathbf{r}}) \\ if_Q(\mathbf{r}; E)\chi_{\bar{Q}}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

zerlegt man die große und die kleine Komponente des Bi-Spinor in einen Radialanteil g_Q bzw. if_Q und in einen Winkelanteil χ_Q bzw. $\chi_{\bar{Q}}$. Die Spin-Kugelflächenfunktionen χ_Q setzen sich entsprechend

$$\chi_Q(\hat{\mathbf{r}}) = \sum_{m_s=-s}^s C(l, j, s; \mu_j - m_s, m_s) Y_{l\mu_j - m_s}(\hat{\mathbf{r}}) \phi_{m_s} \quad (2.54)$$

aus den Kugelflächenfunktionen $Y_{l\mu_j - m_s}$, den Pauli-Spinoren $\phi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\phi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ und den Clebsch-Gordan-Koeffizienten $C(l, j, \frac{1}{2}; \mu_j - m_s, m_s)$ zusammen [58, 101]. Die Spin-Kugelflächenfunktionen χ_Q sind gemeinsame Eigenfunktionen sowohl zum Quadrat des Gesamtdrehimpulses J^2 , zum Quadrat des Bahndrehimpulses L^2 , zum Quadrat des Spin S^2 , zur z-Komponente des Gesamtdrehimpulses J_z als auch zum Operator der Spin-Bahn-Wechselwirkung mit $K := \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar \mathbb{1}_2$ und genügen den Beziehungen

$$\begin{aligned} J^2 \chi_Q(\hat{\mathbf{r}}) &= \hbar^2 j(j+1) \chi_Q(\hat{\mathbf{r}}), \quad L^2 \chi_Q(\hat{\mathbf{r}}) = \hbar^2 l(l+1) \chi_Q(\hat{\mathbf{r}}), \\ S^2 \chi_Q(\hat{\mathbf{r}}) &= \hbar^2 s(s+1) \chi_Q(\hat{\mathbf{r}}), \quad J_z \chi_Q(\hat{\mathbf{r}}) = \hbar m_j \chi_Q(\hat{\mathbf{r}}), \quad \text{und} \quad K \chi_Q(\hat{\mathbf{r}}) = -\hbar \kappa \chi_Q(\hat{\mathbf{r}}), \end{aligned} \quad (2.55)$$

wobei die zugehörigen Eigenwerte den Bedingungen

$$\kappa = \begin{cases} l & \text{für } j = l - \frac{1}{2}, \\ -l - 1 & \text{für } j = l + \frac{1}{2}, \end{cases} \quad \text{und} \quad \mu_j := m_j \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\} \quad (2.56)$$

unterliegen [101, 116]. Abkürzend wird $Q = (\kappa \mu_j)$ und $\bar{Q} := (-\kappa \mu_j)$ vereinbart. Wie in Gleichung (2.25) dargestellt, tritt in magnetischen Systemen neben einem skalaren Potential ein magnetisches Feld auf, sodass die zugehörige Kohn-Sham-Dirac-Gleichung mit $\mathbf{B}(\mathbf{r}) := -\mu_B \mathbf{B}_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ durch

$$[E - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - (\beta - \mathbb{1}_4)mc^2 - V(r)\mathbb{1}_4 - \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B}(r)] \psi(\mathbf{r}; E) = 0 \quad (2.57)$$

beschrieben wird. Ändert sich die Richtung des magnetischen Feldes über die Ausdehnung des Atoms nicht, so wird das Koordinatensystem so gewählt, dass die z-Achse in Richtung des magnetischen Feldes $\mathbf{B}(r)$ zeigt. In diesem Fall vereinfacht sich Gleichung (2.57) zu

$$[E - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - (\beta - \mathbb{1}_4)mc^2 - V(r)\mathbb{1}_4 - \beta \Sigma_z B_z(r)] \psi(\mathbf{r}; E) = 0. \quad (2.58)$$

Die Spin-Kugelflächenfunktionen sind bei nicht-verschwindendem magnetischem Feld keine Eigenfunktionen des Hamilton-Operators mehr, sodass die linear unabhängigen Lösungen von Gleichung (2.58)

$$R_Q(\mathbf{r}; E) = \sum_{Q'} \begin{pmatrix} g_{Q'Q}(\mathbf{r}; E) \chi_{Q'}(\hat{\mathbf{r}}) \\ if_{Q'Q}(\mathbf{r}; E) \chi_{\bar{Q}'}(\hat{\mathbf{r}}) \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

Linearkombinationen der Spin-Kugelflächenfunktionen sind [58]. Die Entwicklungskoeffizienten der Linearkombination sind in den radialen Lösungen $g_{QQ'}(\mathbf{r}; E)$ und

$f_{QQ}(r; E)$ integriert. Für verschwindendes magnetisches Feld gilt $g_{Q'Q} = g_{QQ}\delta_{Q'Q}$ und $f_{Q'Q} = f_{QQ}\delta_{Q'Q}$ und Gleichung (2.59) reduziert sich zu Gleichung (2.53). Sowohl für $\mathbf{B} \equiv 0$ als auch für $\mathbf{B} \neq 0$ ist die allgemeine Lösung

$$\psi(\mathbf{r}; E) = \sum_Q c_Q R_Q(\mathbf{r}; E), \quad (2.60)$$

wobei R_Q für $\mathbf{B} \equiv 0$ durch Gleichung (2.53) und für $\mathbf{B} \neq 0$ durch Gleichung (2.59) gegeben ist [58].

2.1.3.3. Vielfachstreuung

2.1.3.3.1 Greensche Funktion des Idealkristalls

Die Greensche Funktion des Idealkristalls berücksichtigt sowohl die Einfachstreuung als auch die Vielfachstreuung. Der Hamilton-Operator des Idealkristalls

$$\overset{\circ}{\mathfrak{H}}(\mathbf{r}) = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + (\beta - \mathbb{1}_4) mc^2 + \overset{\circ}{\mathfrak{V}}_{\text{eff}}(\mathbf{r})\mathbb{1}_4 - \mu_B \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \overset{\circ}{\mathfrak{B}}_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \quad (2.61)$$

lässt sich unter Verwendung von $\mathfrak{U}(\mathbf{r}) := \mathfrak{V}(\mathbf{r})\mathbb{1}_4 + \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathfrak{B}(\mathbf{r})$ mit $\overset{\circ}{\mathfrak{V}}(\mathbf{r}) := \overset{\circ}{\mathfrak{V}}_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ und $\overset{\circ}{\mathfrak{B}}(\mathbf{r}) := -\mu_B \overset{\circ}{\mathfrak{B}}_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ zu

$$\overset{\circ}{\mathfrak{H}}(\mathbf{r}) = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + (\beta - \mathbb{1}_4) mc^2 + \overset{\circ}{\mathfrak{U}}(\mathbf{r}) \quad (2.62)$$

vereinfachen und die Greensche Funktion $\overset{\circ}{\mathfrak{G}}$ wird durch

$$\left[E - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - (\beta - \mathbb{1}_4) mc^2 - \overset{\circ}{\mathfrak{U}}(\mathbf{r}) \right] \overset{\circ}{\mathfrak{G}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.63)$$

bestimmt. Aufgrund der Translationsinvarianz des Idealkristalls bietet es sich an anstelle globaler Ortskoordinaten \mathbf{r} zellzentrierten Koordinaten der Form $\mathbf{r} = \mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\eta + \mathbf{r}$ wie in Abb. 2.1.2 illustriert zu verwenden. Hierbei kennzeichnet \mathbf{R}_n einen Gittervektor, \mathbf{r}_η den Vektor des Basisatoms, und \mathbf{r} den Ortsvektor innerhalb des Volumens des Basisatoms. Das Potential \mathfrak{U} lässt sich somit

$$\overset{\circ}{\mathfrak{U}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{r}_\eta} \overset{\circ}{U}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\eta + \mathbf{r})$$

$$\text{mit } \overset{\circ}{U}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\eta + \mathbf{r}) := \begin{cases} \overset{\circ}{U}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\eta + \mathbf{r}) & \text{für } \mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\eta + \mathbf{r} \in V(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\eta) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.64)$$

darstellen. Als abkürzende Schreibweise sei $\overset{\circ}{U}^n(\mathbf{r}) := \overset{\circ}{U}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\eta + \mathbf{r})$ vereinbart. Bei der Wahl der Form des Zellvolumens $V^n := V(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\eta)$ gibt es im Allgemeinen zwei Möglichkeiten wie sie in Abb. 2.1.3 dargestellt sind. In der ersten Näherung, der Muffin-Tin-Approximation (MTA), bestehen die Zellvolumina aus nichtüberlappenden Kugeln. In der zweiten Näherung, der Atomic-Sphere-Approximation (ASA), werden die Zellvolumina ebenfalls sphärisch angenommen, jedoch wird ihr Volumen so gewählt, dass

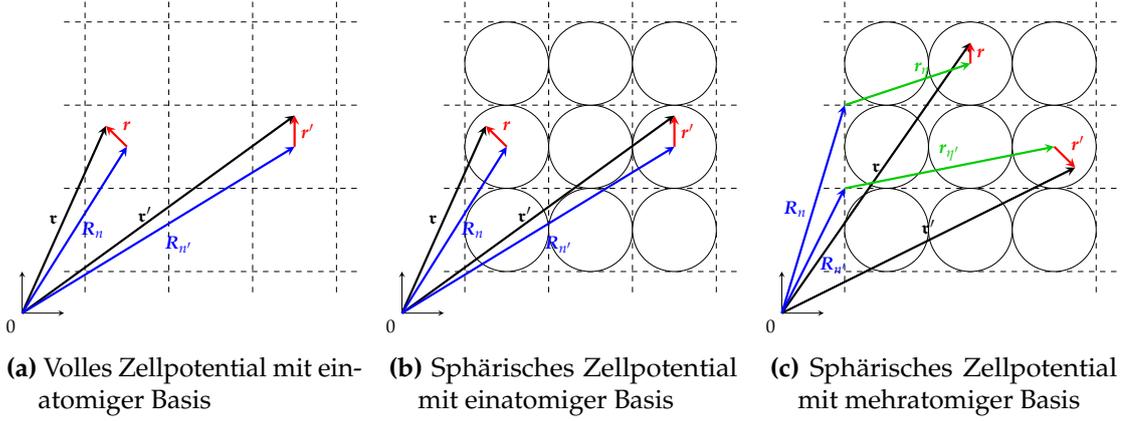


Abbildung 2.1.2.: Schematische Darstellung von globalen und zellzentrierten Koordinaten für (a) volles Zellpotential, für (b) sphärisches Zellpotential mit einatomiger Basis, und für (c) sphärisches Zellpotential mit mehratomiger Basis.

es mit dem Volumen der Wigner-Seitz-Zelle $V_{EZ} = \sum_{\eta} V_{\eta}^n$ übereinstimmt. Letztere wird in den numerischen Rechnungen verwendet. Unter Verwendung zellzentrierter Koordinaten und der abkürzenden Schreibweise geht Gleichung (2.63) in

$$\left[E - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - (\beta - \mathbb{1}_4) mc^2 - \hat{U}_{\eta}^n(\mathbf{r}) \right] \hat{G}_{\eta\eta'}^{nm'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta_{nn'} \delta_{\eta\eta'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.65)$$

über. Die Gleichung (2.65) stellt eine inhomogene lineare Differentialgleichung für die Greensche Funktion dar. Die Inhomogenität ist $\delta_{nn'} \delta_{\eta\eta'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Die allgemeine Lösung einer inhomogenen linearen Differentialgleichung setzt sich additiv aus der allgemeinen Lösung der zugehörigen homogenen linearen Differentialgleichung und einer speziellen Lösung der inhomogenen linearen Differentialgleichung zusammen. Falls $n \neq n'$ oder (einschließendes „oder“) $\eta \neq \eta'$ gilt, verschwindet die rechte Seite der Gleichung (2.65) und die Greensche Funktion erfüllt bzgl. der Ortskoordinate \mathbf{r} die Dirac-Gleichung. Die Greensche Funktion lässt sich somit für diesen speziellen Fall nach den Eigenfunktionen $\hat{R}_Q^{\eta}(\mathbf{r}; E) := \hat{R}_Q(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_{\eta} + \mathbf{r}; E)$ des Kohn-Sham-Dirac-Hamilton-Operators entsprechend

$$\hat{G}_{VS}^{nm'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_{QQ'} \hat{G}_{QQ'}^{nm'}(E) \hat{R}_Q^{\eta}(\mathbf{r}; E) \left(\hat{R}_{Q'}^{\eta'}(\mathbf{r}'; E) \right)^{\times} \quad (2.66)$$

entwickeln, wobei

$$\left(\hat{R}_Q^{\eta}(\mathbf{r}; E) \right)^{\times} = \sum_{Q'} \left(g_{Q'Q}^{\eta}(r; E) \chi_{Q'}^{\dagger}(\hat{\mathbf{r}}), -if_{Q'Q}^{\eta}(r; E) \chi_{Q'}^{\dagger}(\hat{\mathbf{r}}) \right) \quad (2.67)$$

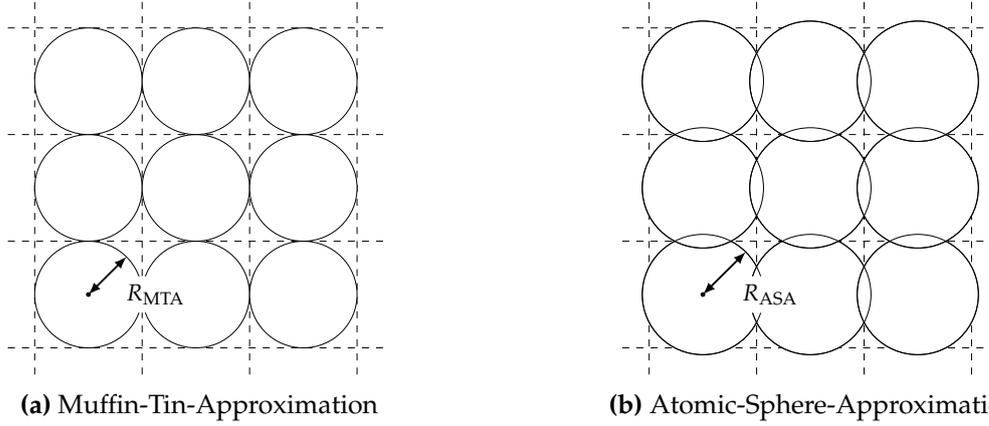


Abbildung 2.1.3.: Schematische Darstellung der (a) Muffin-Tin-Approximation (MTA) und der (b) Atomic-Sphere-Approximation (ASA).

ist. Für den Fall $n = n'$ und $\eta = \eta'$ gilt $\delta_{nn'} = \delta_{\eta\eta'} = 1$ und so reduziert sich Gleichung (2.65) auf

$$\left[E - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - (\beta - \mathbb{1}_4) mc^2 - \mathring{U}^n(\mathbf{r}) \right] \mathring{G}^{\circ nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.68)$$

und stellt die Differentialgleichung der Greenschen Funktion für ein isoliertes Potential $\mathring{U}^n(\mathbf{r})$ am Ort $\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_\eta + \mathbf{r}$ dar, und wird mit $\mathring{G}_{ES}^{\circ nn}$ bezeichnet. Die Greensche Funktion $\mathring{G}^{\circ nn'}$ setzt sich somit aus der Greenschen Funktion der Einfachstreuung $\mathring{G}_{ES}^{\circ nn'}$ als Lösung von Gleichung (2.68) und der Greenschen Funktion der Vielfachstreuung $\mathring{G}_{VS}^{\circ nn'}$ aus Gleichung (2.66) entsprechend

$$\mathring{G}^{\circ nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \mathring{G}_{ES}^{\circ nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \delta_{nn'} \delta_{\eta\eta'} + \mathring{G}_{VS}^{\circ nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \quad (2.69)$$

$$= \mathring{G}_{ES}^{\circ nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \delta_{nn'} \delta_{\eta\eta'} + \sum_{QQ'} \mathring{G}_{QQ'}^{\circ nn'}(E) \mathring{R}_Q^n(\mathbf{r}; E) \left(\mathring{R}_{Q'}^{n'}(\mathbf{r}'; E) \right)^\times \quad (2.70)$$

additiv zusammen. Der Idealkristall stellt im Folgenden das zu betrachtende physikalische System \mathring{S} dar, dessen Hamilton-Operator in globalen Koordinaten und in zellzentrierten Koordinaten durch

$$\mathring{\mathfrak{H}}(\mathbf{r}) = \mathring{h}(\mathbf{r}) + \mathring{U}(\mathbf{r}) \quad \text{bzw.} \quad \mathring{H}^n(\mathbf{r}) = \mathring{h}^n(\mathbf{r}) + \mathring{U}^n(\mathbf{r}) \quad (2.71)$$

gegeben ist, wobei $\mathring{h}(\mathbf{r})$ bzw. $\mathring{h}^n(\mathbf{r})$ den Hamilton-Operator freier Elektronen darstellt. Das Referenzsystem \tilde{S} wird in globalen Koordinaten und in zellzentrierten Koordinaten durch

$$\tilde{\mathfrak{H}}(\mathbf{r}) = \mathring{h}(\mathbf{r}) + \tilde{U}(\mathbf{r}) \quad \text{bzw.} \quad \tilde{H}^n(\mathbf{r}) = \mathring{h}^n(\mathbf{r}) + \tilde{U}^n(\mathbf{r}) \quad (2.72)$$

beschrieben, sodass ausgehend von Gleichungen (2.71) und (2.72) weiterhin

$$\mathring{\mathfrak{H}}(\mathbf{r}) = \tilde{\mathfrak{H}}(\mathbf{r}) + \left(\mathring{\mathfrak{U}}(\mathbf{r}) - \tilde{\mathfrak{U}}(\mathbf{r}) \right) \quad \text{bzw.} \quad \mathring{H}^n(\mathbf{r}) = \tilde{H}^n(\mathbf{r}) + \left(\mathring{U}^n(\mathbf{r}) - \tilde{U}^n(\mathbf{r}) \right) \quad (2.73)$$

gilt. Die zu Gleichung (2.73) gehörige Dyson-Gleichung in zellzentrierten Koordinaten

$$\begin{aligned} \mathring{G}^{nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) &= \tilde{G}^{nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \\ &+ \sum_{n''} \sum_{\eta''} \int_{V^{\eta''}} d\mathbf{r}'' \mathring{G}^{n''n'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \left(\mathring{U}^{n''}(\mathbf{r}'') - \tilde{U}^{n''}(\mathbf{r}'') \right) \tilde{G}^{n''n'}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; E) \end{aligned} \quad (2.74)$$

zerfällt unter Verwendung von Gleichung (2.70) sowohl für die Greensche Funktion zum Hamilton-Operator \mathring{H} und dem analogen Lösungsansatzes als auch für die Greensche Funktion um Hamilton-Operator \tilde{H} einerseits in eine Dyson-Gleichung für die Greensche Funktion der Einfachstreuung

$$\begin{aligned} \mathring{G}_{\text{ES}}^{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) &= \tilde{G}_{\text{ES}}^{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \\ &+ \int_{V^{\eta''}} d\mathbf{r}'' \tilde{G}_{\text{ES}}^{n''n}(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; E) \left(\mathring{U}^{n''}(\mathbf{r}'') - \tilde{U}^{n''}(\mathbf{r}'') \right) \mathring{G}_{\text{ES}}^{n''n}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; E) \end{aligned} \quad (2.75)$$

und andererseits in eine algebraische Dyson-Gleichung für die strukturelle Greensche Funktion

$$\begin{aligned} \mathring{G}_{\text{QQ}'}^{nn'}(E) &= \tilde{G}_{\text{QQ}'}^{nn'}(E) \\ &+ \sum_{n''} \sum_{\eta''} \sum_{Q''Q'''} \tilde{G}_{\text{QQ}''}^{n''n'}(E) \left(\mathring{t}_{Q''Q'''}^{n''}(\mathbf{r}'') - \tilde{t}_{Q''Q'''}^{n''}(\mathbf{r}'') \right) \mathring{G}_{\text{QQ}''}^{n''n'}(E). \end{aligned} \quad (2.76)$$

Die Dyson-Gleichung der Vielfachstreuung in Gleichung (2.76) enthält im Gegensatz zur Dyson-Gleichung für die Einfachstreuung in Gleichung (2.75) nicht die Potentialdifferenz $\Delta U := \mathring{U} - \tilde{U}$, sondern die Differenz der t -Matrizen $\Delta t := \mathring{t} - \tilde{t}$. Hierbei gilt

$$\mathring{t}_{\text{QQ}'}^n(E) := \int_{V^{\eta}} d\mathbf{r} \left(\mathring{r}_Q^n(\mathbf{r}; E) \right)^\times \mathring{U}^n(\mathbf{r}) \mathring{R}_{Q'}^n(\mathbf{r}; E) \quad (2.77)$$

und

$$\tilde{t}_{\text{QQ}'}^n(E) := \int_{V^{\eta}} d\mathbf{r} \left(\mathring{r}_Q^n(\mathbf{r}; E) \right)^\times \tilde{U}^n(\mathbf{r}) \tilde{R}_{Q'}^n(\mathbf{r}; E), \quad (2.78)$$

wobei \mathring{r}_Q^n die linear unabhängigen Lösungen des Hamilton-Operator freier Elektronen $\mathring{h}(\mathbf{r})$ darstellen. Für die Lösung der Dyson-Gleichung für die strukturelle Greensche

Funktion bietet es sich an, die Translationsinvarianz des Idealkristalls $\overset{\circ}{S}$ zu nutzen. Das Referenzsystem \tilde{S} soll ebenfalls die Translationsinvarianz des Idealkristalls aufweisen.

Die strukturellen Greensche Funktionen beider Systeme $\overset{\circ}{G}_{QQ'}^{nn'}$ und $\tilde{G}_{QQ'}^{nn'}$ hängen somit nur vom Differenzvektor $\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'}$ ab. Die strukturelle Greensche Funktion $\overset{\circ}{G}_{QQ'}^{nn'}$ kann entsprechend

$$\overset{\circ}{G}_{QQ'}^{nn'}(E) = \sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})) \overset{\circ}{G}_{QQ'}^{nn'}(\mathbf{k}; E) \quad (2.79)$$

durch ihre Fourier-Transformierte

$$\overset{\circ}{G}_{QQ'}^{nn'}(\mathbf{k}; E) = \sum_{n'} \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{n'})) \overset{\circ}{G}_{QQ'}^{nn'}(E) \quad (2.80)$$

dargestellt werden. Gleiches gilt für $\tilde{G}_{QQ'}^{nn'}$. Unter Verwendung von Gleichungen (2.79) und (2.80) transformiert sich die algebraische Dyson-Gleichung aus Gleichung (2.76) zu

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{G}_{QQ'}^{nn'}(\mathbf{k}; E) &= \tilde{G}_{QQ'}^{nn'}(\mathbf{k}; E) \\ &+ \sum_{\eta''} \sum_{Q''} \sum_{Q'''} \tilde{G}_{QQ''}^{\eta''}(\mathbf{k}; E) \left(\overset{\circ}{t}_{Q''Q'''}^{\eta''}(E) - \tilde{t}_{Q''Q'''}^{\eta''}(E) \right) \overset{\circ}{G}_{Q''Q'}^{\eta''}(\mathbf{k}; E). \end{aligned} \quad (2.81)$$

Eine explizite Darstellung der strukturellen Greenschen Funktion $\overset{\circ}{G}_{QQ'}^{nn'}(\mathbf{k}; E)$ ist unter Verwendung der KKR-Matrix

$$\overset{\circ}{M}_{QQ'}^{nn'}(\mathbf{k}; E) := \tilde{G}_{QQ'}^{nn'}(\mathbf{k}; E) - \left[\left(\overset{\circ}{t}(E) - \tilde{t}(E) \right)^{-1} \right]_{QQ''}^{\eta} \quad (2.82)$$

durch

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{G}_{QQ'}^{nn'}(\mathbf{k}; E) &= -\delta_{QQ'} \delta_{\eta\eta'} \left[\left(\overset{\circ}{t}(E) - \tilde{t}(E) \right)^{-1} \right]_{Q}^{\eta} \\ &- \sum_{Q''Q'''} \left[\left(\overset{\circ}{t}(E) - \tilde{t}(E) \right)^{-1} \right]_{QQ''}^{\eta} \left[\tilde{M}^{-1}(\mathbf{k}; E) \right]_{Q''Q'''}^{\eta\eta'} \left[\left(\overset{\circ}{t}(E) - \tilde{t}(E) \right)^{-1} \right]_{Q''Q'}^{\eta} \end{aligned} \quad (2.83)$$

möglich [113]. Die strukturelle Greensche Funktion in Ortsdarstellung kann schließlich durch die inverse Fourier-Transformation aus Gleichung (2.79) bestimmt werden. Hervorzubeden ist, dass die KKR-Matrix nicht eindeutig durch das physikalische System bestimmt ist, sondern von dem verwendeten Referenzsystem abhängt. Untersuchungen über die Abhängigkeit von dem verwendeten Referenzsystem finden sich sowohl in der Dissertation als auch in der Habilitation von Peter Zahn [117, 118].

2.1.3.3.2 Eigenfunktionen des Idealkristalls

Die Eigenfunktionen zum Hamilton-Operator \hat{H} lassen sich entsprechend der Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{kvs}^n(\mathbf{r}; E) &= \tilde{\psi}_{kvs}^n(\mathbf{r}; E) \\ &+ \sum_{n'} \sum_{\eta'} \int_{V^{\eta'}} d\mathbf{r}' \tilde{G}^{\eta n'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \left(\hat{U}^{\eta'}(\mathbf{r}') - \tilde{U}^{\eta'}(\mathbf{r}') \right) \hat{\psi}_{kvs}^{\eta'}(\mathbf{r}'; E) \end{aligned} \quad (2.84)$$

ausgehend von den Eigenfunktionen und der Greenschen Funktion des Hamilton-Operators des Referenzsystems \tilde{H} und der Potentialdifferenz $\hat{U} - \tilde{U}$ zwischen dem physikalischen System und dem Referenzsystem bestimmen. Ferner lassen sich die Eigenfunktionen nach den linear unabhängigen Lösungen für den Idealkristall

$$\hat{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) = \hat{\psi}_{kvs}^n(\mathbf{r}; E) = \frac{1}{\sqrt{\mathfrak{V}}} \sum_Q \hat{C}_Q^n(\mathbf{k}vs; E) \hat{R}_Q^n(\mathbf{r}; E) \quad (2.85)$$

und für das Referenzsystem

$$\tilde{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) = \tilde{\psi}_{kvs}^n(\mathbf{r}; E) = \frac{1}{\sqrt{\mathfrak{V}}} \sum_Q \tilde{C}_Q^n(\mathbf{k}vs; E) \tilde{R}_Q^n(\mathbf{r}; E) \quad (2.86)$$

mit

$$\hat{C}_Q^n(\mathbf{k}vs; E) := \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) \hat{C}_Q^n(\mathbf{k}vs; E) \quad (2.87)$$

und

$$\tilde{C}_Q^n(\mathbf{k}vs; E) := \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) \tilde{C}_Q^n(\mathbf{k}vs; E) \quad (2.88)$$

entwickeln. Die Wellenfunktion sind auf das Volumen der Probe $\mathfrak{V} = \sum_n \sum_{\eta} V^{\eta}$ normiert. Unter Verwendung der Entwicklung der Wellenfunktion nach den linear unabhängigen Lösungen der Einfachstreuung entsprechend Gleichungen (2.85) und (2.86) transformiert sich die Lippmann-Schwinger-Gleichung aus Gleichung (2.84) von einer Integralgleichung in ein lineares Gleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten \hat{C}_Q^n

$$\begin{aligned} \hat{C}_Q^n(\mathbf{k}vs; E) &= \tilde{C}_Q^n(\mathbf{k}vs; E) \\ &+ \sum_{n'} \sum_{\eta'} \sum_{Q'Q''} \tilde{G}_{QQ''}^{\eta n'}(E) \left(\hat{t}_{Q''Q'}^{\eta'}(E) - \tilde{t}_{Q''Q'}^{\eta'}(E) \right) \hat{C}_{Q'}^{\eta'}(\mathbf{k}vs; E), \end{aligned} \quad (2.89)$$

das ferner unter Verwendung von Gleichungen (2.80), (2.87) und (2.88) in

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{C}_Q^\eta(\mathbf{k}vs; E) &= \tilde{C}_Q^\eta(\mathbf{k}vs; E) \\ &+ \sum_{\eta'} \sum_{Q'Q''} \tilde{G}_{QQ''}^{\eta\eta'}(\mathbf{k}; E) \left(\overset{\circ}{t}_{Q''Q'}^{\eta'}(E) - \tilde{t}_{Q''Q'}^{\eta'}(E) \right) \overset{\circ}{C}_{Q'}^{\eta'}(\mathbf{k}vs; E) \end{aligned} \quad (2.90)$$

übergeht. Das Referenzsystem \tilde{S} wird so gewählt, dass es im relevanten Energiebereich des physikalischen System S keine Energieeigenzustände hat. Dementsprechend besitzt das Referenzsystem keine propagierenden Zustände in diesem Energieintervall und die entsprechenden Entwicklungskoeffizienten $\tilde{C}_Q^\eta(\mathbf{k}vs; E)$ sind Null. Somit reduziert sich die Lippmann-Schwinger-Gleichung für die Entwicklungskoeffizienten $\overset{\circ}{C}_Q^\eta$ aus Gleichung (2.90) zu

$$\overset{\circ}{C}_Q^\eta(\mathbf{k}vs; E) = \sum_{\eta'} \sum_{Q'Q''} \tilde{G}_{QQ''}^{\eta\eta'}(\mathbf{k}; E) \left(\overset{\circ}{t}_{Q''Q'}^{\eta'}(E) - \tilde{t}_{Q''Q'}^{\eta'}(E) \right) \overset{\circ}{C}_{Q'}^{\eta'}(\mathbf{k}vs; E) \quad (2.91)$$

beziehungsweise in Matrix-Schreibweise

$$\overset{\circ}{C}(\mathbf{k}vs; E) = \tilde{G}(\mathbf{k}; E) \left(\overset{\circ}{t}(E) - \tilde{t}(E) \right) \overset{\circ}{C}(\mathbf{k}; E). \quad (2.92)$$

Unter Verwendung von Gleichung (2.82) lässt sich Gleichung (2.92) zu

$$0 = \overset{\circ}{M}(\mathbf{k}; E) \left(\overset{\circ}{t}(E) - \tilde{t}(E) \right) \overset{\circ}{C}(\mathbf{k}; E) \quad (2.93)$$

umschreiben, sodass nicht-triviale Lösungen ausschließlich für

$$\det \overset{\circ}{M}(\mathbf{k}; E) = 0 \quad (2.94)$$

existieren. Voraussetzung ist $\det \left(\overset{\circ}{t}(E) - \tilde{t}(E) \right) \neq 0$.

2.1.3.3 Greensche Funktion des Defektsystems

Der substitutionelle Defekt sei entsprechend Abb. 2.1.4 am Ort \mathbf{r}_0 positioniert. Sofern ein unendlich ausgedehntes System betrachtet wird oder ein System mit periodischen Randbedingungen, sind aufgrund der Translationsinvarianz des Idealkristalls Systeme mit substitutionellen Defekten an Ortskoordinaten \mathbf{r}_0 und \mathbf{r}'_0 , die sich $\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0 = \mathbf{R}_n$ lediglich um eine Gittervektor unterscheiden, identisch. Der Hamilton-Operator des Systems S mit substitutionellen Defekt am Ort $\mathbf{r}_0 = \mathbf{R}_{n_0} + \mathbf{r}_{\eta_0}$

$$\mathfrak{H}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) = \overset{\circ}{\mathfrak{H}}(\mathbf{r}) + \left(\mathfrak{U}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) - \overset{\circ}{\mathfrak{U}}(\mathbf{r}) \right) \quad (2.95)$$

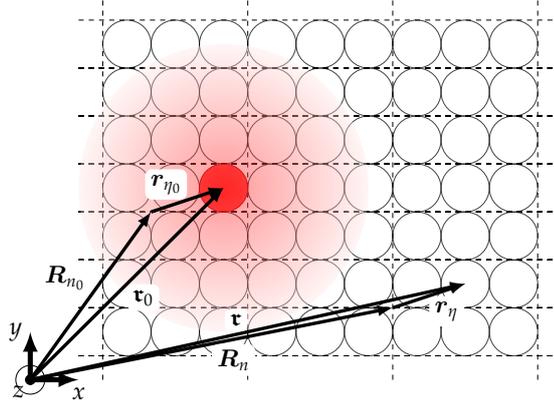


Abbildung 2.1.4.: Periodischer Kristall mit mehratomiger Basis und substitutionellem Defekt am Ort $\mathbf{r}_0 = \mathbf{R}_0 + \mathbf{r}_{\eta_0}$. Durch die Abschirmung der Leitungselektronen beschränkt sich die Potentialänderung auf wenige Schalen um den Defekt.

geht unter Berücksichtigung von zellzentrierten Koordinaten in

$$H^n(\mathbf{r}; \eta_0) = \hat{H}^n(\mathbf{r}) + \left(U^n(\mathbf{r}; \mathbf{R}_{n_0} + \mathbf{r}_{\eta_0}) - \hat{U}^n(\mathbf{r}) \right) \quad (2.96)$$

über. Aufgrund der Translationsinvarianz des ungestörten Systems kann man ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\mathbf{R}_{n_0} = \mathbf{R}_0 = 0$ wählen. Damit charakterisiert die Abkürzung η_0 in eindeutiger Weise die Position des Defektes. Im Rahmen der Methode der Greenschen Funktion kann nun über die Dyson-Gleichung

$$G^{nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta_0; E) = \hat{G}^{nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) + \sum_{n''} \sum_{\eta''} \int_{V^{\eta''}} d\mathbf{r}'' \hat{G}^{nn''}(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; E) \left(U^{\eta''}(\mathbf{r}''; \eta_0) - \hat{U}^{\eta''}(\mathbf{r}'') \right) G^{\eta''n'}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; \eta_0; E) \quad (2.97)$$

die Greensche Funktion des gestörten Systems über die Greensche Funktion des ungestörten Systems \hat{G} und der Potentialdifferenz $U - \hat{U}$ bestimmt werden. Die Zerlegung der Greenschen Funktion in einen Anteil der Einfachstreuung und einen Anteil der Vielfachstreuung entsprechend Gleichung (2.70) ist sowohl für die Greensche Funktion der ungestörten Systems \hat{G} als auch für die des Defektsystems G möglich. Unter Verwendung dieser beider Darstellungen ist die Dyson-Gleichung für die Streuung an einem einzelnen Defekt durch

$$G_{\text{ES}}^{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \eta_0; E) = \hat{G}_{\text{ES}}^{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) + \int_{V^{\eta''}} d\mathbf{r}'' \hat{G}_{\text{ES}}^{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; E) \left(U^{\eta''}(\mathbf{r}''; \eta_0) - \hat{U}^{\eta''}(\mathbf{r}'') \right) G_{\text{ES}}^{\eta''n}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; \eta_0; E) \quad (2.98)$$

gegeben, während

$$G_{QQ'}^{\eta\eta'}(\eta_0; E) = \overset{\circ}{G}_{QQ'}^{\eta\eta'}(E) + \sum_{n''} \sum_{\eta''} \sum_{Q''Q'''} \overset{\circ}{G}_{QQ''}^{\eta\eta''}(E) \left(t_{Q''Q'''}^{\eta''}(\eta_0; E) - \overset{\circ}{t}_{Q''Q'''}^{\eta''}(E) \right) G_{Q''Q'''}^{\eta''\eta'}(\eta_0; E) \quad (2.99)$$

die Dyson-Gleichung für den Beitrag der Vielfachstreuung darstellt. Da durch den substitutionellen Defekt wird die Translationsinvarianz gebrochen wird, wird Gleichung (2.99) im Gegensatz zu Gleichung (2.76) nicht im reziproken Raum sondern im Realraum gelöst.

2.1.3.3.4 Eigenfunktionen des Defektsystems

Ähnlich zu den Eigenfunktion des Idealkristalls in Gleichung (2.85) lassen sich auch die Eigenfunktionen des Defektsystems nach den regulären Lösungen zu einem isolierten Defektpotential U entsprechend

$$\psi_{kvs}^{\eta}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_{\eta_0}; E) = \frac{1}{\sqrt{\mathfrak{V}}} \sum_Q C_Q^{\eta}(\mathbf{r}_{\eta_0}; kvs; E) R_Q^{\eta}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_{\eta_0}; E) \quad (2.100)$$

entwickeln. Unter Verwendung der Lippmann-Schwinger-Gleichung

$$\psi_{kvs}^{\eta}(\mathbf{r}; \eta_0; E) = \overset{\circ}{\psi}_{kvs}^{\eta}(\mathbf{r}; E) + \sum_{n'} \sum_{\eta'} \int_{V\eta'} \overset{\circ}{G}_{Q''}^{\eta\eta'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \left(U^{\eta}(\mathbf{r}; \eta_0) - \overset{\circ}{U}^{\eta}(\mathbf{r}) \right) \psi_{kvs}^{\eta'}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_{\eta_0}; E) \quad (2.101)$$

und der Entwicklungen in Gleichungen (2.85) und (2.100) transformiert sich Gleichung (2.101) zu

$$C_Q^{\eta}(kvs; \eta_0; E) = \overset{\circ}{C}_Q^{\eta}(kvs; E) + \sum_{n'} \sum_{\eta'} \sum_{Q''Q'''} \overset{\circ}{G}_{QQ''}^{\eta\eta''}(E) \left(t_{Q''Q'''}^{\eta''}(\eta_0; E) - \overset{\circ}{t}_{Q''Q'''}^{\eta''}(E) \right) C_{Q''}^{\eta'}(kvs; \eta_0; E), \quad (2.102)$$

und stellt somit die Lippmann-Schwinger-Gleichung für die Entwicklungskoeffizienten $\overset{\circ}{C}$ und C dar.

2.1.3.3.5 Screened KKR

Im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie stellt die elektronische Dichte $n(\mathbf{r})$ die zentrale Größe dar, die im Rahmen der Methode der Greenschen Funktion entsprechend Gleichung (2.43) als Imaginärteil der Greenschen Funktion bestimmt wird. Bei Kenntnis

einer Greenschen Funktion des Referenzsystems und der Potentialdifferenz zwischen physikalischem und Referenzsystem kann die Greensche Funktion des physikalischen Systems über die Dyson-Gleichung bestimmt werden. Entsprechend stellt sich die Frage nach einem geeignetem Referenzsystem. Naheliegender ist es als Referenzsystem das System des freien Raumes mit Hamilton-Operator \hat{h} , d.h. mit $\tilde{U} \equiv 0$, zu verwenden, da dessen zugehörige Greensche Funktion \hat{g} sowohl im nichtrelativistischen Fall als auch im relativistischen Fall analytisch bekannt ist [101]. Der Nachteil der Greenschen Funktion freier Elektronen ist, dass diese für $E > 0$ nur mit $1/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ bzw. die zugehörige strukturelle Greensche Funktion nur mit $1/|\mathbf{R}_n-\mathbf{R}'_n|$ abklingt [56]. Aufgrund dieses Abklingverhaltens konvergiert die Fourier-Transformation der strukturellen Greenschen Funktion nur bedingt und es sind im Allgemeinen aufwendigere Verfahren wie die Ewald-Summationen zur Bestimmung der Fourier-Transformierten der strukturellen Greenschen Funktion notwendig. Aus diesem Grund wählt man als Referenzsystem ein System mit konstantem repulsiven Potential, das die gleiche Symmetrie wie das physikalische System besitzt und dessen Energieeigenzustände außerhalb des relevanten Energiebereiches des physikalischen Systems liegen. Die zugehörige strukturelle Greensche Funktion dieses Referenzsystems klingt für $|\mathbf{R}_n - \mathbf{R}'_n| \rightarrow \infty$ exponentiell ab. Somit werden diese Strukturkonstanten auch als abgeschirmte (engl. *screened*) Strukturkonstanten bezeichnet und die Methode der Greenschen Funktion nach Korringa, Kohn, und Rostoker (KKR) mit einem repulsiven Potential als *Screened KKR* bezeichnet [111, 119, 120]. Details finden sich unter anderem in der Dissertation von Peter Zahn [117].

2.1.3.4. Fermi-Fläche

Die Fermi-Energie E_F trennt in metallischen Festkörpern am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ K die besetzten Zustände von den unbesetzten Zuständen. Sämtliche Zustände sind durch Wellenvektor \mathbf{k} , Bandindex ν , und Spin s charakterisiert. Der Grundzustand ist der Zustand minimaler Energie, sodass für die besetzten Zustände $E_{\nu s}(\mathbf{k}) \leq E_F$ und für die unbesetzten Zustände $E_{\nu s}(\mathbf{k}) > E_F$ gilt. Die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion $f^0(E, T)$ reduziert sich auf Gleichung (2.44). Die zur Fermi-Energie gehörige Isoenergiefläche ist durch

$$S_F := \{\mathbf{k} \in V_{\text{BZ}} \mid E_{\nu s}(\mathbf{k}) = E_F\} \quad (2.103)$$

definiert. Lediglich die Zustände an der Fermi-Energie können infinitesimale Energien aufnehmen und tragen bei Störung des System durch ein äußeres elektrisches Feld zu Transportgrößen wie die elektrische Stromdichte oder Spin-Stromdichte bei. Aus diesem Grund stellt die Fermi-Fläche eine besondere Isoenergiefläche dar. Die Fermi-Energie selbst wurde aus der Forderung nach Ladungsneutralität entsprechend Gleichung (2.45) bestimmt. Das Verfahren zur Bestimmung der Fermi-Fläche bzw. zu einer beliebigen Isoenergiefläche ist im Detail in den Dissertationen von Peter Zahn [117], Jörg Binder [110], und Martin Gradhand [113] beschrieben. Hier seien nur die Grundzüge erläutert. Zur Bestimmung der Fermi-Fläche innerhalb der ersten Brillouin-Zone wird diese mit disjunkten raumausfüllenden Tetraedern gefüllt. Bei hinreichend kleinen Tetraedern schneidet die Fermi-Fläche den Tetraeder entweder in keiner Kante oder in

drei Kanten oder in vier Kanten. Die Schnittpunkte der Tetraeder mit der Fermi-Fläche werden unter Verwendung eines Intervallhalbierungsverfahren bestimmt, für die die Bedingung aus Gleichung (2.94) erfüllt ist.

2.1.3.5. Quantenmechanische Erwartungswerte

In der semiklassischen Beschreibung wird die makroskopische Observable $A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ als Antwort auf ein beliebiges äußeres Feld K durch

$$A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(K(\mathbf{r}, t)) = \sum_{kvs} \overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t)) \quad (2.104)$$

gegeben, wobei $\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})$ den quantenmechanischen Erwartungswert des Zustandes $\overset{\circ}{\psi}_{kvs}$ entsprechend

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) &:= \int_{\mathfrak{V}} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) \overset{\circ}{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \\ &= \frac{1}{V_{EZ}} \sum_{\eta} \sum_{QQ'} \left(\overset{\circ}{C}_Q^{\eta}(\mathbf{kvs}; E) \right)^* \overset{\circ}{C}_{Q'}^{\eta}(\mathbf{kvs}; E) \\ &\quad \cdot \int_{V^{\eta}} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{R}_Q^{\eta}(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) \overset{\circ}{R}_{Q'}^{\eta}(\mathbf{r}; E) \end{aligned} \quad (2.105)$$

darstellt. Hierbei bezeichnen $\mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r})$ und $\overset{\circ}{\mathcal{A}}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r})$ den zugehörigen Operator in globalen bzw. in zellzentrierten Koordinaten. Die Bestimmung der Verteilungsfunktion f unter dem Einfluss eines äußeren Feldes K wird in Abschnitt 2.2.1 beschrieben. Als Antwortgrößen werden wie in der Einleitung beschrieben die elektrische Stromdichte, die Spin-Stromdichte, die induzierte Spin-Dichte, und der Spin-Orbit-Torque betrachtet. Die Bestimmung der zugehörigen Erwartungswerte erfolgt entsprechend Gleichung (2.104) wie nachfolgend dargestellt.

2.1.3.5.1 Elektrische Stromdichte

Der Operator der elektrischen Stromdichte ist in der relativistischen Quantenmechanik durch

$$\mathcal{A}^{\alpha} := \mathcal{J}^{\alpha} = -\frac{e}{\mathfrak{V}} v^{\alpha} \quad (2.106)$$

wobei v^{α} den relativistischen Geschwindigkeitsoperator mit $v^{\alpha} := c\alpha^{\alpha}$ darstellt [121]. Hierbei sind α^{α} die entsprechenden Dirac-Matrizen aus Gleichung (2.23). Der Erwartungswert der elektrischen Stromdichte ist somit durch

$$\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) = J_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) = -\frac{e}{\mathfrak{V}} v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \quad (2.107)$$

gegeben. Der für den Tensor der elektrischen Leitfähigkeit notwendige Erwartungswert der elektrischen Stromdichte lässt sich somit auf den Erwartungswert der Geschwindigkeit zurückführen. Bestimmt man jedoch den Erwartungswert der Geschwindigkeit über die Diracschen α -Matrizen unter Verwendung von Gleichung (2.105), so zeigt sich, dass diese im Rahmen der verwendeten Atomic-Sphere-Approximation nicht gut geeignet ist [121]. Eine alternative Möglichkeit besteht darin, den Erwartungswert der Geschwindigkeit direkt über

$$v_{vs}^\alpha(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{vs}(\mathbf{k})}{\partial k_\alpha} \quad (2.108)$$

als Gradient der Energiedispersionsrelation $E_{vs}(\mathbf{k})$ zu bestimmen [121, 122]. Numerisch wird die Geschwindigkeit durch lineare Interpolation zwischen zwei benachbarten Isoenergieflächen bestimmt, wobei eine dieser Flächen die Fermi-Fläche darstellt. Zu diesem Zweck werden Fermi-Fläche ferner die folgenden Isoenergieflächen

$$S_F^\pm := \{\mathbf{k} \in V_{\text{BZ}} \mid E_{vs}(\mathbf{k}) = E_F \pm \Delta E\} \quad (2.109)$$

mit $0 < \Delta E \ll |E_F|$ bestimmt. In den numerischen Rechnungen wird $\Delta E = 10^{-7} \text{ Ry} \approx 13.6 \cdot 10^{-7} \text{ eV}$ verwendet, wobei die Fermi-Energie E_F zum Vergleich in der Größenordnung von einigen Elektronenvolt ist. Zur Bestimmung der Isoenergieflächen wird die Brillouin-Zone mit nichtüberlappenden Tetraeder vollständig ausgefüllt [123]. Man betrachtet einen beliebigen Tetraeder, der sowohl von der Fermi-Fläche S_F als auch (ohne Beschränkung der Allgemeinheit) von der Isoenergiefläche S_F^+ geschnitten wird. Für die Beschreibung hier wird vereinfachend angenommen, dass die Isoenergieflächen den Tetraeder T lediglich in drei verschiedenen Kanten schneiden, sodass für jede Isoenergiefläche die Schnittfläche näherungsweise durch ein Dreieck beschrieben wird. Die Isoenergieflächen S_F , S_F^+ , und S_F^- schneiden die Kanten des Tetraeders in den Punkten k_1, k_2, k_3 bzw. k_1^+, k_2^+, k_3^+ bzw. k_1^-, k_2^-, k_3^- . In der Regel wird nicht die Differenz zwischen S_F^+ und S_F^- genommen, sondern zwischen S_F und S_F^+ . Erst wenn S_F^+ keine Schnittfläche mit dem Tetraeder hat, wird auf S_F^- zurückgegriffen. Die Geschwindigkeit v ergibt sich somit durch Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\Delta E = \hbar v \cdot (\mathbf{k}_1^s - \mathbf{k}_1), \quad \Delta E = \hbar v \cdot (\mathbf{k}_2^s - \mathbf{k}_2), \quad \Delta E = \hbar v \cdot (\mathbf{k}_3^s - \mathbf{k}_3) \quad (2.110)$$

mit im Allgemeinen $s = +$. Ausführlichere Ausführungen finden sich in den Dissertation von Peter Zahn [117], Jörg Binder [110], und Martin Gradhand [113].

Neben der Geschwindigkeit werden ferner der Schwerpunkt des Dreiecks und der Flächeninhalt des Dreiecks mittels elementarer Geometrie bestimmt. Schneidet die Fermi-Fläche den Tetraeder nun in vier Kanten, so ist die entstehende Fläche ein Viereck. Dies ist im Allgemeinen nicht koplanar und das lineare Gleichungssystem Gleichung (2.110) ist im Allgemeinen überbestimmt. Stattdessen betrachtet man die vier Dreiecke, die sich durch die zwei möglichen Zerlegungen des Vierecks in jeweils zwei Dreiecke ergeben. Die vier verschiedenen Dreiecke werden jeweils einzeln betrachtet, d.h. es werden Flächeninhalt, Schwerpunkt und Geschwindigkeit bestimmt. Die entsprechenden Größen

für das Viereck ergeben sich als gewichtete Mittelwerte über die entsprechenden Größen der vier Dreiecke. Details finden sich in Anhang K. Anstelle der linearen Interpolation zur Bestimmung der Geschwindigkeit wurde von Martin Gradhand im Rahmen seiner Dissertation [113, 121] eine alternative Methode implementiert. Hierbei kann auf eine lineare Interpolation im reziproken Raum verzichtet werden und er nutzt die Eigenschaften der KKR-Matrix. Für Details sei auf [113, 121] verwiesen.

2.1.3.5.2 Spin-Dichte

Sowohl zur Beschreibung des Spin-Hall-Effektes als auch zur Beschreibung des Edelstein-Effektes ist die Bestimmung der quantenmechanischen Erwartungswertes des Spins notwendig. Im Hamilton-Operator in Gleichung (2.25) beschreibt $\mathfrak{H}_{\mathfrak{B}}(\mathbf{r}) := \beta \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathfrak{B}(\mathbf{r})$ die Wechselwirkungsenergie zwischen dem Spin des Elektrons und dem magnetischen Feld, sodass der relativistische Spin-Operator durch Gleichung (2.28) gegeben ist [101]. Anstelle des dimensionsbehafteten Spin-Operator \mathcal{S}' wird im Rahmen dieser Arbeit stets der dimensionslose Spin-Operator \mathcal{S} verwendet, sodass

$$\mathcal{A}^\alpha := \frac{1}{\mathfrak{V}} \mathcal{S}^\alpha = \frac{1}{\mathfrak{V}} \beta \Sigma^\alpha \quad (2.111)$$

gilt, wobei dieser auf das Kristallvolumen \mathfrak{V} normiert ist. Der Erwartungswert des Spin wird unter Verwendung von Gleichung (2.111) über Gleichung (2.105) zu

$$\mathring{A}_{vs}^\alpha(\mathbf{k}) = \frac{1}{\mathfrak{V}} S_{vs}^\alpha(\mathbf{k}) \quad (2.112)$$

bestimmt. Zu beachten ist, dass der Spin-Operator weder mit dem freien Dirac-Hamilton-Operator aus Gleichung (2.22) noch mit dem Dirac-Hamilton-Operator aus Gleichung (2.25) vertauscht und somit der Spin-Erwartungswert keine Erhaltungsgröße darstellt. Eine Übersicht über relativistische Spin-Operatoren sind in [124, 125] gegeben. Im Allgemeinen werden in dieser Arbeit magnetische Systeme betrachtet, d.h. Systeme in denen die Zeitumkehr, beschrieben durch den Operator \mathcal{T} , nicht als einzelne Symmetrie vorkommt. Zum Vergleich von Transporteigenschaften von ferromagnetisch/nichtmagnetischen Vielfachschichten werden insbesondere auch nichtmagnetischen Systeme herangezogen. Diese besitzen Zeitumkehr als eigenständige Symmetrie und liegt darüber hinaus noch Rauminversionssymmetrie (Operator \mathcal{I}) vor, so sind entsprechend

$$E_{vs}(\mathbf{k}) = R(\mathcal{I})E_{vs}(\mathbf{k}) = E_{vs}(-\mathbf{k}) = R(\mathcal{T})E_{vs}(-\mathbf{k}) = E_{v-s}(\mathbf{k}) \quad (2.113)$$

die Zustände kv_s und kv_{-s} entartet, d.h. der Zustand kv ist zweifach entartet. In diesem Fall stellen $\mathring{\psi}_{kv_s}$ und $\mathring{\psi}_{kv_{-s}}$ zwei linear unabhängige Lösungen dar, sodass jede Linearkombination der beiden Lösungen wieder eine Lösung der Kohn-Sham-Dirac-Gleichung ist. Aus diesem Grund besteht eine gewisse Freiheit bei der Bestimmung des Spin-Erwartungswertes. Die Spin-Quantisierungsachse sei in γ -Richtung orientiert.

Seien $\overset{\circ}{\psi}'_{kvs}$ und $\overset{\circ}{\psi}'_{kv-s}$ zwei linear unabhängige Lösungen zum Energieeigenwert $E_{vs}(\mathbf{k})$, dann werden die Koeffizienten $c_{ss}, c_{s-s}, c_{-ss},$ und c_{-s-s} des linearen Gleichungssystems

$$\overset{\circ}{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}) = c_{ss}\overset{\circ}{\psi}'_{kvs}(\mathbf{r}) + c_{s-s}\overset{\circ}{\psi}'_{kv-s}(\mathbf{r}) \quad (2.114)$$

$$\overset{\circ}{\psi}_{kv-s}(\mathbf{r}) = c_{-ss}\overset{\circ}{\psi}'_{kvs}(\mathbf{r}) + c_{-s-s}\overset{\circ}{\psi}'_{kv-s}(\mathbf{r}) \quad (2.115)$$

so bestimmt, dass die Lösungen $\overset{\circ}{\psi}_{kvs}$ und $\overset{\circ}{\psi}_{kv-s}$ den Bedingungen

$$S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k}) = -S_{v-s}^{\gamma}(\mathbf{k}) \geq 0 \quad \text{und} \quad \int_{\mathfrak{R}^3} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{\psi}_{kv-s}(\mathbf{r}) \right)^{\dagger} \mathcal{S}^{\gamma} \overset{\circ}{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.116)$$

mit $S_{v\pm s}^{\gamma}(\mathbf{k}) = \int_{\mathfrak{R}^3} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{\psi}_{kv\pm s}(\mathbf{r}) \right)^{\dagger} \mathcal{S}^{\gamma} \overset{\circ}{\psi}_{kv\pm s}(\mathbf{r})$ genügen. Für die explizite Form der Koeffizienten sei hierbei auf die Dissertation von Martin Gradhand [113], die Diplom-Arbeit von Falko Pientka [126], und auf [127, 128] verwiesen. Hierbei ist hervorzuheben, dass bei dieser Eichung gegeben durch Gleichung (2.116) der Wellenfunktion im Allgemeinen die Komponenten des Spin-Erwartungswertes, in denen zu $\hat{\gamma}$ orthogonalen Richtungen von Null verschieden sind. So sind bei Wahl $\gamma := z$ die Komponenten des Spin-Erwartungswertes $S_{vs}^x(\mathbf{k})$ und $S_{vs}^y(\mathbf{k})$ im Allgemeinen von Null verschieden. In [126–128] werden alternative Möglichkeiten der Eichung dargestellt und analysiert. In magnetischen Systemen, d.h. in Systemen mit gebrochener Zeitumkehrsymmetrie sind die Zustände im Allgemeinen nicht entartet, sodass es im Allgemeinen auch nur eine linear unabhängige Lösung ψ_{kvs} gibt. Dementsprechend gilt bereits $\psi_{kvs} = \psi'_{kvs}$.

2.1.3.5.3 Spin-Stromdichte

Die gewöhnliche Definition des Operator der Spin-Stromdichte [13]

$$\mathcal{A}^{\alpha_1\alpha_2} := 1/2 [\mathcal{S}^{\alpha_1}, \mathcal{J}^{\alpha_2}]_{+} = 1/2 (\mathcal{S}^{\alpha_1} \mathcal{J}^{\alpha_2} + \mathcal{J}^{\alpha_2} \mathcal{S}^{\alpha_1}) \quad (2.117)$$

ist durch den Antikommutator von Spin-Operator \mathcal{S}^{α_1} und dem Operator der elektrischen Stromdichte \mathcal{J}^{α_2} gegeben. Unter Verwendung der Näherung $\langle AB \rangle \approx \langle A \rangle \langle B \rangle$ für beliebige Operatoren A, B lässt sich der Erwartungswert des Antikommutators von A und B zu $\langle 1/2 [A, B]_{+} \rangle \approx \langle A \rangle \langle B \rangle$ vereinfachen und stimmt somit mit dem Produkt der Erwartungswerte von A und B überein. Im Rahmen der semiklassischen Beschreibung wird der Erwartungswert des Operator des Spin-Stroms durch das Produkt von Spin-Erwartungswert und Geschwindigkeit, d.h.

$$\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1\alpha_2}(\mathbf{k}) \approx S_{vs}^{\alpha_1}(\mathbf{k}) J_{vs}^{\alpha_2}(\mathbf{k}) \quad (2.118)$$

mit $J_{vs}^{\alpha_2}(\mathbf{k}) = -e/v_{vs}^{\alpha_2}(\mathbf{k})$ dargestellt [51]. Die Geschwindigkeit wird über Gleichung (2.108) bzw. numerisch über Gleichung (2.110) und der Spin-Erwartungswert wird über Gleichung (2.105) unter Berücksichtigung von Gleichung (2.111) berechnet. Es wird $\alpha := \alpha_2$ und $\gamma := \alpha_1$ vereinbart.

2.1.3.5.4 Spin-Orbit-Torque

In der klassischen Elektrodynamik [129] wird auf ein magnetisches Moment \mathbf{m} in einem äußeren magnetischen Feld mit der magnetischen Flussdichte \mathbf{B} ein Drehmoment (engl. *torque*) T der Größe

$$\mathbf{T}(\mathbf{r}, t) := \mathbf{m}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t). \quad (2.119)$$

ausgeübt. In einem Festkörper tragen zum magnetischem Moment der Elektronen \mathbf{m} neben ihrem Spin \mathbf{S} auch der Bahndrehimpuls \mathbf{L} bei, wobei in den betrachteten Systemen der Einfluss des Bahndrehimpulses zum magnetischen Moment vernachlässigt wird [130]. Somit gilt $\mathbf{m}(\mathbf{r}, t) \approx -\gamma_S \mathbf{S}(\mathbf{r}, t)$, wobei $\mathbf{S}(\mathbf{r}, t)$ den Spin darstellt und γ_S das gyromagnetische Verhältnis mit $\gamma_S = g_S \mu_B / \hbar$ und g_S den g -Faktor, der sich für reinen Spin-Magnetismus aus der Dirac-Gleichung zu $g_S = 2$ ergibt [101]. In Analogie zu Gleichung (2.119) wird der Operator für das Drehmoment (engl. *torque*) durch

$$\mathcal{A}^\alpha(\mathbf{r}, t) := \mathcal{T}^\alpha(\mathbf{r}, t) = (\mathcal{M}(\mathbf{r}, t) \times \mathcal{B}(\mathbf{r}, t))_\alpha = (-\gamma_S \mathcal{S}'(\mathbf{r}, t) \times \mathcal{B}(\mathbf{r}, t))_\alpha \quad (2.120)$$

definiert [53, 85, 106, 131]. Hierbei bezeichnet \mathcal{S}' den dimensionsbehafteten Spin-Operator aus Gleichung (2.28) und \mathcal{B} den Operator des magnetischen Feldes. Letzterer ist durch das im Hamilton-Operator aus Gleichung (2.61) enthaltene magnetische Feld mit

$$\mathcal{B}(\mathbf{r}, t) := \mathring{\mathcal{B}}_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \mathring{\mathcal{B}}_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{r}) = \mathring{B}_{\text{eff}}^{\eta n}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{e}}^{\eta n}(\mathbf{r}) \quad (2.121)$$

gegeben [112]. Da kollinearer Magnetismus in den untersuchten Systemen betrachtet wird, gilt $\hat{\mathbf{e}}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{e}}$ und $\hat{\mathbf{e}}^{\eta n}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{e}}$ und $\hat{\mathbf{e}} = \hat{\mathbf{e}}$ [112]. Mit $\mathring{B}^{\eta n}(\mathbf{r}) := -\mu_B \mathring{B}_{\text{eff}}^{\eta n}(\mathbf{r})$ stellt sich somit der Operator dieses Torque aus Gleichung (2.120) mit Gleichungen (2.111) und (2.121) in zellzentrierten Koordinaten durch

$$\mathcal{A}_{\eta n}^{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{T}_{\eta n}^{\alpha}(\mathbf{r}, t) = \left(\beta \boldsymbol{\Sigma} \times \mathring{B}^{\eta n}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{e}} \right)_\alpha \quad (2.122)$$

dar [53, 85]. Der Erwartungswert des Torque ist somit durch

$$\mathring{A}_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\mathfrak{V}} T_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \quad (2.123)$$

gegeben, wobei sich $T_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k})$ über Gleichungen (2.105) und (2.122) bestimmt. Im Allgemeinen ist der Operator des Torque aus Gleichung (2.122) durch das eingehende ortsabhängige magnetische Feld $\mathring{B}^{\eta n}(\mathbf{r})$ ebenfalls ortsabhängig. Approximiert man das magnetische Feld innerhalb der ASA-Kugel des Basisatoms η entsprechend $\mathring{B}^{\eta n}(\mathbf{r}) \approx \mathring{B}^{\eta n}(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r}=0}$ durch ein ortsunabhängiges magnetisches Feld, so ist der Operator des Torque näherungsweise durch

$$\mathcal{T}_{vs}^{\eta n \alpha} \approx \left(\mathcal{S}_{\eta n}^{\alpha}(\mathbf{r}) \times \mathring{B}^{\eta n}(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r}=0} \right)_\alpha \quad (2.124)$$

gegeben. Unter Verwendung von Gleichung (2.124) ergibt sich somit als Erwartungswert für den Torque näherungsweise die Darstellung

$$T_{vs}^{\eta\alpha}(\mathbf{k}) = \int_{V^\eta}^n \left(\overset{\circ}{\psi}^{\eta}(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{T}^{\eta\alpha}(\mathbf{r}) \overset{\circ}{\psi}^{\eta}(\mathbf{r}; E) = \left(\mathbf{S}_{vs}^{\eta}(\mathbf{k}) \times \overset{\circ}{\mathbf{B}}^{\eta}(\mathbf{r}) \Big|_{r=0} \right)_\alpha, \quad (2.125)$$

wobei $S_{vs}^{\eta\alpha}(\mathbf{k}) = \int_{V^\eta}^n \left(\overset{\circ}{\psi}^{\eta}(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{S}^\alpha(\mathbf{r}) \overset{\circ}{\psi}^{\eta}(\mathbf{r}; E)$ verwendet wurde.

2.1.3.6. Übergangswahrscheinlichkeit und Fermis Goldene Regel

Bei tiefen Temperaturen wird der elektronische Transport im Wesentlichen durch die Streuung von Leitungselektronen an Defekten bestimmt. Im Falle von verdünnten Legierungen mit Defektkonzentrationen kleiner als 10 % wird die Wechselwirkung der Defekte untereinander vernachlässigt. Die Streuung eines Leitungselektron an einem Defekt wird durch den Übergang mit dem Übergangsmatrixelement

$$T_{kvs \rightarrow k'v's'}(\mathbf{r}_0) := \int_{\mathfrak{Q}} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{\psi}_{k'v's'}(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \left[\mathfrak{U}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) - \overset{\circ}{\mathfrak{U}}(\mathbf{r}) \right] \psi_{kvs}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) \quad (2.126)$$

charakterisiert [56]. Die zugehörige Übergangswahrscheinlichkeit ist für einen einzelnen Streuprozess über Fermis Goldene Regel durch

$$P'_{kvs \rightarrow k'v's'}(\mathbf{r}_0) := \frac{2\pi}{\hbar} |T_{kvs \rightarrow k'v's'}(\mathbf{r}_0)|^2 \delta(E_{vs}(\mathbf{k}) - E_{v's'}(\mathbf{k})) \quad (2.127)$$

gegeben [61]. Die Delta-Distribution reduziert die Übergänge auf elastische Streuung. Für den Fall von N_0 nicht-wechselwirkenden Defekten im System ist die Übergangswahrscheinlichkeit durch

$$P_{kvs \rightarrow k'v's'}(\mathbf{r}_0) = \frac{2\pi}{\hbar} cN |T_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0)|^2 \delta(E_{vs}(\mathbf{k}) - E_{v's'}(\mathbf{k})) \quad (2.128)$$

gegeben ist, wobei die Anzahl an Defekten N_0 durch das Produkt von Defektkonzentration c und Anzahl an Atomen N innerhalb des Systems ersetzt wurde.

2.2. Elektronischer Transport

Transporteigenschaften wie z. B. die elektrische Leitfähigkeit oder auch der Edelstein-Effekt sind Nichtgleichgewichtseigenschaften in der Regel unter Einwirkung einer äußeren Störung auf das System. Eine vollständig quantenmechanische Beschreibung von Nichtgleichgewichtseigenschaften im Rahmen der linearen Antworttheorie lieferte Kubo im Jahre 1957 [132]. Anstelle des vollständig quantenmechanischen Kubo-Formalismus werden die in dieser Arbeit vorgestellten Transporteigenschaften mittels der semiklassischen Boltzmann-Gleichung beschrieben. Die Boltzmann-Gleichung wurde ursprünglich zur Beschreibung von verdünnten Gasen von Ludwig Boltzmann im Jahre

1872 aufgestellt [133]. Sowohl der Kubo-Formalismus als auch die Beschreibung mittels Boltzmann-Gleichung stellen eine lineare Antworttheorie dar. Eine vollständige quantenmechanische Beschreibung, die über die lineare Antworttheorie hinausgeht, liefert der Keldysh-Formalismus [134, 135]. Hierbei werden Veränderungen der elektronischen Struktur durch die äußere Störung berücksichtigt [136]. Für Details sei ebenfalls auf [135, 136] verwiesen.

2.2.1. Semiklassische Beschreibung

Sei $K(\mathbf{r}, t)$ eine beliebige äußere Kraft die auf das System wirkt, z. B. ein äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, ein äußeres magnetisches Feld $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ oder auch ein Temperaturgradient $\frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}}$. Die makroskopische Größe $A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(K(\mathbf{r}, t))$ wird durch Gleichung (2.104) bestimmt, wobei $\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})$ den Erwartungswert des Zustandes $\overset{\circ}{\psi}_{kvs}$ bzgl. des Operators $\mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ darstellt. Diese werden entsprechend Gleichung (2.105) bestimmt. Die Größe $f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t))$ stellt die Verteilungsfunktion der Elektronen im betrachteten System, d.h. in diesem Fall im Festkörper, dar, die sich unter dem Einfluss äußerer Felder $K(\mathbf{r}, t)$ einstellt. Die Dynamik der Verteilungsfunktion wird durch

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t)) \\ = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t)) \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t)) \cdot \frac{d\mathbf{k}}{dt} + \frac{\partial}{\partial t} f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t)) \\ = \mathcal{I}[\mathbf{r}, \mathbf{k}, t, K(\mathbf{r}, t), f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t))] \end{aligned} \quad (2.129)$$

beschrieben, wobei \mathcal{I} das Streuintegral bezeichnet [61]. Hervorzuheben ist, dass die Elektronen im Festkörper in der semiklassischen Beschreibung nicht durch Bloch-Wellenfunktionen beschrieben, sondern durch aus Bloch-Wellenfunktionen konstruierte Wellenpakete [128]. Die Wellenpakete erstrecken sich über mehrere Einheitszellen. Die Ausdehnung ist jedoch klein gegenüber der charakteristischen Länge der Veränderungen der äußeren Felder [63]. Die Bewegungsgleichungen für ein Wellenpaket unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes \mathbf{E} und eines äußeren magnetischen Feldes \mathbf{B} sind durch

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{vs}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \frac{d\mathbf{k}}{dt} \times \boldsymbol{\Omega}_{vs}(\mathbf{k}) \quad \text{und} \quad \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar} \left[\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \right] \quad (2.130)$$

gegeben [137–139] und stellen ein System gekoppelter Differentialgleichungen dar, wobei eine Entkopplung der Dynamik für den Ortsvektor und Wellenvektor möglich ist [140]. Neben der normalen Gruppengeschwindigkeit tritt in der Bewegungsgleichung für den Ortsvektor ein zusätzlicher Term auf, der die Berry-Curvature $\boldsymbol{\Omega}_{vs}(\mathbf{k})$ des Systems berücksichtigt. Eine anschauliche Beschreibung der Berry-Curvature sowie deren theoretische Beschreibung ist in [109, 113] gegeben. Diese zusätzliche Geschwindigkeit wird anomale Geschwindigkeit genannt, mit der u. A. die intrinsische anomale Hall-Leitfähigkeit wie in Abschnitt 2.2.2 beschrieben werden kann [15, 128]. Dieser Term wird in der Bewegungsgleichung im folgenden nicht weiter berücksichtigt, da in dieser Arbeit

extrinsische Beitrag, im Speziellen der *skew scattering*-Beitrag, untersucht werden und der intrinsische Beitrag nicht betrachtet wird. Außerdem wird der Einfluss eines äußeren magnetischen Feldes nicht betrachtet, sodass sich die entkoppelten Bewegungsgleichungen zu

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{vs}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \quad \text{und} \quad \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \quad (2.131)$$

reduzieren. Um die Verteilungsfunktion $f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t))$ ausgehend von der Boltzmann-Gleichung in Gleichung (2.129) zu bestimmen, ist es notwendig eine adäquate Darstellung für das Streuintegral $\mathcal{I}[\mathbf{r}, \mathbf{k}, t, K(\mathbf{r}, t), f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t))]$ zu finden. Nach Kohn und Luttinger [141] und Sturman [142] ist das Streuintegral $\mathcal{I}[\mathbf{r}, \mathbf{k}, t, f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)]$ für elastische Streuung von Fermionen – in diesem Fall Elektronen – an substitutionellen Defekten durch

$$\begin{aligned} & \mathcal{I}[\mathbf{r}, \mathbf{k}, t, K(\mathbf{r}, t), f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t))] \\ &= \sum_{k'v's'} [P_{k'v's' \rightarrow kvs} f_{v's'}(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t; K(\mathbf{r}, t)) - P_{kvs \rightarrow k'v's'} f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t))] \end{aligned} \quad (2.132)$$

gegeben, wobei $P_{kvs \rightarrow k'v's'}$ über Gleichung (2.128) bestimmt wird. Für den Spezialfall eines äußeren homogenen elektrischen Feldes \mathbf{E} als äußeres Feld $K(\mathbf{r}, t)$ hängt die Verteilungsfunktion weder explizit vom Ort noch von der Zeit ab. Die Boltzmann-Gleichung aus Gleichung (2.129) stellt sich in diesem Fall durch

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} f_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{E}) \cdot \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \mathcal{I}[f_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{E})] \quad (2.133)$$

dar. In dem Fall, dass das äußere elektrische Feld \mathbf{E} verschwindet, ist die Verteilungsfunktion $f_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{E})$ durch die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion

$$f_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{E})|_{\mathbf{E}=0} = f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) = \left[\exp\left(\frac{E_{vs}(\mathbf{k}) - \mu(T)}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (2.134)$$

gegeben. Es sei nun das elektrische Feld \mathbf{E} von Null verschieden. Die mittlere freie Weglänge $\Lambda_{vs}(\mathbf{k})$ kennzeichnet die Strecke, die ein Elektron beschrieben durch ein Wellenpaket zwischen zwei Streuprozessen zurücklegt. Beim Durchlaufen entlang des Weges γ im homogenen äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} bewegt sich das Elektron gegen das elektrische Feld und verrichtet dabei die Arbeit $\Delta W = -e \int_{\gamma} \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r} = -e\mathbf{E} \cdot \int_{\gamma} d\mathbf{r} = -e\mathbf{E} \cdot \Delta \mathbf{s}$. Die verrichtete Arbeit wird der inneren Energie $E_{vs}(\mathbf{k})$ hinzugefügt. Die Strecke zwischen zwei Streuprozessen $\Delta \mathbf{s}$ wird durch die mittlere freie Weglänge $\Lambda_{vs}(\mathbf{k})$ charakterisiert und so ergibt sich für die Verteilungsfunktion unter einem äußeren elektrischen Feld \mathbf{E}

$$f_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{E}) = f^0(E_{vs}(\mathbf{k}) - e\Lambda_{vs}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}), \quad (2.135)$$

wobei f^0 entsprechend durch Gleichung (2.134) definiert ist [61, 109]. Das äußere elektrische Feld \mathbf{E} stellt nur eine kleine Störung des Systems dar, sodass die Änderung

der Verteilungsfunktion unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes E gegenüber der Verteilungsfunktion im Grundzustand aus Gleichung (2.134) gering ist. Somit betrachtet man die Potenzreihenentwicklung von Gleichung (2.135) bis zur ersten Ordnung im äußeren elektrischen Feld E . Unter Verwendung von Gleichungen (2.131), (2.132) und (2.134) und unter Berücksichtigung der Potenzreihenentwicklung von Gleichung (2.135) in erster Ordnung des äußeren elektrischen Feldes E geht Gleichung (2.133) in

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))}{\partial E_{vs}(\mathbf{k})} \frac{\partial E_{vs}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \left(-\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \right) \\ &= \sum_{k'v's'} [P_{k'v's' \rightarrow kvs} f^0(E_{v's'}(\mathbf{k}')) - P_{kvs \rightarrow k'v's'} f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))] \\ & \quad + \sum_{k'v's'} \left[P_{k'v's' \rightarrow kvs} \frac{\partial f^0(E_{v's'}(\mathbf{k}'))}{\partial E_{v's'}(\mathbf{k}')} e \mathbf{\Lambda}_{v's'}(\mathbf{k}') \cdot \mathbf{E} \right. \\ & \quad \left. - P_{kvs \rightarrow k'v's'} \frac{\partial f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))}{\partial E_{vs}(\mathbf{k})} e \mathbf{\Lambda}_{vs}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E} \right] \end{aligned} \quad (2.136)$$

über. Mit Gleichung (2.128) und der Tatsache, dass die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion lediglich von der Energie des Zustandes $E_{vs}(\mathbf{k})$ abhängt, gilt zusammen mit Gleichung (2.108) ferner

$$\begin{aligned} & -e \frac{\partial f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))}{\partial E_{vs}(\mathbf{k})} \mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E} \\ &= \sum_{k'v's'} [P_{k'v's' \rightarrow kvs} - P_{kvs \rightarrow k'v's'}] f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) \\ & \quad + e \frac{\partial f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))}{\partial E_{vs}(\mathbf{k})} \sum_{k'v's'} [P_{k'v's' \rightarrow kvs} \mathbf{\Lambda}_{v's'}(\mathbf{k}') - P_{kvs \rightarrow k'v's'} \mathbf{\Lambda}_{vs}(\mathbf{k})] \cdot \mathbf{E}, \end{aligned} \quad (2.137)$$

was als linearisierte Boltzmann-Gleichung bezeichnet wird. Unter der Annahme, dass für alle Zustände kvs

$$\sum_{k'v's'} [P_{k'v's' \rightarrow kvs} - P_{kvs \rightarrow k'v's'}] f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) = 0 \quad (2.138)$$

gilt [143], und unter Verwendung der anisotropen Relaxationszeit $\tau_{vs}(\mathbf{k})$, die durch

$$\tau_{vs}^{-1}(\mathbf{k}) := \sum_{k'v's'} P_{kvs \rightarrow k'v's'} \quad (2.139)$$

definiert ist, stellt sich Gleichung (2.137) durch

$$\mathbf{\Lambda}_{vs}(\mathbf{k}) = \tau_{vs}(\mathbf{k}) \left[\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) + \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs} \mathbf{\Lambda}_{v's'}(\mathbf{k}') \right] \quad (2.140)$$

dar. Hierbei stellt der erste Term $\Lambda_{vs}^{\text{OUT}}(\mathbf{k}) := \tau_{vs}(\mathbf{k})\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k})$ den *scattering out*-Beitrag und der zweite Term $\Lambda_{vs}^{\text{IN}}(\mathbf{k}) := \tau_{vs}(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}'v's'} P_{\mathbf{k}'v's' \rightarrow \mathbf{k}vs} \Lambda_{v's'}(\mathbf{k}')$ den *scattering in*-Beitrag dar. Die mittlere freie Weglänge $\Lambda_{vs}(\mathbf{k})$ wird über die linearisierte Boltzmann-Gleichung entsprechend der Iterationsvorschrift

$$\Lambda_{vs}^{(n+1)}(\mathbf{k}) := \tau_{vs}(\mathbf{k}) \left[\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'v's'} P_{\mathbf{k}'v's' \rightarrow \mathbf{k}vs} \Lambda_{v's'}^{(n)}(\mathbf{k}') \right] \quad (2.141)$$

bestimmt, wobei als nullte Näherung ($n = 0$) für die mittlere freie Weglänge der Relaxationszeitansatz

$$\Lambda_{vs}^{(0)}(\mathbf{k}) := \tau_{vs}(\mathbf{k})\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) \quad (2.142)$$

gewählt wird. Als Kriterium für die Konvergenz wird

$$\max_{\mathbf{k}vs} \left| \frac{\Lambda_{vs}^{(n+1)}(\mathbf{k}) - \Lambda_{vs}^{(n)}(\mathbf{k})}{\Lambda_{vs}^{(n)}(\mathbf{k})} \right| < \varepsilon \quad (2.143)$$

verwendet, wobei in den vorliegenden Transportrechnungen $\varepsilon = 10^{-4}$ gewählt wurde.

2.2.1.1. Transportgrößen

Ist die Verteilungsfunktion $f_{vs}(\mathbf{k}; E)$ bzw. die mittlere freie Weglänge $\Lambda_{vs}(\mathbf{k})$ über Gleichung (2.140) bestimmt, so lässt sich ausgehend von Gleichung (2.104) zusammen mit den Erwartungswerten die makroskopische Observable bestimmen. Hierzu wird die Verteilungsfunktion in eine Potenzreihe bzgl. des äußeren elektrischen Feldes entwickelt, wobei nur Beiträge von erster Ordnung im elektrischen Feld berücksichtigt werden. Somit lässt sich Gleichung (2.104) durch

$$\begin{aligned} A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(E) &= \sum_{\mathbf{k}vs} \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) \\ &\quad + \sum_{\beta} \sum_{\mathbf{k}vs} \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\partial f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))}{\partial E_{vs}(\mathbf{k})} e \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) E^{\beta} \end{aligned} \quad (2.144)$$

darstellen. Der erste Beitrag $\mathring{A}^0{}^{\alpha_1 \dots \alpha_n} := \sum_{\mathbf{k}vs} \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))$ ist eine Größe im Gleichgewicht. Es zeigt sich, dass $\mathring{A}^0{}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ verschwindet für die betrachteten Transportgrößen mit Ausnahme der Spin-Dichte. Für diese stellt $\mathring{A}^0{}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ das magnetische Moment im Gleichgewicht dar. Für Details sei auf Anhang C verwiesen. In der linearen Antworttheorie ist die makroskopische Observable mit dem äußeren elektrischen Feld über

$$A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(E) = \sum_{\beta} a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} E_{\beta} \quad (2.145)$$

verknüpft. Aus dem Vergleich der Gleichungen (2.144) und (2.145) folgt

$$a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} := e \sum_{k_{vs}} \frac{\partial f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))}{\partial E_{vs}(\mathbf{k})} \overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}), \quad (2.146)$$

wobei sich dieser Ausdruck durch den Übergang zum Kontinuum $\sum_k \rightarrow \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \int_{V_{\text{BZ}}} d\mathbf{k}$ am absoluten Temperaturnullpunkt mit $\frac{\partial f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))}{\partial E_{vs}(\mathbf{k})} \Big|_{T=0\text{K}} = -\delta(E_{\text{F}} - E_{vs}(\mathbf{k}))$ wegen Gleichung (2.44) mit

$$a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^{\text{F}}} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \quad (2.147)$$

durch ein Integral über die Fermi-Fläche $S^{\text{F}} := \cup_{vs} S_{vs}^{\text{F}}$ darstellen lässt.

2.2.1.1.1 Elektrische Leitfähigkeit

Für die elektrische Stromdichte \mathbf{j} sind die Elemente $a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$ über

$$\mathbf{j}(\mathbf{E}) = \hat{\sigma} \mathbf{E} \quad (2.148)$$

durch den Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$

$$\sigma_{\alpha\beta} = \zeta_{\hat{\sigma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^{\text{F}}} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \quad (2.149)$$

mit $\zeta_{\hat{\sigma}} := \frac{e^2}{(2\pi)^3}$ gegeben, die sich ausgehend von Gleichung (2.147) unter Verwendung von Gleichung (2.107) ergeben.

2.2.1.1.2 Spin-Leitfähigkeit

Der Zusammenhang zwischen Spin-Stromdichte \mathbf{j}^{γ} und dem äußeren elektrischem Feld \mathbf{E}

$$\mathbf{j}^{\gamma}(\mathbf{E}) = \hat{\sigma}^{\gamma} \mathbf{E} \quad (2.150)$$

wird über den Tensor der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^{\gamma}$

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\gamma} = \zeta_{\hat{\sigma}^{\gamma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^{\text{F}}} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k}) v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \quad (2.151)$$

mit $\zeta_{\hat{\sigma}^{\gamma}} := \frac{e^2}{(2\pi)^3}$ vermittelt. Dieser ergibt sich in ähnlicher Weise wie der Tensor der elektrischen Leitfähigkeit ausgehend von Gleichung (2.147) jedoch diesmal unter Verwendung von Gleichung (2.118) und den Ersetzungen $\alpha := \alpha_2$ und $\gamma := \alpha_1$.

2.2.1.1.3 Edelstein-Tensor

Die durch ein äußeres elektrisches Feld induzierte Spin-Dichte \mathbf{s} wird durch den Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$

$$\chi_{\alpha\beta} = \xi_{\hat{\chi}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} S_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \quad (2.152)$$

mit $\xi_{\hat{\chi}} := \frac{e}{(2\pi)^3}$ über

$$\mathbf{s}(\mathbf{E}) = \hat{\chi} \mathbf{E} \quad (2.153)$$

beschrieben. Gleichung (2.152) ergibt sich aus Gleichung (2.147) mit Gleichung (2.112). Mit der induzierten Spin-Dichte $\mathbf{s}(\mathbf{E})$ ist ein induziertes magnetisches Moment $\mathbf{m}(\mathbf{E})$ über $\mathbf{m}(\mathbf{E}) = g \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{s}(\mathbf{E})$ verknüpft. Hierbei ist g der gyromagnetische Faktor, dessen Wert für reinen Spin-Magnetismus ausgehend von der Dirac-Gleichung $g = 2$ beträgt. Der Spin-Erwartungswert $S_{vs}(\mathbf{k})$ wird in Einheiten von $\hbar/2$ angegeben. Somit wird der Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ in Gleichung (2.153) in $\frac{\hbar/2}{\text{V/cm}}$ angegeben. Das induzierte magnetische Moment $\mathbf{m}(\mathbf{E})$ wird durch

$$\begin{aligned} \mathbf{m}(\mathbf{E}) &= -g \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{s}(\mathbf{E}) = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{\chi} \mathbf{E} \\ &= -g \frac{\mu_B}{\hbar} \{\hat{\chi}\} \frac{\hbar/2}{\text{V/cm}} \mathbf{E} = -\frac{g}{2} \{\hat{\chi}\} \frac{\mu_B}{\text{V/cm}} \mathbf{E} = -\{\hat{\chi}\} \frac{\mu_B}{\text{V/cm}} \mathbf{E} \end{aligned} \quad (2.154)$$

beschrieben, wobei Gleichung (2.153), $g = 2$ und $\hat{\chi} = \{\hat{\chi}\} \frac{\hbar/2}{\text{V/cm}}$ verwendet wurden. Hierbei stellt $\{a\}$ den Zahlenwert der physikalischen Größe a dar. Die Zahlenwerte des Edelstein-Tensors $\hat{\chi}$ in Einheiten von $\frac{\hbar/2}{\text{V/cm}}$ bzw. in Einheiten von $\frac{\mu_B}{\text{V/cm}}$ stimmen somit bis auf das Vorzeichen überein.

2.2.1.1.4 Spin-Orbit-Torkance

Der zum Spin-Orbit-Torque T zugehörige Tensor, die Spin-Orbit-Torkance \hat{t} , wird unter Verwendung von Gleichung (2.147) und Gleichung (2.123) über

$$\mathbf{T}(\mathbf{E}) = \hat{t} \mathbf{E} \quad (2.155)$$

durch

$$t_{\alpha\beta} = \xi_{\hat{t}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} T_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \quad (2.156)$$

mit $\xi_{\hat{t}} := \frac{e}{(2\pi)^3}$ dargestellt.

2.2.1.2. Lineare Antwort bzgl. elektrischer Stromdichte

Unter Verwendung von Gleichung (2.148) gilt $E(\mathbf{j}) = \hat{\sigma}^{-1}\mathbf{j}$. Somit können die Spin-Stromdichte \mathbf{j}^γ , die Spin-Dichte \mathbf{s} , und der Spin-Orbit-Torque \mathbf{T} in Abhängigkeit von der elektrischen Stromdichte entsprechend

$$\mathbf{j}^\gamma(\mathbf{j}) = \hat{\sigma}^\gamma \hat{\sigma}^{-1} \mathbf{j}, \quad \mathbf{s}(\mathbf{j}) = \hat{\chi} \hat{\sigma}^{-1} \mathbf{j}, \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{T}(\mathbf{j}) = \hat{t} \hat{\sigma}^{-1} \mathbf{j} \quad (2.157)$$

dargestellt werden.

2.2.1.3. Beiträge der Basisatome zum Tensor

Ausgehend von Gleichung (2.105) lassen sich mit dem Beitrag des Basisatoms η zum Erwartungswert $A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})$

$$\begin{aligned} \hat{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) &:= \frac{1}{V_{\text{EZ}}} \sum_{QQ'} \left(\hat{C}_Q^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}vs; E) \right)^* \hat{C}_{Q'}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}vs; E) \\ &\quad \cdot \int_0^{\infty} d\mathbf{r} \left(\hat{R}_Q^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}; E) \right)^{\dagger} \mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) \hat{R}_{Q'}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}; E) \end{aligned} \quad (2.158)$$

für die elektrische Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$ mit Gleichung (2.158) und $\mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) := \mathbb{1}_4$

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\eta} = \zeta_{\hat{\sigma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^{\text{F}}} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} N_{vs}^{\eta}(\mathbf{k}) v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}), \quad (2.159)$$

wobei $\hat{A}_{\eta}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) := N_{vs}^{\eta}(\mathbf{k})$ mit $\sum_{\eta} N_{vs}^{\eta}(\mathbf{k}) = 1$ gilt [144]. Für die Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^{\gamma}$

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\gamma\eta} = \zeta_{\hat{\sigma}^{\gamma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^{\text{F}}} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} S_{vs}^{\eta\gamma}(\mathbf{k}) v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}), \quad (2.160)$$

für den Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$

$$\chi_{\alpha\beta}^{\eta} = \zeta_{\hat{\chi}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^{\text{F}}} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} S_{vs}^{\eta\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}), \quad (2.161)$$

und für die Spin-Orbit-Torkance \hat{t}

$$t_{\alpha\beta}^{\eta} = \zeta_{\hat{t}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^{\text{F}}} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} T_{vs}^{\eta\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \quad (2.162)$$

stellen diese jeweils die entsprechenden Beiträge des Basisatoms η dar. Gleichung (2.162) lässt sich unter Verwendung von Gleichungen (2.125) und (2.161) näherungsweise durch

$$t_{\alpha\beta}^{\eta} \approx \sum_{\gamma\delta} \varepsilon_{\alpha\gamma\delta} \chi_{\gamma\beta}^{\eta} \hat{B}_{\delta}^{\eta}(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r}=0} \quad (2.163)$$

darstellen. Somit gilt für den Beitrag des Torque am Basisatom η wegen Gleichung (2.163) mit $s_\alpha^\eta(\mathbf{E}) = \sum_\beta \chi_{\alpha\beta}^\eta E_\beta$ insbesondere

$$T_\alpha^\eta(\mathbf{E}) = \sum_\beta t_{\alpha\beta}^\eta E_\beta \approx \left(\mathbf{s}^\eta(\mathbf{E}) \times \overset{\circ}{\mathbf{B}}^\eta(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{r}=0} \right)_\alpha. \quad (2.164)$$

2.2.2. Mechanismen

Gleichung (2.104) berücksichtigt nur die Änderung der Verteilungsfunktion f unter dem Einfluss eines äußeren Feldes. Im Allgemeinen werden sich sowohl Erwartungswert $A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}; K(\mathbf{r}, t))$ als auch Verteilungsfunktion $f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t))$ unter dem Einfluss eines äußeren Feldes ändern, sodass die makroskopische Größe $A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ im Allgemeinen durch

$$A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(K(\mathbf{r}, t)) = \sum_{kvs} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}; K(\mathbf{r}, t)) f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t)) \quad (2.165)$$

gegeben ist.

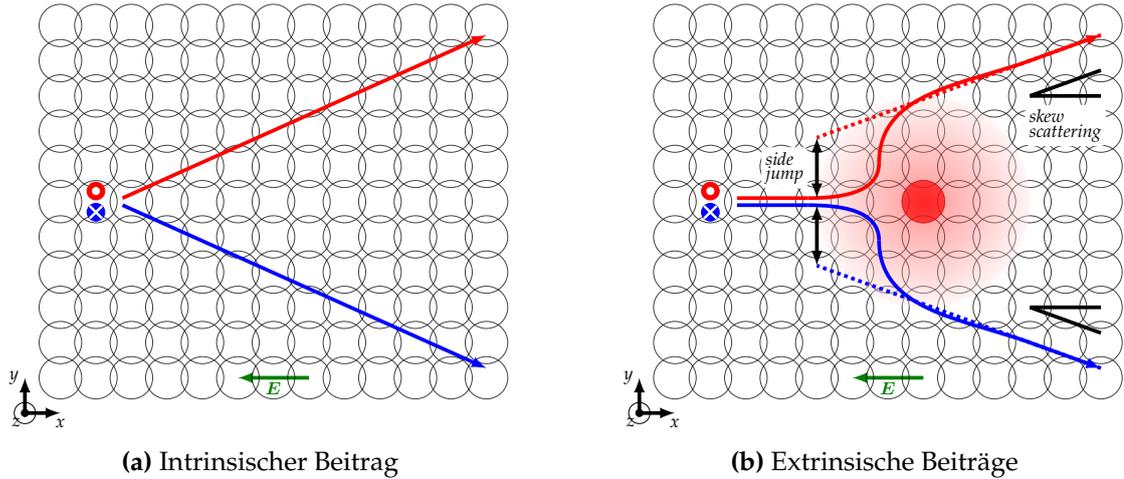


Abbildung 2.2.1.: Schematische Darstellung des (a) intrinsischen Beitrages und (b) der extrinsischen Beiträge, d.h. dem *skew scattering*-Beitrag einerseits und dem *side jump*-Beitrag andererseits. Die Trajektorien der Majoritätselektronen (\odot bzw. $s_z > 0$) und Minoritätselektronen (\otimes bzw. $s_z < 0$) sind in rot bzw. blau dargestellt. (a) zeigt das Auftreten einer anomalen Geschwindigkeit senkrecht zum äußeren elektrischen Feld. In (b) beschreibt das *skew scattering* die Ablenkung aus der ursprünglichen Bewegungsrichtung, während der *side jump* eine konstante Verlagerung des Schwerpunktes des Wellenpaketes beschreibt. Abbildung entlehnt aus [109].

Mit $\Delta A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}; K(\mathbf{r}, t)) := A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}; K(\mathbf{r}, t)) - A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}; K(\mathbf{r}, t)) \Big|_{K(\mathbf{r}, t)=0}$ und

$A_{vs}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(\mathbf{k}) := A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}; K(\mathbf{r}, t))|_{K(\mathbf{r}, t)=0}$ geht Gleichung (2.165) in

$$\begin{aligned}
 A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(K(\mathbf{r}, t)) &= \underbrace{\sum_{kvs} A_{vs}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(\mathbf{k}) f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t))}_{=: A_f^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(K(\mathbf{r}, t))} \\
 &+ \underbrace{\sum_{kvs} \Delta A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}; K(\mathbf{r}, t)) f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t))}_{=: A_A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(K(\mathbf{r}, t))}. \quad (2.166)
 \end{aligned}$$

über. Hierbei berücksichtigt der Summand $A_f^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ den Einfluss des äußeren Feldes K ausschließlich auf die Verteilungsfunktion und bildet den Ausgangspunkt zur Beschreibung extrinsischer Beiträge. Als extrinsische Beiträge lassen sich für substitutionelle Defekte in einem sonst periodischen Kristall mit dem *skew scattering*-Mechanismus und dem *side jump*-Mechanismus zwei unterschiedliche Mechanismen beobachten. Beide tragen unabhängig voneinander zur makroskopischen Größe $A_f^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ bei, sodass sich die Größe $A_{vs}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(\mathbf{k})$ additiv in den Beitrag des *skew scattering* (SS) $A_{vs}^{0 SS \alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})$ und in den Beitrag des *side jump* (SJ) $A_{vs}^{0 SJ \alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})$ zerlegen lässt. Eine schematische Darstellung der Mechanismen sowohl des *skew scattering*-Beitrages als auch des *side jump*-Beitrages sind in Abb. 2.2.1 (b) gegeben. Hierbei ist die Streuung von Elektronen an einem substitutionellen Defekt in einem sonst periodischen Kristall dargestellt. Durch die Spin-Bahn-Wechselwirkung ist die Streuung spinabhängig, sodass Majoritätselektronen (\odot bzw. $s_z > 0$) und Minoritätselektronen (\otimes bzw. $s_z < 0$) in unterschiedliche Richtungen gestreut werden. Das *skew scattering* beschreibt die Ablenkung aus der ursprünglichen Bewegungsrichtung, während der *side jump*-Mechanismus eine konstante Verlagerung des Schwerpunktes des Wellenpaketes $\Delta \mathbf{r}_{vs}(\mathbf{k})$ beschreibt. Im Allgemeinen liegt eine Überlagerung beider Mechanismen vor. Der *skew scattering*-Beitrag ist unmittelbar durch den entsprechenden Erwartungswert gegeben, d.h. $A_{vs}^{0 SS \alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) := \dot{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})$. Die entsprechenden Größen für den *side jump*-Beitrag berücksichtigen die konstante Verlagerung des Schwerpunktes des Wellenpaketes $\Delta \mathbf{r}_{vs}(\mathbf{k})$. Darstellungen von $A_{vs}^{0 SJ \alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})$ für verschiedene makroskopische Größen sind in [109] gegeben. In verdünnten Legierungen, wie sie in dieser Arbeit betrachtet werden, dominiert der *skew scattering*-Beitrag, sodass ausschließlich dieser Beitrag betrachtet wird. Überdies zeigte Butler, dass der *scattering in*-Beitrag in der linearisierten Boltzmann-Gleichung (2.140) den Vertex-Korrekturen des Kubo-Formalismus entspricht [52, 145]. Der zweite Summand, d.h. $A_A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ trägt Veränderungen sowohl des Erwartungswertes als auch der Verteilungsfunktion hervorgerufen durch das äußere Feld K Rechnung. Die Entwicklung der Verteilungsfunktion bzgl. Potenzen des äußeren Feldes K liefert

$$A_A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(K(\mathbf{r}, t)) = \underbrace{\sum_{kvs} \Delta A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}; K(\mathbf{r}, t)) f_{vs}^0(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}_{=: A_{A'}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(K(\mathbf{r}, t))} + \dots, \quad (2.167)$$

wobei $f_{vs}^0(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) := f_{vs}(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t; K(\mathbf{r}, t))|_{K(\mathbf{r}, t)=0}$ die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht, d.h. für Elektronen die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion entsprechend

Gleichung (2.134), darstellt. Unter dem Einfluss eines homogenen äußeren elektrischen Feldes ($K(\mathbf{r}, t) := E_\beta$ für $\beta \in \{x, y, z\}$) ergibt sich für die elektrische Stromdichte $j_j^\alpha(\mathbf{E})$ ausgehend von Gleichung (2.107), wobei $v_{vs}^{\alpha_1}(\mathbf{k})$ durch $v_{vs}^{\alpha_1}(\mathbf{k}; \mathbf{E})$ zu ersetzen ist, und unter Verwendung von Gleichung (2.130) mit $\mathbf{B} \equiv 0$ nun $j_j^\alpha(\mathbf{E}) = \sum_\beta (-e^2/\hbar \sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \Omega^\gamma) E_\beta$ mit $\Omega^\gamma := \frac{1}{\mathfrak{V}} \sum_{\mathbf{k}v_s} \Omega_{vs}^\gamma(\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))$ ist. Hierbei wurde $f_{vs}^0(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f_{vs}^0(\mathbf{k}) = f^0(E_{vs}(\mathbf{k}))$ berücksichtigt. Die Elemente des zugehörigen Antworttensors $\hat{\sigma}_j^\alpha = (\sigma_j^{\alpha\beta})_{\alpha, \beta \in \{x, y, z\}}$ mit $\sigma_j^{\alpha\beta} = -e^2/\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \Omega^\gamma$ werden ausschließlich durch Eigenschaften des Idealkristalls, i. d. F. durch die integrierte Berry-Curvature $\mathbf{\Omega}$ bestimmt. Diese besitzt nur Nichtdiagonalelemente, die die intrinsischen transversalen elektrische Leitfähigkeiten darstellen [15, 128]. Das Auftreten einer anomalen Geschwindigkeit unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes ist in Abb. 2.2.1 (a) dargestellt. Eine alternative Möglichkeit ist es die Größe $\Delta A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}; K(\mathbf{r}, t))$ für eine beliebige Antwort über den Kubo-Formalismus unter Verwendung des entsprechenden Operators $\mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}, t; K(\mathbf{r}, t))$ zu bestimmen. Dieses bietet die Möglichkeit [146] sowohl den anomalen Hall-Effekt [52, 147, 148] als auch den Spin-Hall-Effekt [148–150], Edelstein-Effekt [151, 152], und Spin-Orbit-Torque [53, 153–156] in einem einheitlichen Rahmen zu behandeln. Es führt auf ähnliche Ausdrücke wie für die Berry-Curvature. Für Details sei auf [153] verwiesen.

2.2.3. Transformation von Transportkoeffizienten unter Rauminversion

Die Kenntnis des Transformationsverhalten von physikalischen Größen unter Symmetrieoperationen erlaubt bereits ohne numerische Rechnungen zu beurteilen, ob die Größe aufgrund der vorhandenen Symmetrien existiert, d.h. von Null verschieden ist, oder nicht. Aus diesem Grund werden in diesem Abschnitt die Transformationsverhalten allgemeiner Transportkoeffizienten unter Rauminversion betrachtet. Außerdem wird der Einfluss der Magnetisierung auf die diskutierten Effekte studiert.

Die linearen Antworttensoren in Gleichungen (2.159) bis (2.162) beschreiben eine diskrete Abhängigkeit von der Position im Raum. Im folgenden betrachtet man eine beliebige makroskopische Größe $A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ und verallgemeinert die Beschreibung auf die kontinuierliche Variable des Ortsvektors \mathbf{r} . Der Zusammenhang zwischen der ortsabhängigen Größe $A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ und dem äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} wird für ein homogenes äußeres elektrisches Feld durch

$$A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}; \mathbf{E}) = \sum_\beta a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\mathbf{r}) E_\beta \quad (2.168)$$

vermittelt. Unter Rauminversion \mathcal{I} , dargestellt durch $R(\mathcal{I})$, transformiert sich die ortsabhängige Größe $A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}, \mathbf{E})$ unter Verwendung von $R(\mathcal{I}) A^{\alpha_1 \dots \alpha_n} = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}) A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$, $R(\mathcal{I})\mathbf{r} = -\mathbf{r}$ und $R(\mathcal{I})\mathbf{E} = -\mathbf{E}$ entsprechend

$$R(\mathcal{I}) (A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}; \mathbf{E})) = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}) A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(-\mathbf{r}; -\mathbf{E}). \quad (2.169)$$

Die Transformationsverhalten verschiedener Größen $A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$ unter Rauminversion sind in Tabelle 2.2.1 dargestellt. Unter Verwendung von Gleichung (2.168) folgt mit Glei-

Tabelle 2.2.1.: Transformationsverhalten verschiedener Größen A unter Rauminversion \mathcal{I} und das zugehörige Signum $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)$, dass über $R(\mathcal{I})A = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)A$ definiert ist.

A	\mathbf{r}	\mathbf{E}	\mathbf{j}	\mathbf{j}^γ	\mathbf{s}	\mathbf{T}
$R(\mathcal{I})A$	$-\mathbf{r}$	$-\mathbf{E}$	$-\mathbf{j}$	$-\mathbf{j}^\gamma$	\mathbf{s}	\mathbf{T}
$\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)$	-1	-1	-1	-1	+1	+1

chung (2.169)

$$R(\mathcal{I}) (A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{r}; \mathbf{E})) = \sum_{\beta} \left(-\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}) a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(-\mathbf{r}) \right) E_{\beta}. \quad (2.170)$$

Besitzt nun das betrachtete System Rauminversionssymmetrie, d.h. $\mathcal{I} \in \mathcal{P}$, wobei \mathcal{P} die Menge der Symmetrieelemente des Systems darstellt, so gilt

$$A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{r}; \mathbf{E}) = R(\mathcal{I}) A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{r}; \mathbf{E}) \quad (2.171)$$

und aus Vergleich der Gleichungen (2.168) und (2.170) ergibt sich somit

$$a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(-\mathbf{r}) = -\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}) a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(\mathbf{r}), \quad (2.172)$$

und schließlich gilt, ausgehend von Gleichung (2.168) mit Gleichung (2.172), ferner

$$A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(-\mathbf{r}; \mathbf{E}) = -\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}) A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{r}; \mathbf{E}), \quad (2.173)$$

sodass im Falle von $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}) = +1$ die Größe $A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{r}; \mathbf{E})$ eine ungerade Funktion bzgl. des Ortsvektors \mathbf{r} ist und die integrierte Größe $A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{E}) = \int_V d\mathbf{r} A^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{r}; \mathbf{E})$ verschwindet. Wegen $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(\mathbf{s}) = +1$ und $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(\mathbf{T}) = +1$, verschwindet somit im Rahmen der linearen Antworttheorie sowohl der Edelstein-Effekt als auch der Spin-Orbit-Torque in inversionssymmetrischen Systemen.

Besitzt das System Rauminversionssymmetrie, d.h. die Rauminversion \mathcal{I} ist ein Element der Menge der Symmetrien des Systems \mathcal{P} ($\mathcal{I} \in \mathcal{P}$), dann ist in dem System kein Edelstein-Effekt zu beobachten. In Tabelle 2.2.2 wird dies durch \times gekennzeichnet. Besitzt das System keine Rauminversionssymmetrie, d.h. die Rauminversion \mathcal{I} ist kein Element der Menge der Symmetrieelemente \mathcal{P} ($\mathcal{I} \notin \mathcal{P}$), so ist ein Edelstein-Effekt im Allgemeinen zu beobachten. Dies in Tabelle 2.2.2 durch \checkmark gekennzeichnet. Entsprechend ist ein anomaler Hall-Effekt nur in magnetischen Systemen zu beobachten. Der Spin-Orbit-Torque ist höchstens in magnetischen Systemen mit gebrochener Rauminversionssymmetrie zu beobachten. Die Existenz des Spin-Hall-Effekts unterliegt keinen Einschränkungen durch Magnetismus und Rauminversionssymmetrie. Hervorzuheben ist, dass sich diese Betrachtungen auf den Rahmen der linearen Antworttheorie beschränken. So ist ein Edelstein-Effekt unter Berücksichtigung nichtlinearer Effekte auch in Systemen mit Rauminversionssymmetrie zu beobachten [157, 158].

Tabelle 2.2.2.: Makroskopische Größe $A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$, linearer Antworttensor $a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$ für die elektrische Leitfähigkeit, Spin-Leitfähigkeit, Edelstein-Tensor, und Spin-Orbit-Torkance. \mathcal{I} stellt den Operator der Rauminversion dar und \mathcal{P} die Menge der Symmetrieelemente des Systems. Besitzt das System Rauminversionssymmetrie, so gilt $\mathcal{I} \in \mathcal{P}$, anderenfalls gilt $\mathcal{I} \notin \mathcal{P}$. M ist die Magnetisierung, sodass $M = 0$ und $M \neq 0$ angeben, ob das System nichtmagnetisch oder magnetisch ist. So ist z. B. der anomale Hall-Effekt in nichtmagnetischen Systemen ($M = 0$) nicht zu beobachten, dargestellt durch \times , während der Edelstein-Effekt nur in Systemen mit gebrochener Rauminversionssymmetrie ($\mathcal{I} \notin \mathcal{P}$) auftritt, gekennzeichnet durch \checkmark . Allgemein kennzeichnen die Symbole \checkmark und \times , ob der Effekt in Abhängigkeit davon, ob einerseits Rauminversion ein Symmetrieelement ist oder nicht ($\mathcal{I} \in \mathcal{P}$ bzw. $\mathcal{I} \notin \mathcal{P}$) und andererseits ob das System magnetisch oder nichtmagnetisch ($M \neq 0$ bzw. $M = 0$) ist. Hierbei bezeichnet \mathcal{P} die Menge der Symmetrieelemente des Systems. Gebrochene Rauminversionssymmetrie ($\mathcal{I} \notin \mathcal{P}$) stellt sowohl für den Edelstein-Effekt als auch für den Spin-Orbit-Torque eine notwendige, aber keine hinreichende Bedingung dar.

	$A^{\alpha_1 \dots \alpha_n}$	$a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$	$\mathcal{I} \in \mathcal{P}$		$\mathcal{I} \notin \mathcal{P}$	
			$M = 0$	$M \neq 0$	$M = 0$	$M \neq 0$
Elektrische Leitfähigkeit ↔ Anomaler Hall-Effekt	j_α	$\sigma_{\alpha\beta}$	\times	\checkmark	\times	\checkmark
Spin-Leitfähigkeit ↔ Spin-Hall-Effekt	j_α^γ	$\sigma_{\alpha\beta}^\gamma$	\checkmark	\checkmark	\checkmark	\checkmark
Edelstein-Tensor ↔ Edelstein-Effekt	s_α	$\chi_{\alpha\beta}$	\times	\times	\checkmark	\checkmark
Spin-Orbit-Torkance ↔ Spin-Orbit-Torque	T_α	$t_{\alpha\beta}$	\times	\times	\times	\checkmark

3. Ergebnisse

Jede Frage hat zwei Seiten. Beide sollten erforscht werden, ehe man mit ihnen fertig ist.

Sir Robert Baden-Powell, Lord of Gilwell, Gründer der Weltpfadfinderbewegung

3.1. Elektronische Struktur von Co/Cu-Vielfachschichten

In der vorliegenden Arbeit werden die Transporteigenschaften in ferromagnetisch/-nichtmagnetischen Vielfachschichten mit substitutionellen Punktdefekten untersucht. Es werden Kobalt/Kupfer-Vielfachschichten (Co/Cu-Vielfachschichten) betrachtet, die, wie in Abb. 3.1.1 dargestellt, aus abwechselnden Kobalt- und Kupferschichten bestehen. Entsprechende Vielfachschichten wurden bereits früher im Zusammenhang mit dem Riesenmagnetowiderstand [159, 160] untersucht sowie jüngst im Zusammenhang mit Spin-Orbit-Torque [85, 156]. Für die Elemente Kobalt (Co) und Kupfer (Cu) sind die Ordnungszahlen Z und die Elektronenkonfigurationen isolierter Atome in Tabelle 3.1.1 angegeben. Bei $T = 0$ K kristallisiert Kupfer in einem kubisch-flächenzentriertem Gitter (engl. *face-centered cubic* (fcc)), während Kobalt in einer hexagonal dichten Kugelpackung (engl. *hexagonal close packed* (hcp)) kristallisiert. hcp-Co geht bei einer Temperatur von $T = 450$ °C [161] in fcc-Co über. Die experimentell bestimmten Gitterkonstanten von fcc-Cu und fcc-Co betragen $a(\text{fcc-Cu}) = 3.615$ Å bzw. $a(\text{fcc-Co}) = 3.545$ Å. Somit weicht die Gitterkonstante von fcc-Co um $\frac{a(\text{fcc-Cu}) - a(\text{fcc-Co})}{a(\text{fcc-Cu})} \approx 1.9\%$ von der Gitterkonstante von fcc-Cu ab. Die Gitterfehlانpassung ist somit relativ gering, und ermöglicht bei Heteroepitaxie ein pseudomorphes Wachstum [162–165]. Aus diesem Grund wird als Gitterkonstante der Co/Cu-Vielfachschichten die Gitterkonstante von fcc-Cu gewählt. Wie in Abb. 3.1.2 dargestellt, besteht die Einheitszelle der Co/Cu-Vielfachschichten aus neun Co-Atomen und sieben Cu-Atomen, wobei der Normalenvektor der Co/Cu-Grenzfläche senkrecht zur (001)-Ebene steht. Diese Einheitszelle wurde bereits bei den Untersuchungen zum Riesenmagnetowiderstand gewählt [110, 144, 166]. Abgekürzt werden diese als Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten. fcc-Cu ist nichtmagnetisch, während fcc-Co ferromagnetisch ist, und dessen atomares magnetisches Moment $m(\text{fcc-Co}) = 1.64 \mu_B$ beträgt. Der Einfluss der unterschiedlichen Gitterkonstanten von fcc-Cu und fcc-Co auf das atomare magnetische Moment von fcc-Co ist gering und wird nicht weiter betrachtet.¹ Die Kopplung der Kobaltschichten kann ferromagnetisch oder antiferromagnetisch sein in Abhängigkeit von den Dicke der Kobalt- und Kupferschichten [110]. In der vorliegenden Arbeit werden Co/Cu-Vielfachschichten

$${}^1m(\text{fcc-Co}) = \begin{cases} 1.64 \mu_B & \text{für } a(\text{fcc-Co}) \\ 1.68 \mu_B & \text{für } a(\text{fcc-Cu}) \end{cases}$$

betrachtet, in denen die Co-Schichten ferromagnetisch miteinander koppeln. Die magnetischen Momente von benachbarten Co-Schichten sind parallel ausgerichtet. Hierbei werden für die Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten zwei voneinander verschiedene Richtungen der Magnetisierung M untersucht, wobei entsprechend Abb. 3.1.1 (a) die Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) orientiert sein soll, und im zweiten Fall, dargestellt in Abb. 3.1.1 (b) die Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$). Das Koordinatensystem sei so gewählt, dass die z -Richtung in Richtung des Normalenvektors der Co/Cu-Grenzfläche orientiert ist. Bei Vernachlässigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung hängen die Transporteigenschaften nicht von der Richtung der Magnetisierung ab. Bei Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung sind die Transporteigenschaften davon abhängig, in welche kristallographische Richtung die Magnetisierung orientiert ist. So ist z. B. die Existenz von leichten und schweren Achsen der Magnetisierung und auch der anisotrope Magnetowiderstand auf die Spin-Bahn-Wechselwirkung zurückzuführen.

Tabelle 3.1.1.: Elementsymbole, Ordnungszahlen, Kristallstrukturen, Elektronenkonfiguration, Gitterkonstanten, und atomares magnetisches Moment bei Vernachlässigung des Bahndrehimpulses ($m = m_S + m_L \approx m_S$) von Kobalt und Kupfer. fcc-Cu als Volumensystem ist nichtmagnetisch, sodass es kein endliches atomares magnetisches Moment besitzt.

Kobalt Co $Z = 27$ [Ar]3d ⁷ 4s ² kubisch-flächenzentriert (engl. <i>face-centered cubic</i> (fcc)) $a = 3.545 \text{ \AA}$ $m / \text{Atom} = 1.64 \mu_B$	Kupfer Cu $Z = 29$ [Ar]3d ¹⁰ 4s ¹ kubisch-flächenzentriert (engl. <i>face-centered cubic</i> (fcc)) $a = 3.615 \text{ \AA}$
--	---

Wie bereits beschrieben und in Abb. 3.1.2 dargestellt, besteht die Einheitszelle der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten aus neun Co-Atomen und aus sieben Cu-Atomen. Die Nummerierung beginnt in der Regel mit 1 für das erste Co-Atom und endet bei 16 für das letzte Cu-Atom. Bisweilen ist es für die Diskussionen hilfreicher statt der gewöhnlichen Nummerierung sowohl in der ferromagnetischen als auch in der nichtmagnetischen Schicht eine individuelle Indizierung vorzunehmen. Die jeweils zentralen Basisatome, d.h. $\eta = 5$ für die ferromagnetische Schicht und $\eta = 13$ für die nichtmagnetische Schicht werden mit $\eta = 0$ bezeichnet. Innerhalb der ferromagnetischen Schicht (FM) werden Basisatome somit zwischen $\eta \in \{-4, \dots, 4\}$ und in der nichtmagnetischen Schicht (NM) als $\eta \in \{-3, \dots, 3\}$ bezeichnet.

Die Transporteigenschaften metallischer Systeme wie der betrachteten Co/Cu-Vielfachschichten werden bei tiefen Temperaturen durch Streuung der Leitungselektronen an Defekten bestimmt [61]. Hierbei beschränkt man sich auf substitutionelle Punktde-

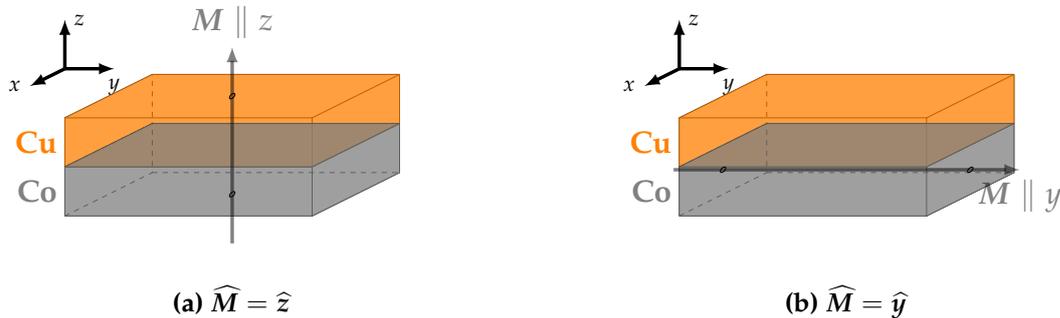


Abbildung 3.1.1.: Schematische Darstellung einer Einheitszelle der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit (a) Magnetisierung \widehat{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) und (b) Magnetisierung \widehat{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$).

Defekte, wobei sowohl Eigendefekte, d.h. Cu- und Co-Defekte, als auch Fremddefekte betrachtet werden. Als Fremddefekte werden Ir-, Au-, und Bi-Defekte gewählt, da sie als schwere Elemente große Spin-Bahn-Wechselwirkungen besitzen. Die Elementsymbole, die Ordnungszahlen und die Elektronenkonfiguration der isolierten Atome sind für die oben genannten Defekte in Tabelle 3.1.2 zu finden.

Die in den numerischen Rechnungen verwendeten wesentlichen Parameter sind in Anhang L zusammengetragen. Detaillierte Untersuchungen zum Einfluss und Wahl der Parameter auf die Ergebnisse sind in [110, 113] zu finden.

Tabelle 3.1.2.: Elementsymbole, Ordnungszahlen, und Elektronenkonfiguration von Kobalt, Kupfer, Iridium, Gold, und Bismut

Kobalt	Kupfer	Iridium	Gold	Bismut
Co	Cu	Ir	Au	Bi
$Z = 27$	$Z = 29$	$Z = 77$	$Z = 79$	$Z = 83$
$[\text{Ar}]3d^74s^2$	$[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$	$[\text{Xe}]4f^{14}5d^76s^2$	$[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^1$	$[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}6s^26p^3$

3.1.1. Grundzustandseigenschaften

3.1.1.1. Lokale Zustandsdichten

In Abb. 3.1.3 sind die lokalen Zustandsdichten der Majoritätselektronen $D_+^\eta(E)$ und der Minoritätselektronen $D_-^\eta(E)$ von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \widehat{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) sowohl für die zentralen Lagen der Co-Schicht ($\eta = 5$) bzw. Cu-Schicht ($\eta = 13$) als auch für die Grenzflächenlagen der Co-Schicht ($\eta = 9$) bzw. Cu-Schicht ($\eta = 10$) dargestellt. Zum Vergleich sind die entsprechenden lokalen Zustandsdichten der Volumensysteme fcc-Cu und fcc-Co eingezeichnet. Die lokalen Zustandsdichten von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten sowohl

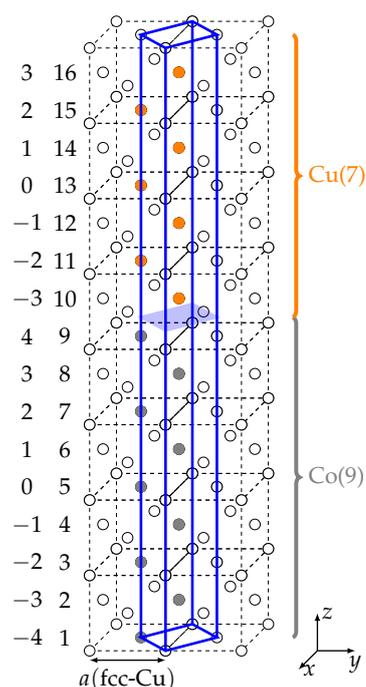


Abbildung 3.1.2.: Schematische Darstellung der Einheitszelle der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten sowohl für Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) als auch für Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$). Die Einheitszelle bestehend aus neun Co-Atomen und sieben Cu-Atomen ist blau hervorgehoben. Die Co/Cu-Grenzfläche, deren Normalenvektor senkrecht zur (001)-Oberfläche steht, ist ebenfalls hervorgehoben. Die Gitterkonstante parallel zur Co/Cu-Grenzfläche a_{\parallel} und die Gitterkonstante senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche a_{\perp} betragen $a_{\parallel} = 1/\sqrt{2} a(\text{fcc-Cu})$ bzw. $a_{\perp} = 16/2 a(\text{fcc-Cu})$. Ferner ist die fortlaufende und symmetrische Nummerierung der Basisatome innerhalb der Einheitszelle der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten, d.h. $\eta \in \{1, \dots, 16\}$ bzw. $\eta \in \{-4, \dots, 4\}$ für $\eta \in \text{FM}$ und $\eta \in \{-3, \dots, 3\}$ für $\eta \in \text{NM}$ dargestellt.

mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) als auch mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) für alle Atompositionen sind in Anhang F abgebildet. Es zeigt sich, dass der Einfluss der Richtung der Magnetisierung auf die lokalen Zustandsdichten sehr gering ist, sodass die folgenden Aussagen für beide Richtungen der Magnetisierung gleichermaßen gelten. Für die zentralen Lagen ($\eta = 5$ bzw. $\eta = 13$) weichen die lokalen Zustandsdichten der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten und der entsprechenden des zugehörigen Volumensystems nur sehr wenig voneinander ab. Ausgehend von dieser Beobachtung ist anzunehmen, dass die Anzahl an Basisatomen sowohl für die Co-Schicht als auch für die Cu-Schicht ausreichend ist, um im Inneren der Schichten volumensystemähnliche Eigenschaften zu erwarten. Die lokalen Zustandsdichten an den Grenzflächenlagen ($\eta \in \{1, 9\}$ bzw. $\eta \in \{10, 16\}$) zeigen hingegen größere Differenzen zu der entsprechenden des zugehörigen Volumensystems. Insbesondere sind für die Co-Grenzflächenlagen ($\eta \in \{1, 9\}$) das Maximum der lokalen Zustandsdichte für die Minoritätselektronen $D^{\eta}_{\uparrow}(E)$ von oberhalb der Fermi-Energie hin zur Fermi-Energie verschoben. Für die Cu-Grenzflächenlagen ($\eta \in \{10, 16\}$) sind die lokalen Zustandsdichten breiter bzgl. der Energie $E - E_{\text{F}}$ verteilt. Insbesondere ist die hohe lokale Zustandsdichte knapp oberhalb von $E - E_{\text{F}} = -2$ eV für beide Spin-Richtungen um die Hälfte reduziert zugunsten von Zuständen oberhalb von $E - E_{\text{F}} = -1$ eV.

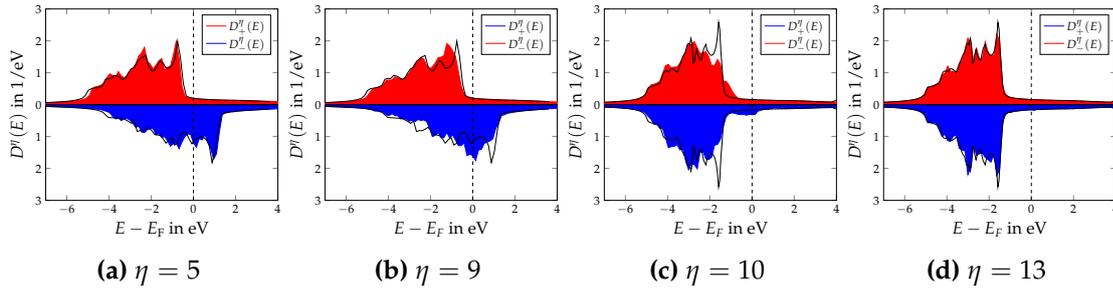


Abbildung 3.1.3.: Lokale Zustandsdichten der Majoritätselektronen $D_+^\eta(E)$ und der Minoritätselektronen $D_-^\eta(E)$ in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\vec{M}} = \widehat{\vec{z}}$) (a) des zentralen Co-Atom ($\eta = 5$), (b) des Co-Grenzflächenatoms ($\eta = 9$), (c) des Cu-Grenzflächenatoms ($\eta = 10$), und (d) des zentralen Cu-Atoms ($\eta = 13$). Zum Vergleich sind die lokalen Zustandsdichten der Majoritäts- und Minoritätselektronen jeweils für fcc-Co im Falle von $\eta \in \{5, 9\}$ bzw. fcc-Cu im Falle von $\eta \in \{10, 13\}$ als schwarze Linien eingezeichnet.

3.1.1.2. Magnetische Momente

Wirt

Neben der lokalen Zustandsdichte stellen die magnetischen Momente der einzelnen Basisatome \vec{m}^η eine wichtige Größe dar. Für den hier betrachteten kollinearen Magnetismus gilt $\vec{m}^\eta = m^\eta \widehat{\vec{M}}$ mit $m^\eta = \mu_B \int_{-\infty}^{E_F} dE (D_+^\eta(E) - D_-^\eta(E))$. Hierzu sind in Abb. 3.1.4 (a) die magnetischen Momente der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung in z -Richtung zusammen mit dem magnetischen Moment von fcc-Co dargestellt. Der Einfluss der Richtung der Magnetisierung auf die Beträge der magnetischen Momente ist gering, sodass auf eine entsprechende Abbildung von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\vec{M}} = \widehat{\vec{y}}$) verzichtet wird. Dieser geringe Einfluss der Richtung der Magnetisierung auf die lokalen Zustandsdichten überträgt sich direkt auf die magnetischen Momente der einzelnen Basisatome, und wie zuvor gelten die folgenden Aussagen für beide untersuchten Richtungen der Magnetisierung gleichermaßen. Da fcc-Co kubische Symmetrie besitzt, sind die drei kubischen Achsen x , y , und z äquivalent, sodass für $\widehat{\vec{M}} \in \{\widehat{\vec{x}}, \widehat{\vec{y}}, \widehat{\vec{z}}\}$ das atomare magnetische Moment mit $m \approx 1.68 \mu_B$ stets den gleichen Wert hat. Durch die angrenzende ferromagnetische Schicht werden die Atome innerhalb der Cu-Schicht magnetisiert [167]. Der Einfluss der ferromagnetischen Schicht innerhalb der nichtmagnetischen Schicht nimmt von der Co/Cu-Grenzfläche hin zur zentralen Lage ab. Entsprechend reduzieren sich auch die Beträge der induzierten magnetischen Momente. Trotz der induzierten magnetischen Momente innerhalb der Cu-Schicht wird sie im Folgenden als nichtmagnetische Schicht bezeichnet, da die induzierten magnetischen Momente um mindestens eine Größenordnung kleiner sind als die magnetischen Momente innerhalb der Co-Schicht.

Defekte

Die magnetischen Momente von Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten in Abhängigkeit von der Defektposition sind in Abb. 3.1.4 (b) zusammen mit den entsprechenden Werten für Defekte in fcc-Cu bzw. fcc-Co dargestellt. In fcc-Cu bilden nur Co-Defekte magnetische Momente aus, deren Werte mit $1.23 \mu_B$ in der Größenordnung des atomaren magnetischen Momentes von fcc-Co mit $1.68 \mu_B$ ist. Die magnetischen Momente der Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten erreichen sowohl in der ferromagnetischen als auch in der nichtmagnetischen Schicht für die inneren Lagen ($\eta_0 = 5$ bzw. $\eta_0 = 13$) annähernd die magnetischen Momente der Defekte in den zugehörigen Volumensystemen. Für Defekte in den Grenzflächenlagen der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, 16\}$) sind die magnetischen Momente durch die angrenzende magnetische Schicht signifikant größer. Für Co-Defekte erreicht das magnetische Moment in den Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten fast den Wert von fcc-Co bzw. den Wert des magnetischen Moment der Co-Grenzflächenlage in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten. Au-, Bi-, und Ir-Defekte bilden für die Defektpositionen η_0 innerhalb der inneren Lagen der nichtmagnetischen Schicht nur geringe magnetische Momente aus, die in der Größenordnung der magnetischen Momente der Cu-Atome innerhalb dieser Schicht sind.

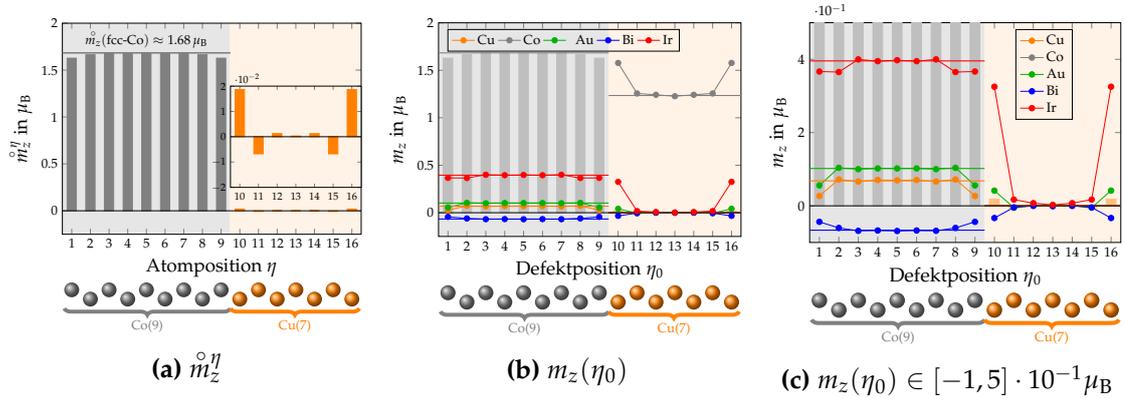


Abbildung 3.1.4.: (a) Magnetische Momente der Co- und Cu-Atome in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$). Zum Vergleich ist das atomare magnetische Moment der Co-Atome in fcc-Co eingezeichnet. (b) Magnetische Momente von Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekt in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 . Zum Vergleich sind sowohl die magnetischen Momente aus (a) und die magnetischen Momente der Defekte in fcc-Cu bzw. fcc-Co eingezeichnet. In (c) ist der Bereich aus (b) auf $m_z \in [-1, 5] \cdot 10^{-1} \mu_B$ eingeschränkt.

3.1.1.3. Zustände auf der Fermi-Fläche

Wie in der Dissertation von Jörg Binder [110] dargestellt, lassen sich die Zustände auf der Fermi-Fläche hinsichtlich der Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit über die Einheitszelle in vier voneinander verschiedene Klassen von Zuständen C infolge des Quantum-Confinements klassifizieren. Die vier verschiedenen Klassen repräsentieren 1. ausgedehnte Zustände (C = AUS) mit einer annähernd homogenen Aufenthaltswahrscheinlichkeit, 2. ferromagnetische Quantum-Well-Zustände (C = FM-QW) mit einer großen Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb der ferromagnetischen Schicht und geringen Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der nichtmagnetischen Schicht, 3. nichtmagnetische Quantum-Well-Zustände (C = NM-QW) mit einer geringen Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb der ferromagnetischen Schicht und einer großen Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der nichtmagnetischen Schicht, und 4. Grenzflächenzustände (C = GF) mit großen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten an den Grenzflächen im Vergleich zu den inneren Lagen der Schicht. Eine Unterscheidung zwischen Grenzflächenzuständen der ferromagnetischen Schicht und Grenzflächenzuständen der nichtmagnetischen Schicht wird nicht berücksichtigt. Für den Algorithmus zur Klassifizierung der Zustände sei ebenfalls auf [110] verwiesen. In Abb. 3.1.5 sind die mittleren Aufenthaltswahrscheinlichkeiten N_C^j für die Einheitszelle der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten dargestellt.

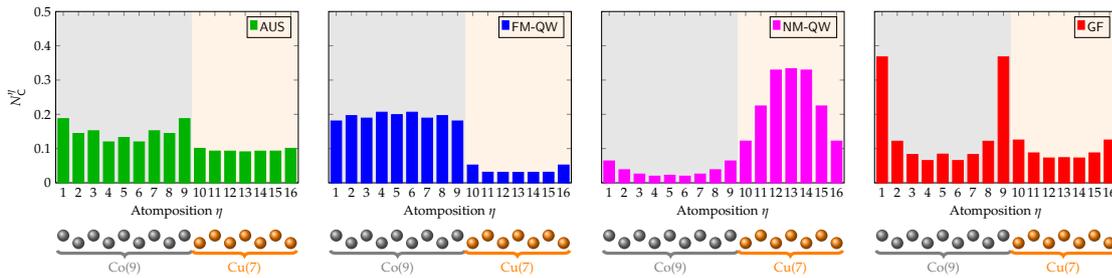


Abbildung 3.1.5.: Mittlere Aufenthaltswahrscheinlichkeit N_C^j bestimmt nach Gleichung (3.2) mit $A_{vs}(\mathbf{k}) := N_{vs}^j(\mathbf{k}; E)$ und $Z := C$ der ausgedehnten Zustände (C = AUS), der Quantum-Well-Zustände der ferromagnetischen Schicht (C = FM-QW), der Quantum-Well-Zustände der nichtmagnetischen Schicht (C = NM-QW), und der Grenzflächenzustände (C = GF).

Sei $A_{vs}(\mathbf{k})$ eine beliebige Größe. Der Mittelwert dieser Größe über die Fermi-Fläche ist über

$$A := \langle A_{vs}(\mathbf{k}) \rangle_{\mathbf{k} \in S_{vs}^F} := \frac{\sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}(\mathbf{k})}{\sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})}} \quad (3.1)$$

gegeben. Möchte man den Mittelwert auf Zustände mit einer bestimmten Eigenschaft Z einschränken, so ist in diesem Fall der Mittelwert aller Zustände mit der Eigenschaft Z

durch

$$A_Z := \langle A_{vs}(\mathbf{k}) \rangle_{\substack{kv_s \in S_{vs}^F \\ kv_s \in Z}} := \frac{\sum_{kv_s \in Z} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}(\mathbf{k})}{\sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})}} \quad (3.2)$$

definiert. Hierbei ist eine abkürzende Schreibweise dafür, dass der Zustand $\psi_{kv_s}^\circ$ die Eigenschaft Z besitzt. Ferner gilt $A = \sum_Z A_Z$.

3.2. Transporteigenschaften von Co/Cu-Vielfachschichten

3.2.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche

3.2.1.1. Tensor der elektrischen Leitfähigkeit

Sowohl Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) als auch fcc-Co mit Magnetisierung in z -Richtung besitzen die magnetische Punktgruppe $m'm'4/m$ [168, 169]. Hierbei ist der Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\widehat{\sigma}$ durch

$$\widehat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{yx} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

gegeben [146]. Für fcc-Cu mit Spin-Quantisierungsachse in z -Richtung und magnetischen Defekten beschreibt Gleichung (3.3) den Tensor der elektrischen Leitfähigkeit. Für nichtmagnetische Defekte in fcc-Cu ist der Tensor der elektrischen Leitfähigkeit diagonal, wobei weiterhin $\sigma_{yy} = \sigma_{xx}$ und $\sigma_{zz} \neq \sigma_{xx}$ gilt. Aufgrund der vorliegenden vierzähligen Drehachse um die z -Richtung gilt $\sigma_{yy} = \sigma_{xx}$ und $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$. Hingegen sind σ_{xx} und σ_{zz} im Allgemeinen verschieden. In den Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) liegt der Unterschied zwischen σ_{xx} und σ_{zz} einerseits an der Geometrie der Co/Cu-Vielfachschicht (Normalenvektor der Co/Cu-Grenzfläche in z -Richtung) und andererseits an der Richtung der Magnetisierung ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$), wobei letzter ein relativistischer Effekt ist. Dieser ist auch in fcc-Co und fcc-Cu für $\sigma_{zz} \neq \sigma_{xx}$ verantwortlich. Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten in Co/Cu-Vielfachschichten wurden bereits in der Vergangenheit untersucht [159].

3.2.1.1.1 Longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ^\perp

Entsprechend Gleichung (G.12) zusammen mit Gleichung (3.3) ist für ein äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\widehat{\mathbf{E}}$ in x -Richtung ($\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{x}}$) die longitudinale elektrische Leitfähigkeit $\sigma^\perp(\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{x}}) = \sigma_{xx}$ durch σ_{xx} gegeben, während für ein äußeres elektrisches Feld in z -Richtung ($\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{z}}$) für die longitudinale elektrische Leitfähigkeit $\sigma^\perp(\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{z}}) = \sigma_{zz}$ gilt.

3.2.1.1.1.1 Longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{xx}

In Abb. 3.2.1 sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} sowohl von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten als auch von fcc-Co und fcc-Cu mit substitutionellen Defekten (Cu, Co, Au, Bi, Ir) dargestellt. Hierbei repräsentiert jede Defektposition η_0 eine andere Probe. Die

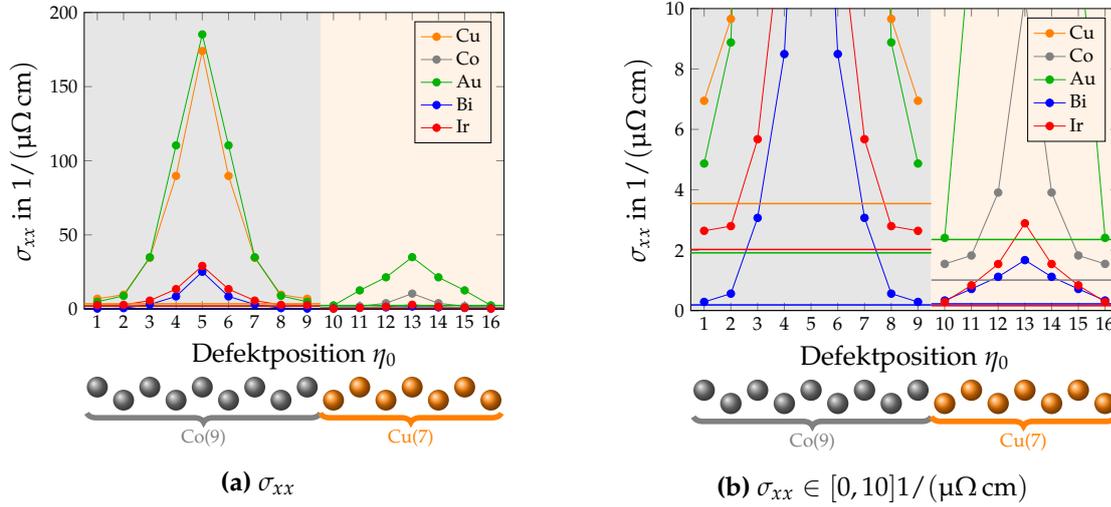


Abbildung 3.2.1: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{xx} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten (\bullet). Die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten von fcc-Cu mit Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten und fcc-Co mit Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten sind als waagerechte Linien eingetragen. Sämtliche longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} der Volumensysteme sind kleiner als $5 1/(\mu\Omega \text{ cm})$, sodass aus Gründen der Darstellung in (b) die y -Achse auf das Intervall $[0, 10] 1/(\mu\Omega \text{ cm})$ eingeschränkt wurde. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1 \text{ at.}\%$.

longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} der Volumensysteme sind im Allgemeinen kleiner als die kleinste longitudinale elektrische Leitfähigkeit der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten, d.h. $\sigma_{xx}^{\text{fcc-L}} \leq \min_{\eta_0 \in L} \sigma_{xx}(\eta_0)$ mit $L \in \{\text{FM}, \text{NM}\}$. Für alle untersuchten Defekte ist die Abhängigkeit der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{xx} von der Defektposition η_0 ähnlich. Für einen individuellen Defekt sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) im Mittel größer als für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$). Innerhalb einer Schicht (ferromagnetisch oder nichtmagnetisch) sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} am größten, falls der Defekt in der zentralen Lage der entsprechenden Schicht ($\eta_0 = 5$ bzw. $\eta_0 = 13$) lokalisiert ist. Je geringer der Abstand des Defektes von der Co/Cu-Grenzfläche ist, desto geringer werden die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} . Ähnliche Ergebnisse auf Grundlage der nichtrelativistischen Schrödinger-Gleichung sind in Referenz [166] zu finden. Die Graphen $(\eta_0, \sigma_{xx}(\eta_0))$ sind innerhalb der ferromagnetischen Schicht achsensymmetrisch zur zentralen Lage ($\eta_0 = 5$)

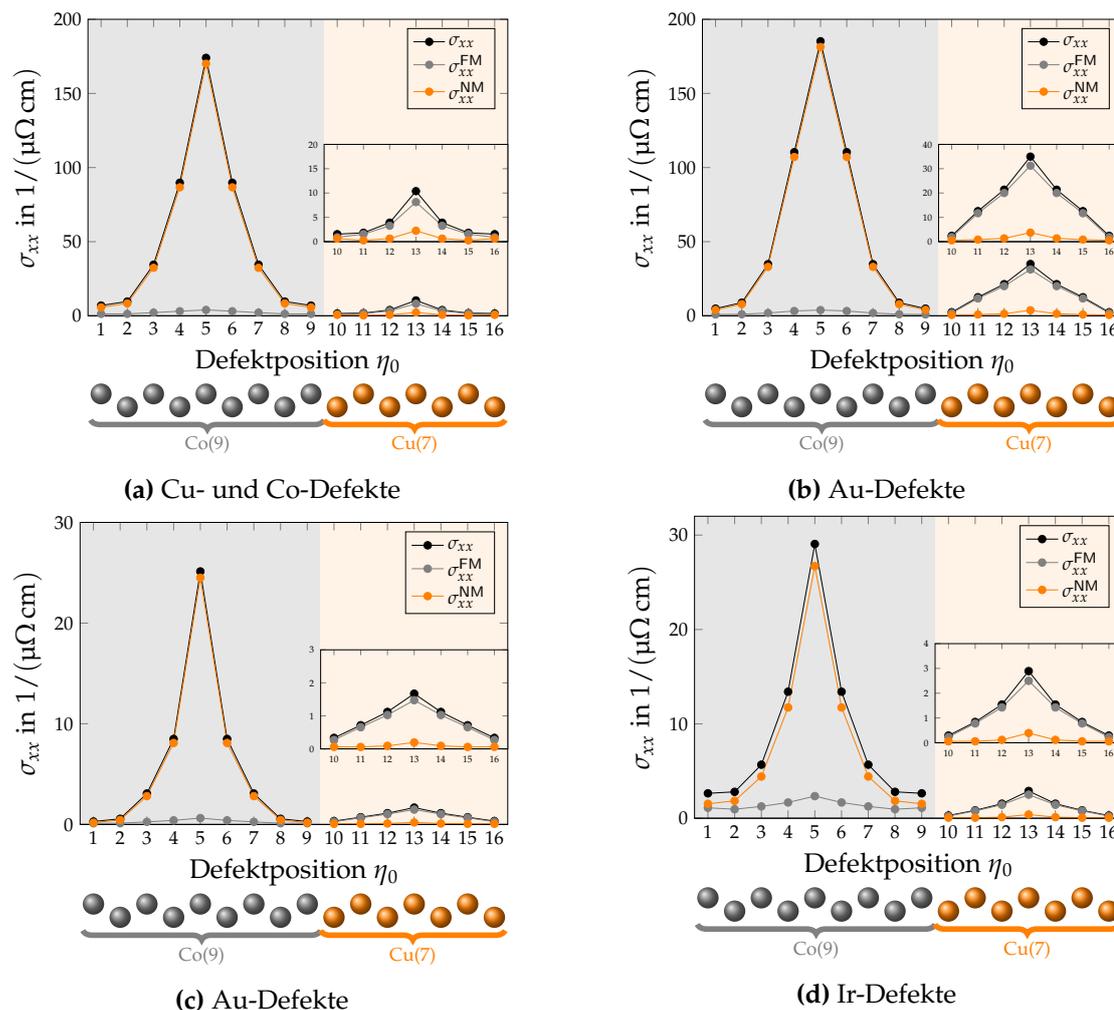


Abbildung 3.2.2.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{xx} für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Zusätzlich sind die individuellen Beiträge der ferromagnetischen Schicht σ_{xx}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht σ_{xx}^{NM} dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

und innerhalb der nichtmagnetischen Schicht achsensymmetrisch zur entsprechenden zentralen Lage ($\eta_0 = 13$).

Beiträge der ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schicht

Wie in Abb. 3.2.1 sind in Abb. 3.2.2 ebenfalls die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit

Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) dargestellt. Zusätzlich sind in Abb. 3.2.2 die individuellen Beiträge der ferromagnetischen Schicht σ_{xx}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht σ_{xx}^{NM} mit $\sigma_{xx} = \sigma_{xx}^{\text{FM}} + \sigma_{xx}^{\text{NM}}$ eingezeichnet. Diese sind in Gleichung (J.2) definiert. Ausgehend von Abb. 3.2.2 zeigt sich, dass die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) fast ausschließlich durch die Beiträge der nichtmagnetischen Schicht σ_{xx}^{NM} bestimmt werden, während für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) die ferromagnetische Schicht dominiert, sodass insgesamt

$$\sigma_{xx}(\eta_0) \approx \begin{cases} \sigma_{xx}^{\text{NM}}(\eta_0) & \text{für } \eta_0 \in \text{FM} \\ \sigma_{xx}^{\text{FM}}(\eta_0) & \text{für } \eta_0 \in \text{NM} \end{cases} \quad (3.4)$$

gilt.

Beiträge der verschiedenen Klassen an Zuständen

Um diese Beobachtung zu verstehen, ist es hilfreich zu untersuchen, welche Zustände der Fermi-Fläche wie zur longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{xx} beitragen. Wie in Abschnitt 3.1.1.3 dargestellt, lassen sich die Zustände auf der Fermi-Fläche im wesentlichen in vier verschiedene Klassen einteilen. Neben der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{xx} sind in Abb. 3.2.3 die individuellen Beiträge der ausgedehnten Zustände σ_{xx}^{AUS} , der Quantum-Well-Zustände der ferromagnetischen Schicht $\sigma_{xx}^{\text{FM-QW}}$, der Quantum-Well-Zustände der nichtmagnetischen Schicht $\sigma_{xx}^{\text{NM-QW}}$, und der Grenzflächenzustände σ_{xx}^{GF} dargestellt. Es gilt $\sigma_{xx} = \sum_C \sigma_{xx}^C$. Diese sind entsprechend Anhang J.2 definiert. Hierbei zeigt sich, dass für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} fast ausschließlich durch die Quantum-Well-Zustände der nichtmagnetischen Schicht $\sigma_{xx}^{\text{NM-QW}}$ bestimmt werden, während für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) es im Wesentlichen die Quantum-Well-Zustände der ferromagnetischen Schicht $\sigma_{xx}^{\text{FM-QW}}$ sind. Zusammengefasst gilt also

$$\sigma_{xx}(\eta_0) \approx \begin{cases} \sigma_{xx}^{\text{NM-QW}}(\eta_0) & \text{für } \eta_0 \in \text{FM} \\ \sigma_{xx}^{\text{FM-QW}}(\eta_0) & \text{für } \eta_0 \in \text{NM} \end{cases} \quad (3.5)$$

Entsprechendes wurde bereits in früheren Rechnungen an Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten beobachtet. Hierzu sei auf Abbildung 8.13 (rechts) in Referenz [110] verwiesen. Wie in Anhang H.1.1.1.1 dargestellt ist der Einfluss des *scattering in*-Beitrag des mittleren freien Weglänge zur longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{xx} gegenüber dem *scattering out*-Beitrag zu vernachlässigen. In anisotroper Relaxationszeitnäherung

$$\Lambda_{vs}(\mathbf{k}; \eta_0) \approx \Lambda_{vs}^{(0)}(\mathbf{k}; \eta_0) = \tau_{vs}(\mathbf{k}; \eta_0) v_{vs}(\mathbf{k}) \quad (3.6)$$

ist die longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{xx} durch

$$\sigma_{xx}^{(0)}(\eta_0) = \zeta_{\sigma} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \tau_{vs}(\mathbf{k}; \eta_0) (v_{vs}^x(\mathbf{k}))^2 \quad (3.7)$$

3. Ergebnisse

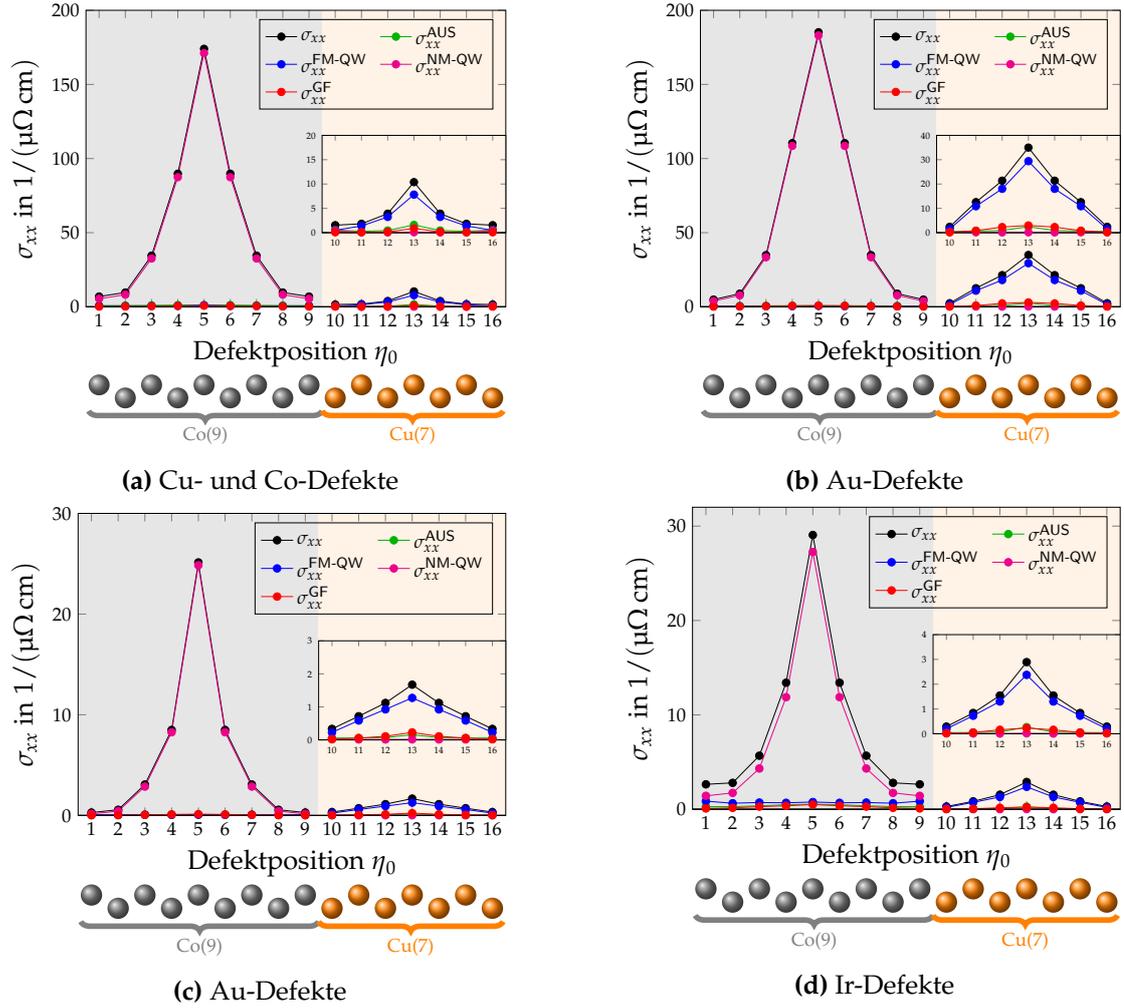


Abbildung 3.2.3.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{xx} für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$). Zusätzlich sind die individuellen Beiträge der Klassen σ_{xx}^C mit $C \in \{\text{AUS, FM-QW, NM-QW, GF}\}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

gegeben. Damit ein Zustand wesentlich zur longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{xx} beiträgt, sind einerseits eine hinreichend große Relaxationszeit $\tau_{vs}(\mathbf{k}; \eta_0)$ und andererseits eine hinreichend große Geschwindigkeitskomponente in x -Richtung $v_{vs}^x(\mathbf{k})$ notwendig. Die mittleren Relaxionszeiten der verschiedenen Klassen $\tau_C(\eta_0)$ werden unter Verwendung von Gleichung (3.2) mit $Z := C$ und $A_{vs}(\mathbf{k}) := \tau_{vs}(\mathbf{k}; \eta_0)$ bestimmt, und sind als Funktion von Defekttyp und Defektposition η_0 in Abb. 3.2.5 dargestellt. Betrachtet man zunächst einen Defekt in der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$), wie in Abb. 3.2.4 (a) schematisch dargestellt, und hierzu einen einzelnen Streuprozess, der

durch das Übergangsmatrixelement $T_{kvs \rightarrow k'v's'}$ aus Gleichung (2.126) beschrieben wird. Da die durch den Defekt induzierte Potentialänderung $\Delta\mathcal{U}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) = \mathcal{U}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) - \overset{\circ}{\mathcal{U}}(\mathbf{r})$ bzw. $\Delta U^\eta(\mathbf{r}; \eta_0) = U^\eta(\mathbf{r}; \eta_0) - \overset{\circ}{U}^\eta(\mathbf{r})$ auf wenige Lagen um die Defektposition \mathbf{r}_0 bzw. η_0 beschränkt ist, führt eine große bzw. kleine Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Bloch-Zustandes $\overset{\circ}{\psi}_{kvs}$ an der Defektposition zu einem großen bzw. kleinen Übergangsmatrixelement. Die Quantum-Well-Zustände der Cu-Schicht (NM-QW) besitzen eine geringe Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb der Co-Schicht ($\eta \in \{1, \dots, 9\}$), insbesondere am Ort des Defektes, und werden durch den Defekt kaum gestreut. Die Übergangswahrscheinlichkeit entsprechend Gleichung (2.128) ist relativ gering, was wegen Gleichung (2.139) folglich eine große Relaxationszeit dieses Zustandes bewirkt. Die ausgedehnten Zustände, die Quantum-Well-Zustände der Co-Schicht, und die Grenzflächenzustände besitzen, wie in Abb. 3.2.4 dargestellt, im Vergleich zu den Quantum-Well-Zuständen der Cu-Schicht eine relativ große Aufenthaltswahrscheinlichkeit und werden so durch den Defekt stärker gestreut. Deshalb haben sie wie in Abb. 3.2.5 eine geringere Relaxationszeit als die Cu-Quantum-Well-Zustände und tragen entsprechend Gleichung (3.7) wesentlich geringer zur longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{xx} bei. Ist andererseits ein Defekt in der Cu-Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) lokalisiert, so kann die Argumentation analog geführt werden, wobei die Rollen der Quantum-Well-Zustände der ferromagnetischen Schicht und der Quantum-Well-Zustände der nichtmagnetischen Schicht vertauscht werden. Die Abhängigkeit der Relaxationszeiten der verschiedenen Klassen an Zuständen ist konsistent mit früheren Rechnungen an Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Cu- und Co-Defekten. Siehe hierzu Abbildung 8.4 in Referenz [110].

Das Ausbilden der starken Abhängigkeit der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit von der Defektposition ist eine direkte Folge der Heterostruktur und des damit verbundenen Quantum Confinement. Das Auftreten von hochleitenden Kanälen in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten wird *channeling effect* bezeichnet [170, 171]. Während die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} für Defekte in der zentralen Lage der Cu-Schicht im Allgemeinen um eine Größenordnung größer sind als die entsprechenden Leitfähigkeiten für Defekte in der zentralen Lage der Co-Schicht unterscheiden sich die mittleren Relaxationszeiten nicht im gleichen Maße. Sie können sogar wie für Au-Defekte in der Co-Schicht größer sein als für entsprechende Defekte in der Cu-Schicht. Für eine vollumfängliche Beschreibung der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} ist entsprechend Gleichung (3.7) die Berücksichtigung der Geschwindigkeit $v_{vs}^x(\mathbf{k})$ notwendig. Dies soll hier nicht betrachtet werden.

Vergleich der verschiedenen Defekte

Entsprechend Tabelle 3.1.2 sind die Elektronenkonfigurationen der Valenzelektronen sowohl von atomarem Kupfer als auch von atomarem Gold gleich, d.h. sie verfügen über ein vollbesetztes d -Orbital und ein einzelnes ungepaartes s -Elektron. Bringt man nun einen Au-Defekt in die Cu-Schicht von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten ein, so ist ausgehend von der Tatsache, dass Cu und Au isovalent sind, zu erwarten, dass die durch den Au-Defekt hervorgerufene Potentialänderung geringer ist als für Co-, Ir-,

3. Ergebnisse

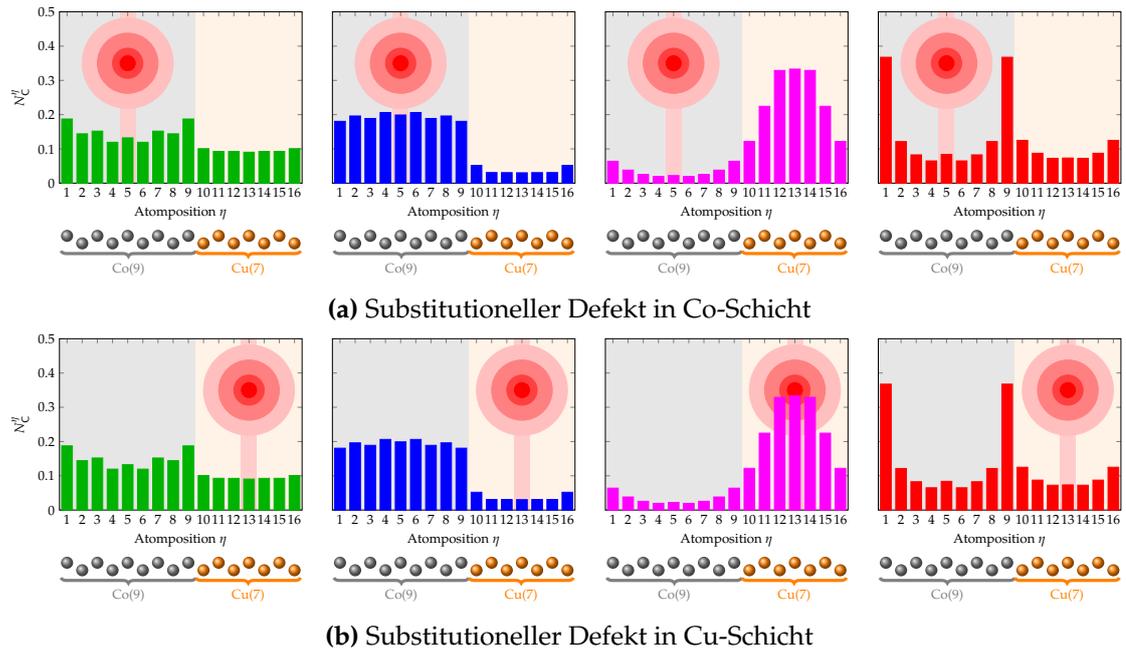


Abbildung 3.2.4.: Mittlere Aufenthaltswahrscheinlichkeit N_C^η bestimmt nach Gleichung (3.2) mit $A_{vs}(k) := N_{vs}(k)$ und $Z := C$ der ausgedehnten Zustände, der FM-Quantum-Well-Zustände, der NM-Quantum-Well-Zustände, und der Grenzflächenzustände. Der Defekt ist bei (a) in der Co-Schicht lokalisiert und bei (b) in der Cu-Schicht lokalisiert. Die durch den Defekt induzierte Potentialänderung ist auf wenige Lagen um die Defektposition begrenzt.

oder Bi-Defekte. Die Folge ist, dass die Streuung der Leitungselektronen an Au-Defekten im Vergleich schwächer ist, die Relaxationszeiten entsprechend größer, und deshalb für Au-Defekte eine größere longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{xx} zu erwarten ist. Bei Ir-Defekten in der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) sind die integralen Werte weiterhin von dem jeweiligen Beitrag der Cu-Schicht dominiert, doch ist der Beitrag der Co-Schicht ausgeprägter im Vergleich zu den Eigendefekten und anderen Fremddefekten.

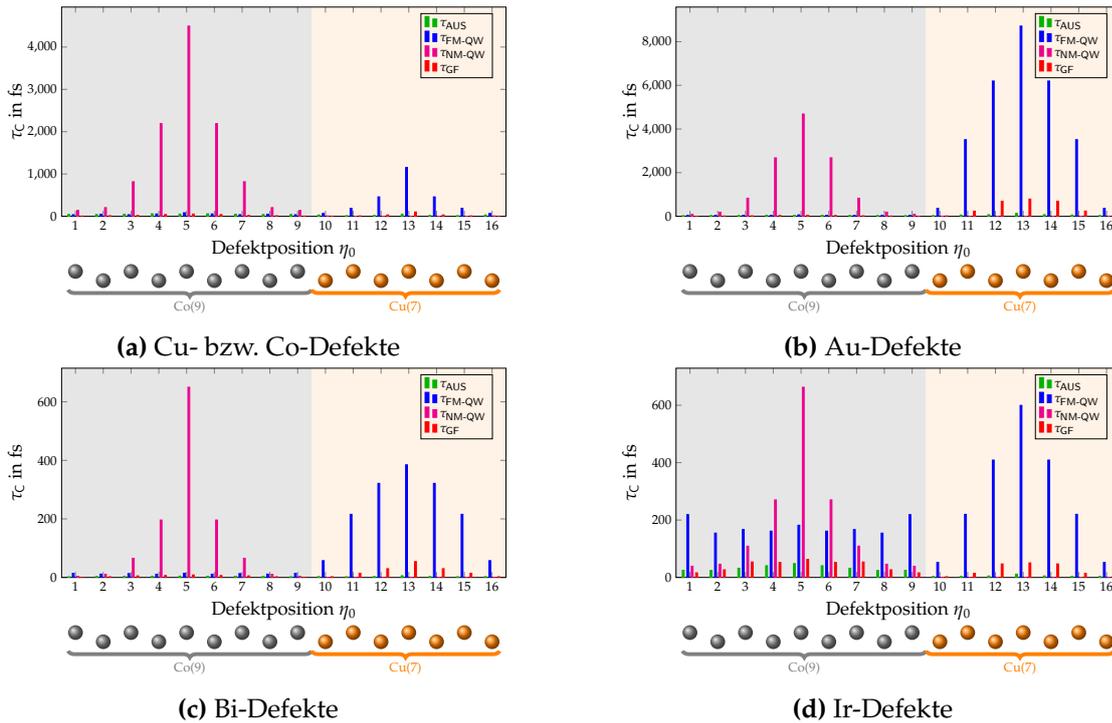


Abbildung 3.2.5.: Mittlere Relaxationszeiten für die unterschiedlichen Klassen τ_C in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für **(a)** Cu- und Co-Defekte, **(b)** Au-Defekte, **(c)** Bi-Defekte, und **(d)** Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

3.2.1.1.1.2 Longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{zz}

Neben der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{xx} wird im Folgenden die longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{zz} betrachtet. Für ein äußeres elektrisches Feld $E = E\hat{E}$ in z -Richtung ($\hat{E} = \hat{z}$) bestimmt die longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{zz} über das Ohmsche Gesetz $j_z(E) = \sigma_{zz}E$ zusammen mit dem elektrischen Feld die Stärke der elektrischen Stromdichte senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche. Diese sind für die untersuchten Defekte (Co, Cu, Au, Bi, Ir) sowohl für die Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten als auch für fcc-Cu und fcc-Co in Abb. 3.2.6 dargestellt.

Vergleich zwischen Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten und fcc-Co bzw. fcc-Cu

In fcc-Co und fcc-Cu sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} und σ_{zz} nahezu identisch. Der Unterschied ist ausschließlich auf die Spin-Bahn-Wechselwirkung zurückzuführen und durch die Wahl der z -Richtung als Spin-Quantisierungsachse bzw. als Richtung der Magnetisierung bedingt. In den betrachteten Co/Cu-Vielfachschichten sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{zz} in Abhängigkeit vom

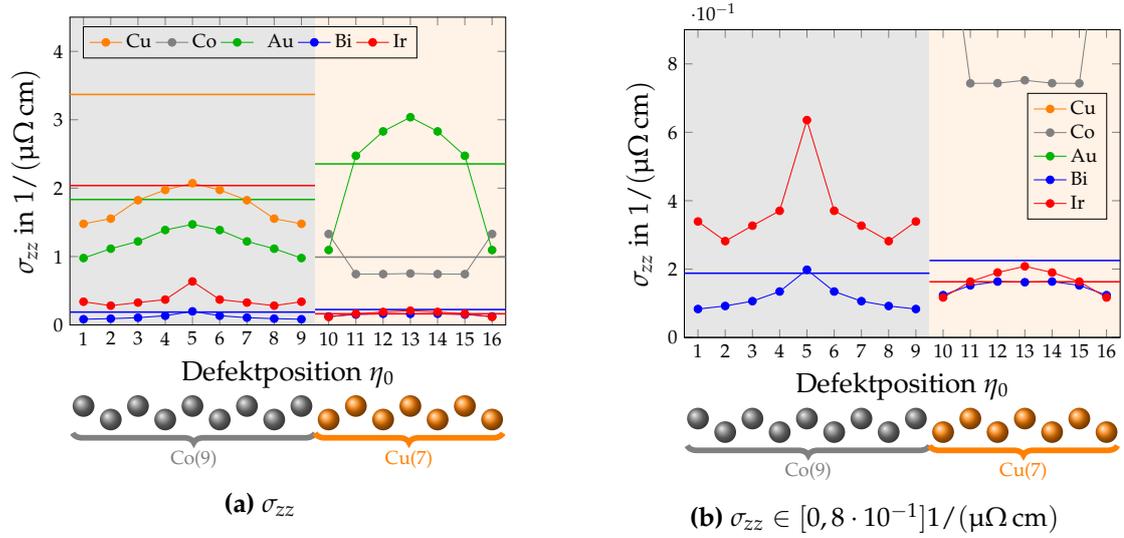


Abbildung 3.2.6.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{zz} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$), fcc-Co mit Magnetisierung in z -Richtung, und fcc-Cu mit Spin-Quantisierungsachse in z -Richtung mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten. Die Werte der Volumensysteme sind als Linien eingetragen. Zur besseren Darstellung der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{zz} für Bi- und Ir-Defekte ist in (b) der Bereich der y -Achse eingeschränkt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

Defekt um eine bzw. zwei Größenordnungen kleiner als die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} aus Abb. 3.2.1. Ihre Größenordnung entspricht annähernd der Größenordnung der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} und σ_{zz} der zugrundeliegenden Volumensysteme.

Beiträge der verschiedenen Klassen an Zuständen

Wie bei der Diskussion der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} bietet es sich für das Verständnis der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{zz} an, die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{zz} nach den vier verschiedenen Klassen an Zuständen zu zerlegen. In Abb. 3.2.7 sind sowohl die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{zz} als auch die Beiträge der verschiedenen Klassen an Zuständen für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) dargestellt. In der Näherung anisotroper Relaxationszeit entsprechend Gleichung (3.6) ist die longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{zz} durch

$$\sigma_{zz}^{(0)}(\eta_0) = \zeta_{\hat{\sigma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \tau_{vs}(\mathbf{k}; \eta_0) (v_{vs}^z(\mathbf{k}))^2 \quad (3.8)$$

gegeben. Ausgehend von dieser Beziehung tragen besonders Zustände zu σ_{zz} bei, die eine große z -Komponente der Geschwindigkeit ($v_{vs}^z(\mathbf{k})$) haben und eine große Relaxati-

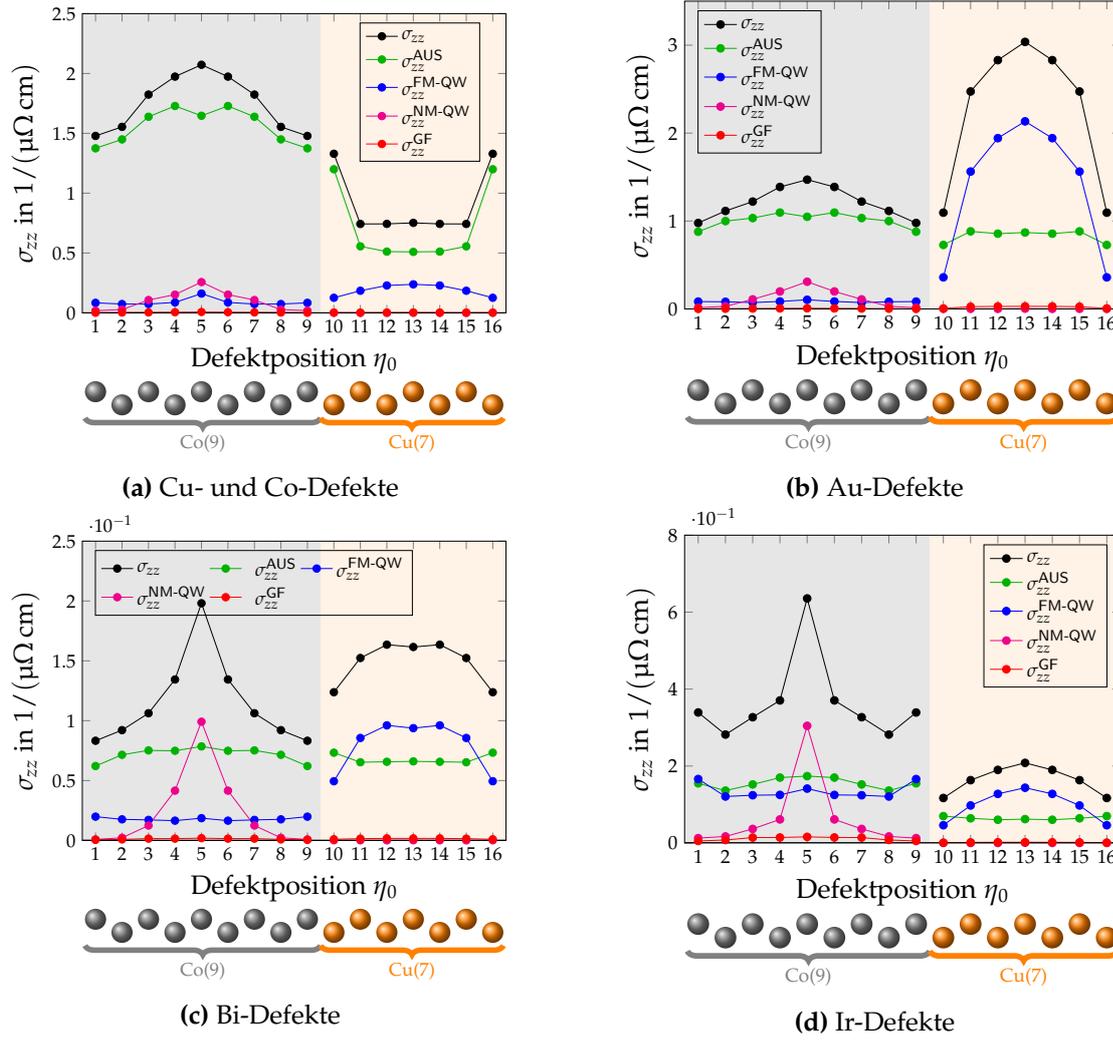


Abbildung 3.2.7.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{zz} in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Zusätzlich sind die Beiträge der ausgedehnten Zustände σ_{xx}^{AUS} , der Quantum-Well-Zustände der ferromagnetischen Schicht $\sigma_{xx}^{\text{FM-QW}}$, die Quantum-Well-Zustände der nichtmagnetischen Schicht $\sigma_{xx}^{\text{NM-QW}}$, und der Grenzflächenzustände σ_{xx}^{GF} entsprechend Gleichung (J.4) dargestellt. Hierbei gilt $\sigma_{xx}(\eta_0) = \sigma_{xx}^{\text{AUS}}(\eta_0) + \sigma_{xx}^{\text{FM-QW}}(\eta_0) + \sigma_{xx}^{\text{NM-QW}}(\eta_0) + \sigma_{xx}^{\text{GF}}(\eta_0)$. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1 \text{ at.}\%$.

onszeit $\tau_{vs}(\mathbf{k}; \eta_0)$, d.h. im Wesentlichen eine geringe Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Ort des Defektes. Wie in Abb. 3.2.7 dargestellt, tragen mehrheitlich die ausgedehnten Zustände zur longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{zz} bei, da diese eine vergleichs-

weise große Geschwindigkeit in z -Richtung haben. Sowohl die Quantum-Well-Zustände als auch die Grenzflächenzustände haben eine deutlich geringere Geschwindigkeit in z -Richtung. Die Häufigkeitsverteilungen von v^z sind für die verschiedenen Klassen an Zuständen in Abb. F.4.1 (b) in Anhang F.4.1.1 dargestellt. Während die Anzahl der Quantum-Well-Zustände (FM-QW, NM-QW) und der Grenzflächenzustände (GF) zu höheren Geschwindigkeiten v^z um mehrere Größenordnungen geringer wird, besitzen die ausgedehnten Zustände (AUS) hingegen bis zu großen Geschwindigkeiten ($v^z \approx 10^6 \text{m/s}$) eine Vielzahl an Zuständen. Da die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der ausgedehnten Zustände annähernd homogen über die Probe verteilt sind, ist die Streuung dieser Zustände für alle Defektpositionen annähernd gleich. Die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{zz} sollte daher für alle Defektpositionen annähernd gleich sein. Abweichungen von dieser idealisierten Vorstellung sind in den hier betrachteten Co/Cu-Vielfachschichten zu beobachten. Die Quantum-Well-Zustände haben unter Umständen einen Beitrag gleicher Größenordnung zur longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{zz} wie die ausgedehnten Zustände. Bisweilen ist der Beitrag der Quantum-Well-Zustände sogar der dominierende wie z. B. Au-Defekten in der Cu-Schicht mit Ausnahme der Grenzflächenlagen. Der Grund liegt darin, dass auch die Quantum-Well-Zustände eine Geschwindigkeit in z -Richtung haben, wenn diese auch wesentlich kleiner ist als ihre Geschwindigkeiten in x - bzw. y -Richtung. Darüberhinaus berücksichtigt die longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{zz} neben der Geschwindigkeit in z -Richtung auch die Relaxationszeit der Zustände. Die mittleren Relaxationszeiten τ_C sind in Abb. 3.2.5 dargestellt. Wie in Abschnitt 3.2.1.1.1 erläutert besitzen die Quantum-Well-Zustände der ferromagnetischen Schicht große Relaxationszeiten, falls der Defekt in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) ist. Für diese Defektpositionen besitzen die Quantum-Well-Zustände einen wesentlichen Beitrag zur longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{zz} . Ebenso tragen für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) die Quantum-Well-Zustände der nichtmagnetischen Schicht bei, wie am Beispiel von Bi- und Ir-Defekten sichtbar. Die Beiträge der Quantum-Well-Zustände sind maximal für Defekte in den zentralen Lagen, und nehmen ab, je näher der Defekt der Co/Cu-Grenzfläche ist. Zum Vergleich sei wiederum auf [110] verwiesen, wobei Abbildung 8.21 (rechts oben) in Referenz [110] die zu Abb. 3.2.7 (a) entsprechende Abbildung ist. Hierbei wird σ_{zz} mit σ_{\perp} bezeichnet.

3.2.1.1.2 Anomale Hall-Leitfähigkeit σ^{AHE}

Wie in Abb. 3.2.8 (a) dargestellt besitzt die elektrische Stromdichte j eine Komponente senkrecht zum äußeren elektrischen Feld E und zur Magnetisierung M . Dessen Auftreten wird als anomaler Hall-Effekt bezeichnet und die zugehörige Komponente der elektrischen Stromdichte als anomale Hall-Stromdichte j^{AHE} .

Der zugehörige lineare Antworttensor, d.h. der Tensor der anomalen Hall-Leitfähigkeit, ist im Allgemeinen durch

$$\hat{\sigma}^{\text{AHE}} := \frac{1}{2} \left(\hat{\sigma}^{\text{U}} - \left(\hat{\sigma}^{\text{U}} \right)^T \right) \quad (3.9)$$

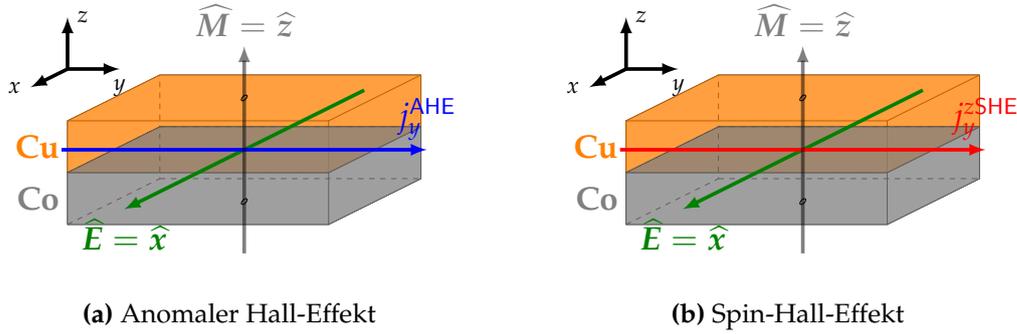


Abbildung 3.2.8.: Schematische Darstellung des (a) anomalen Hall-Effektes und (b) Spin-Hall-Effektes in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) hervorgerufen durch ein äußeres elektrisches Feld E in x -Richtung ($\widehat{E} = \widehat{x}$). Die anomale Hall-Stromdichte j_y^{AHE} in (a) und die Spin-Hall-Stromdichte j_y^{SHE} in (b) sind parallel zur Co/Cu-Grenzfläche, d.h. in y -Richtung, orientiert.

definiert. Hierbei stellt $\widehat{\sigma}^{\text{U}}$ den unter Zeitumkehr ungeraden Anteil des Tensors der elektrischen Leitfähigkeit $\widehat{\sigma}$ mit $R(\mathcal{T})\widehat{\sigma}^{\text{U}} = -\widehat{\sigma}^{\text{U}}$ dar [172]. In den betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) gilt entsprechend Tabelle E.2.7 (a) in Anhang E.2

$$\widehat{\sigma}^{\text{AHE}} = \widehat{\sigma}^{\text{U}} = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_{yx} & 0 \\ \sigma_{yx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Für ein beliebiges äußeres elektrisches Feld $E = E\widehat{E}$ ist die anomale Hall-Leitfähigkeit $\sigma^{\text{AHE}}(\widehat{E})$ entsprechend Gleichungen (3.10) und (G.22) unabhängig von der Richtung der *in plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feldes $\widehat{E}_{\parallel} = (\cos \varphi \sin \vartheta, \sin \varphi \sin \vartheta, 0)^T$. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird $\widehat{E} = \widehat{x}$ gewählt und es gilt $\sigma^{\text{AHE}}(\widehat{E}) = \sigma_{yx} =: \sigma_{yx}^{\text{AHE}}$. In den Rechnungen werden σ_{yx} und σ_{xy} unabhängig voneinander berechnet. Aus Gründen der numerischen Genauigkeit, wie in Anhang B.2.1.1.1.1 erläutert, wird die anomale Hall-Leitfähigkeit entsprechend durch $\sigma_{yx}^{\text{AHE}} := 1/2(\sigma_{yx} - \sigma_{xy})$ bestimmt. Der Ausdruck für ein beliebiges äußeres elektrisches Feld ist in Anhang G dargestellt.

3.2.1.1.2.1 Anomale Hall-Leitfähigkeit σ_{yx}^{AHE}

In Abb. 3.2.9 sind die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten dargestellt. Zum Vergleich sind die entsprechenden anomalen Hall-Leitfähigkeiten der Volumensysteme fcc-Cu mit Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten und fcc-Co mit Cu-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten eingezeichnet. Die Systeme

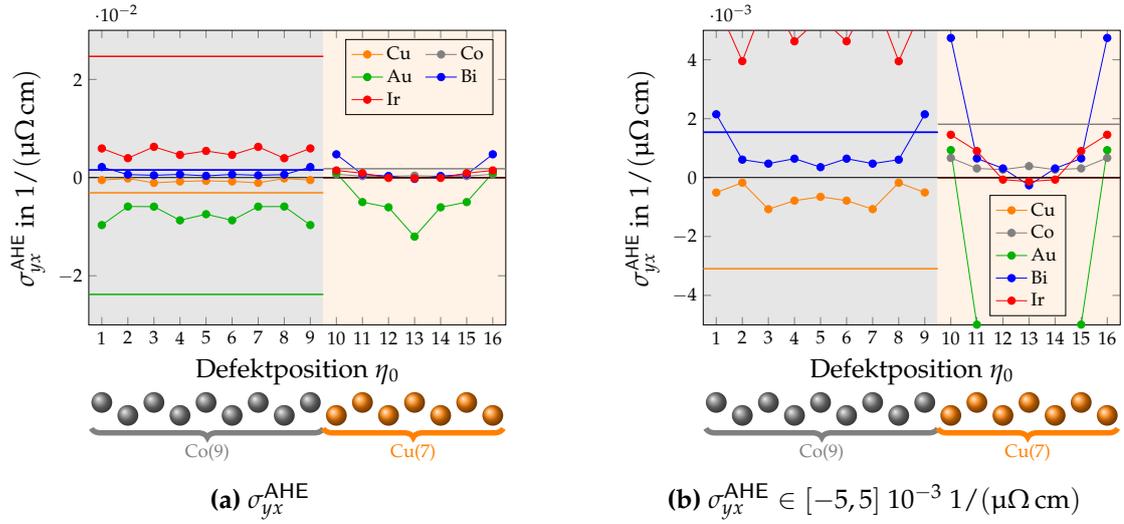


Abbildung 3.2.9.: (a) Anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$), fcc-Co mit Magnetisierung in z-Richtung, und fcc-Cu mit Spin-Quantisierungsachse in z-Richtung mit substitutionellen Defekten (Cu, Co, Au, Bi, Ir). Man beachte, dass die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} für nichtmagnetische Defekte in fcc-Cu Null sind. In (b) ist der Bereich zur besseren Darstellung auf $[-5, 5] \cdot 10^{-3} \text{ 1}/(\mu\Omega \text{ cm})$ eingeschränkt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1 \text{ at.}\%$.

fcc-Cu(Au), fcc-Cu(Bi), und fcc-Cu(Ir) sind nichtmagnetisch. Ein anomaler Hall-Effekt tritt hier nicht auf, sodass die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} verschwinden.

Vergleich zwischen Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten und fcc-Co bzw. fcc-Cu

In einem ersten Vergleich zwischen den anomalen Hall-Leitfähigkeiten der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten und fcc-Cu bzw. fcc-Co, zeigt sich, dass die anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} in fcc-Cu und fcc-Co im Allgemeinen größer sind als die anomalen Hall-Leitfähigkeiten der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten. Ausnahmen bilden z. B. die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Bi-Defekten in den Grenzflächenlagen der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, 9\}$). Wie in [H3] untersucht, wird der *skew scattering*-Beitrag zur anomalen Hall-Leitfähigkeit in Systemen mit einer vielblättrigen Fermi-Fläche stark unterdrückt. Die Fermi-Flächen von fcc-Cu, fcc-Co, und Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) sind in Anhang F.3 dargestellt. Während fcc-Cu eine einblättrige Fermi-Fläche besitzt, besitzt fcc-Co eine vierblättrige Fermi-Fläche und die Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten eine 29-blättrige Fermi-Fläche. Bereits der *skew scattering*-Beitrag zur anomalen Hall-Leitfähigkeit ist in fcc-Co im Vergleich zu fcc-Cu unterdrückt [H3]. Somit bietet die vielblättrige Fermi-Fläche der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten eine Erklärung für die um eine Größenordnung kleineren anomalen Hall-Leitfähigkeit in

Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten. Es zeigt sich jedoch, dass die Vorzeichen der anomalen Hall-Leitfähigkeiten in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten für einen bestimmten Defekt X mit $X \in \{\text{Co}, \text{Cu}, \text{Au}, \text{Bi}, \text{Ir}\}$ in der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) mit der anomalen Hall-Leitfähigkeit von fcc-Co(X) bzw. in der Cu-Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) mit der anomalen Hall-Leitfähigkeit von fcc-Cu(X) übereinstimmen, wobei lediglich fcc-Cu mit Co-Defekten ($X := \text{Co}$) eine endliche anomale Hall-Leitfähigkeit besitzt.

Vergleich der verschiedenen Defekte

Vergleicht man die Defekte untereinander, so beobachtet man im Allgemeinen größere anomale Hall-Leitfähigkeiten für Au-, Bi-, und Ir-Defekte verglichen mit den entsprechenden Leitfähigkeiten für Cu- bzw. Co-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$). Gleiches zeigt sich für fcc-Cu und fcc-Co. In [48, 51, 113] wurde der *skew scattering*-Beitrag zum Spin-Hall-Effekt in fcc-Au, fcc-Cu, und fcc-Pt untersucht. Große Spin-Hall-Leitfähigkeiten treten einerseits in Systemen mit einem Wirt eines schweren Elements z. B. Au und einem Defekt eines leichten Elements z. B. C und andererseits in Systemen mit einem Wirt eines leichten Elements z. B. Cu und einem Defekt eines schweren Elements z. B. Bi auf. Wie in der Einleitung erläutert, lassen sich über das *skew scattering*, die spinabhängige Streuung an Defekten aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung, der Spin-Hall-Effekt und der anomale Hall-Effekt in gleicher Weise beschreiben. Schwere Elemente besitzen im Allgemeinen eine stärkere Spin-Bahn-Wechselwirkung als leichte Elemente. Weniger als die Spin-Bahn-Wechselwirkung des Defektatoms, ist der Unterschied zwischen den Spin-Bahn-Wechselwirkungen des Wirtatoms und des Defektatoms entscheidend. Sowohl in den Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten als auch in fcc-Cu bzw. fcc-Co, bestehend aus Atomen leichter Elemente, ist dieser Unterschied umso größer, falls der Defekt ein Atom eines schweren Elements wie Au ist. Entsprechend ist in diesen Systemen das *skew scattering* stärker und somit liefern schwere Elemente wie Au, Bi, Ir als Defekte in fcc-Cu, fcc-Co, und Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten größere anomale Hall-Leitfähigkeiten als Cu- oder Co-Defekte (leichte Elemente) [48, 51, 113].

Entsprechend Abb. 3.2.1 sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} maximal für Defekte in den zentralen Lagen ($\eta_0 = 5$ und $\eta_0 = 13$) und minimal für Defekte in den Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{1, 9\}$ und $\eta_0 \in \{10, 16\}$). Dieses qualitativ gleiche Verhalten beobachtet man für alle Defekte und zwar sowohl für Defektpositionen innerhalb der ferromagnetischen als auch für Defektpositionen in der nichtmagnetischen Schicht. Für die anomale Hall-Leitfähigkeiten in Abb. 3.2.9 können keine allgemeingültigen Beobachtungen getroffen werden. Es zeigen sich qualitative Unterschiede. Während für Co-, Bi-, und Ir-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) die betragsmäßig maximale anomale Hall-Leitfähigkeit für Defekte in den Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{10, 16\}$) erreicht werden, wird diese für Au-Defekte in der zentralen Lage ($\eta_0 = 13$) beobachtet. Tendenziell sind aber die anomalen Hall-Leitfähigkeiten am größten in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Defekten in den Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{1, 9\}$ und $\eta_0 \in \{10, 16\}$).

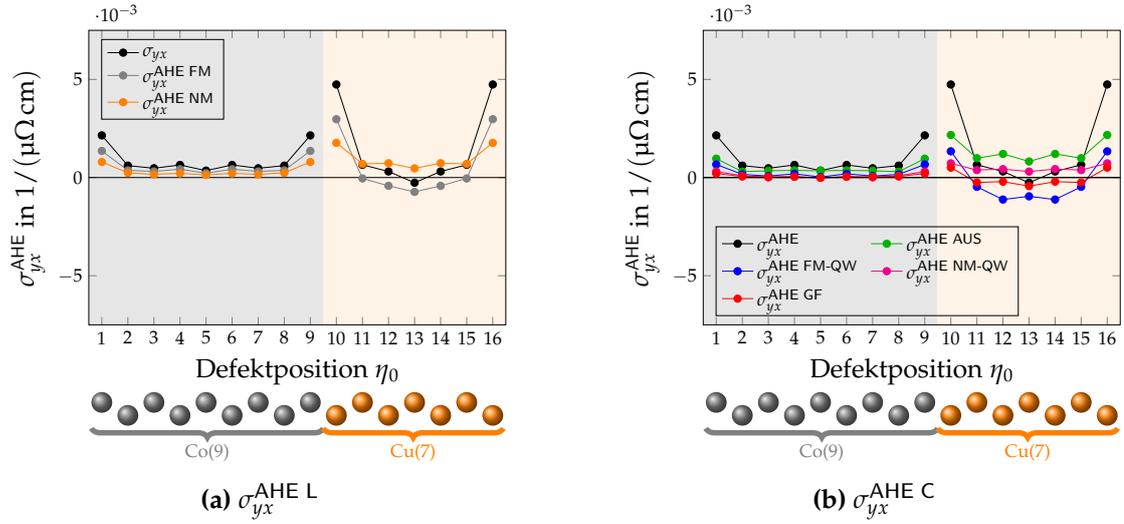


Abbildung 3.2.10.: Anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} für Bi-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). In (a) sind zusätzlich die individuellen Beiträge der ferromagnetischen Schicht $\sigma_{yx}^{\text{AHE FM}}$ und der nichtmagnetischen Schicht $\sigma_{yx}^{\text{AHE NM}}$ und in (b) zusätzlich die individuellen Beiträge der Klassen $\sigma_{yx}^{\text{AHE C}}$ mit $C \in \{\text{AUS, FM-QW, NM-QW, GF}\}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1 \text{ at.}\%$.

Beiträge der ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schicht bzw. Beiträge der verschiedenen Klassen an Zuständen

Ähnlich zu den longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} können die anomalen Hall-Leitfähigkeiten einerseits in die Beiträge der ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schicht $\sigma_{yx}^{\text{AHE FM}}$ bzw. $\sigma_{yx}^{\text{AHE NM}}$ und andererseits in die Beiträge der verschiedenen Klassen an Zuständen $\sigma_{yx}^{\text{AHE C}}$ zerlegt werden. Für Bi-Defekte sind diese in Abb. 3.2.10 dargestellt. Entsprechende Abbildungen für die übrigen Defekte sind in Abb. J.5.1 und J.5.2 zu finden. Während für σ_{xx} die Beziehung in Gleichung (3.4) gilt, tragen zur anomalen Hall-Leitfähigkeit entsprechend Abb. 3.2.10 (a) und J.5.1 sowohl die ferromagnetische als auch die nichtmagnetische Schicht mit annähernd gleichem Betrag bei. Die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} werden entsprechend Gleichung (3.5) durch die Quantum-Well-Zustände dominiert. Für die anomalen Hall-Leitfähigkeiten beobachtet man in Abb. 3.2.10 und J.5.2 keine Dominanz einer bestimmten Klasse an Zuständen weder übergreifend über alle Defekttypen (Cu, Co, Au, Bi, Ir) noch über alle Defektposition η_0 . Während die longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{xx} hinreichend durch die Näherung anisotroper Relaxationszeit in Gleichung (3.7) beschrieben werden kann, ist die anomale Hall-Leitfähigkeit σ_{yx}^{AHE} ausgehend von Gleichung (D.94)

naherungsweise durch

$$\sigma_{yx}^{\text{AHE}} \approx \zeta_{\hat{\sigma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^{\text{F}}} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}^- \tau_{vs}(\mathbf{k}) \tau_{v's'}(\mathbf{k}') v_{vs}^y(\mathbf{k}) v_{v's'}^x(\mathbf{k}'). \quad (3.11)$$

gegeben. Der antisymmetrische Beitrag $P_{kvs \rightarrow k'v's'}^-$ beschreibt die Asymmetrie zwischen den Streuprozessen $kvs \rightarrow k'v's'$ und $k'v's' \rightarrow kvs$. Im Gegensatz zur ubergangswahrscheinlichkeit verschwindet dieser in Bornscher Naherung und kann nicht auf ein einfaches Modell entsprechend Abb. 3.2.4 zuruckgefuhrt werden. Wahrend σ_{xx} in Gleichung (3.7) durch die Geschwindigkeit eines Zustandes bestimmt wird, beruckichtigt die anomale Hall-Leitfahigkeit mit $v_{vs}^y(\mathbf{k})$ und $v_{v's'}^x(\mathbf{k}')$ Geschwindigkeiten von zwei beliebigen Zustanden. Diese sind im Allgemeinen nicht korreliert, sodass $v_{vs}^y(\mathbf{k})$ und $v_{v's'}^x(\mathbf{k}')$ als zwei unabhangige Groen betrachtet werden konnen. Weder v^x noch v^y unterliegen Einschrankungen durch die Schichtstruktur, da sowohl x - als auch y -Richtung parallel zur Co/Cu-Grenzflache liegen. Insbesondere ist die Propagation der Quantum-Well-Zustande nicht eingeschrankt.

Beitrage der Majoritatselektronen und Minoritatselektronen

Interessanter als die Zerlegung nach den Beitragen der ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schicht oder nach den Beitragen der Klassen an Zustanden ist die Zerlegung in die Beitrage der Majoritats- und Minoritatselektronen. In Abb. 3.2.12 sind die anomalen Hall-Leitfahigkeiten σ_{yx}^{AHE} sowie die individuellen Beitrage der Majoritatselektronen $\sigma_{yx}^{\text{AHE}+}$ und der Minoritatselektronen $\sigma_{yx}^{\text{AHE}-}$ entsprechend Gleichung (J.6) dargestellt. Mit wenigen Ausnahmen dominieren fur Cu-, Au-, und Bi-Defekte in der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) die Beitrage der Majoritatselektronen die anomalen Hall-Leitfahigkeiten σ_{yx}^{AHE} ($\sigma_{yx}^{\text{AHE}}(\eta_0) \approx \sigma_{yx}^{\text{AHE}+}(\eta_0)$ fur $\eta_0 \in \text{FM}$). Beitrage der Minoritatselektronen zur anomalen Hall-Leitfahigkeit $\sigma_{yx}^{\text{AHE}-}$ sind fur diese Defekte lediglich fur Cu-Defekte in den Grenzflachenlagen ($\eta_0 \in \{1, 9\}$), in der zentralen Lage der Co-Schicht ($\eta_0 = 5$) zahlenmaig bedeutsam. Fur diese Systeme sind somit wegen $|\sigma_{yx}^{\text{AHE}+}| \gg |\sigma_{yx}^{\text{AHE}-}|$ die anomalen Hall-Stromdichten fur ein aueres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ in x -Richtung ($\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{x}}$) $j_y^{\text{AHE}} = \sigma_{yx}^{\text{AHE}} E$ stark spinpolarisiert. Fur Ir-Defekte in der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) hingegen besitzen sowohl die Majoritatselektronen als auch die Minoritatselektronen annahernd gleich groe Beitrage zu den anomalen Hall-Leitfahigkeiten. Ursachlich hierfur konnte sein, dass Ir mit $[\text{Xe}]4f^{14}5d^76s^2$ und Co mit $[\text{Ar}]3d^74s^2$ ahnliche Elektronenkonfigurationen besitzen. Fur Defekte in der Cu-Schicht zeigt sich auch fur Co-Defekte die Dominanz der Majoritatselektronen, wahrend fur die nichtmagnetischen Defekte sowohl die Majoritatselektronen als auch die Minoritatselektronen signifikante Beitrage zu den anomalen Hall-Leitfahigkeiten haben. Fur Bi- und Ir-Defekte in der Cu-Schicht beobachtet man, dass die anomale Hall-Leitfahigkeiten fur innere Lagen ($\eta_0 \in \{12, 13, 14\}$) annahernd Null ist. Zuruckzufuhren ist dies darauf, dass die Beitrage der Majoritatselektronen betragsmaig annahernd gleich sind, jedoch mit unterschiedlichem Vorzeichen, sodass sie sich in der Summe grotenteils gegenseitig kompensieren.

3.2.1.1.3 Anomaler Hall-Winkel α^{AHE}

Anstatt den anomalen Hall-Effekt durch die anomale Hall-Leitfähigkeit σ^{AHE} zu quantifizieren, wird dessen Größe über das Verhältnis von anomaler Hall-Leitfähigkeit σ^{AHE} und longitudinaler elektrischer Leitfähigkeit σ^{L} beschrieben. Dieses Verhältnis wird anomaler Hall-Winkel α^{AHE} genannt und beschreibt die Effizienz einen longitudinalen elektrischen Strom in einen transversalen elektrischen Strom senkrecht zur Magnetisierung zu konvertieren. Dies ist schematisch in Abb. 3.2.8 (a) dargestellt. Entsprechend Gleichungen (3.3), (3.10) und (G.35) ist der anomale Hall-Winkel unabhängig von der Richtung des äußeren elektrischen Feldes E innerhalb der xy -Ebene, sodass ohne Beschränkung der Allgemeinheit das äußere elektrische Feld $E = E\hat{E}$ in x -Richtung ($\hat{E} = \hat{x} \Leftrightarrow (\varphi, \vartheta) = (0^\circ, 90^\circ)$) gewählt wird. In diesem Fall gilt $\alpha^{\text{AHE}}(\hat{E} = \hat{x}) = \sigma_{yx}^{\text{AHE}}/\sigma_{xx} =: \alpha_{yx}^{\text{AHE}}$.

3.2.1.1.3.1 Anomaler Hall-Winkel α_{yx}^{AHE}

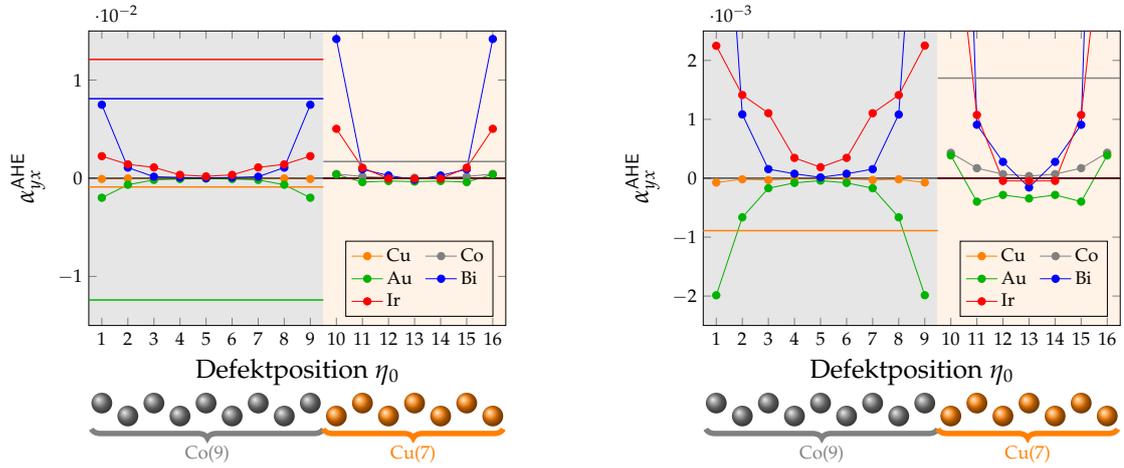


Abbildung 3.2.11.: Anomale Hall-Winkel α_{yx}^{AHE} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

In Abb. 3.2.11 sind die anomalen Hall-Winkel α_{yx}^{AHE} in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) eingezeichnet. Als Vergleich sind zusätzlich die anomalen Hall-Winkel für die Volumensysteme fcc-Cu und fcc-Co als waagerechte Linien eingetragen. Im Allgemeinen sind die anomalen Hall-Winkel für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) betragsmäßig größer als für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$). Innerhalb einer Schicht sind, mit Ausnahme von Au-Defekten in der nichtmagnetischen Schicht, die anomalen Hall-Winkel betragsmäßig am kleinsten für Defekte in den zentralen Lagen ($\eta_0 = 5$ bzw. $\eta_0 = 13$) und wachsen an, je näher der Defekt den Grenzflächen

($\eta_0 \in \{1, 9\}$ bzw. $\eta_0 \in \{10, 16\}$) lokalisiert ist. Die betragsmäßig größten anomalen Hall-Winkel werden somit für Defekte in den Grenzflächenlagen erreicht. Während für Bi- und Ir-Defekte die betragsmäßig größten anomalen Hall-Winkel für Defekte in den Cu-Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{10, 16\}$) beobachtet werden, werden diese für Au-Defekte in den Co-Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{1, 9\}$) angenommen. Absolut gesehen erreichen Bi-Defekte unter den untersuchten Defekten in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) die größten anomalen Hall-Winkel sowohl in der ferromagnetischen als auch in der nichtmagnetischen Schicht. Während die anomalen Hall-Winkel für Bi- und Ir-Defekten in der ferromagnetischen Schicht betragsmäßig annähernd gleich sind, sind die anomalen Hall-Winkel für Au-Defekte um eine Größenordnung kleiner als die Winkel für Bi- bzw. Ir-Defekte. Die geringsten anomalen Hall-Winkel werden für die Eigendefekte (Cu, Co) beobachtet. Dies deckt sich mit der Beobachtung, dass auch in fcc-Cu bzw. fcc-Co die anomalen Hall-Winkel, soweit von Null verschieden, für Co- bzw. Cu-Defekte am kleinsten sind unter allen untersuchten Defekten (Co, Cu, Au, Bi, Ir).

Entsprechend $\alpha_{yx}^{\text{AHE}} = \sigma_{yx}^{\text{AHE}}/\sigma_{xx}$ sind für einen betragsmäßig großen anomalen Hall-Winkel einerseits eine große anomale Hall-Leitfähigkeit σ_{yx}^{AHE} und andererseits eine kleine longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{xx} vorteilhaft. Aus diesem Grund sind in Abb. 3.2.12 sowohl die longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{xx} als auch die anomale Hall-Leitfähigkeit σ_{yx}^{AHE} als auch der anomale Hall-Winkel α_{yx}^{AHE} für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) dargestellt. Außerdem sind auch die Beiträge der Majoritätselektronen (σ_{xx}^+ , $\sigma_{yx}^{\text{AHE}+}$, $\alpha_{yx}^{\text{AHE}+} = \sigma_{yx}^{\text{AHE}+}/\sigma_{xx}^+$) und der Minoritätselektronen (σ_{xx}^- , $\sigma_{yx}^{\text{AHE}-}$, $\alpha_{yx}^{\text{AHE}-} = \sigma_{yx}^{\text{AHE}-}/\sigma_{xx}^-$) eingezeichnet. Insbesondere gilt $\alpha_{yx}^{\text{AHE}} = \alpha_{yx}^{\text{AHE}+} + \alpha_{yx}^{\text{AHE}-}$. Der anomale Hall-Winkel berücksichtigt das Zusammenspiel von longitudinaler elektrischer Leitfähigkeit und anomaler Hall-Leitfähigkeit. Die Abhängigkeit der anomalen Hall-Winkel α_{yx}^{AHE} von der Defektposition η_0 wird durch die zugehörige Abhängigkeit der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} dominiert. So ist der anomale Hall-Winkel für Defekte innerhalb der Grenzflächenlagen am größten, da hier die longitudinale elektrische Leitfähigkeit die kleinsten Werte annimmt. Für metallische Heterostrukturen wie die betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} maximal für Defektpositionen in den zentralen Lagen der ferromagnetischen bzw. nichtmagnetischen Schicht und nehmen ab, je näher die Defekte an der Grenzfläche lokalisiert sind. Da das Verhalten der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten in allen betrachteten Systemen qualitativ gleich ist, ist das Ziel, Defekte zu finden, für die die anomale Hall-Leitfähigkeit möglichst groß ist. Die longitudinale elektrische Leitfähigkeit variiert für verschiedenen Defektpositionen über zwei Größenordnungen bedingt durch das Quantum Confinement. Die anomale Hall-Leitfähigkeit ist für die Defektpositionen von gleicher Größenordnung und ist somit nur in geringem Maße von dem Quantum Confinement beeinflusst.

Vergleich mit Literatur

Tsui *et al.* untersuchten in Co/Cu(111)-Vielfachschichten, hergestellt mit Molekularstrahlepitaxie (engl. *molecular beam epitaxy* (MBE)), die Abhängigkeit des anomalen Hall-Widerstands und der longitudinalen spezifischen elektrischen Widerstand von der Dicke der Cu-Schicht [173]. Hierbei betrug die Dicke der Co-Schicht 15 \AA , während die Dicke der Cu-Schicht zwischen 6 \AA und 20 \AA in den Co/Cu(111)-Vielfachschichten variierte. Die Anzahl an Doppelschichten betrug 30. Das äußere magnetische Feld wurde senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche angelegt, sodass die Magnetisierung ebenfalls senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche orientiert war. In allen untersuchten Proben beobachteten sie, dass für Temperaturen größer als 2 K der anomale Hall-Widerstand R_{yx}^{AHE} proportional zum Quadrat des longitudinalen spezifischen elektrischen Widerstandes ρ_{xx} ist. Während für den *skew scattering*-Mechanismus eine lineare Abhängigkeit von dem Widerstand zu erwarten ist ($R_{yx}^{\text{AHE SS}} = \rho_{xx}$) [15, 173], wird für den *side jump*-Mechanismus eine quadratische Abhängigkeit vorhergesagt ($R_{yx}^{\text{AHE SJ}} \propto \rho_{xx}^2$) [69, 173]. Hieraus schlossen Tsui *et al.*, dass der anomale Hall-Effekt in den untersuchten Co/Cu(111)-Vielfachschichten vom *side jump*-Mechanismus in der Co-Schicht dominiert wird. Ähnliche Experimente wie von Tsui *et al.* wurden von Kobayashi *et al.* an Co/Cu(111)-Vielfachschichten, ebenfalls mittels Molekularstrahlepitaxie hergestellt, durchgeführt [174]. Für die Messungen zur anomalen Hall-Konstante wurde die Dicke der Cu-Schicht zu 9.3 \AA gewählt, während die Dicke der Co-Schicht zwischen 2.2 \AA und 16.8 \AA war. Die Anzahl an Doppelschichten betrug 50 und die Messungen wurden bei $T = 4.2 \text{ K}$ durchgeführt. Sie beobachteten, dass sich sowohl der *skew scattering*-Beitrag als auch der *side jump*-Beitrag mit abnehmender Dicke der Co-Schicht vergrößerten. Für Co(5.6 \AA)/Cu(9.3 \AA)(111)-Vielfachschichten wurden die Beiträge durch den *skew scattering*-Mechanismus und durch den *side jump*-Mechanismus explizit dargestellt. Der *skew scattering*-Beitrag ist kleiner als der Beitrag des *side jump*, jedoch tragen beide annähernd gleichermaßen zum Gesamtwert bei [174]. Der *skew scattering*-Parameter, der dem anomalen Hall-Winkel in der hier vorliegenden Arbeit entspricht, ist in der Größenordnung von 10^{-3} . Zhang *et al.* untersuchten den anomalen Hall-Effekt sowohl in Fe/Au-Vielfachschichten [175] als auch in Ni/Au-Vielfachschichten [176] in Abhängigkeit von der Anzahl an Grenzflächen n ($[\text{FM}_{\frac{360 \text{ \AA}}{n}}/\text{Au}_{\frac{120 \text{ \AA}}{n}}]_n$ mit $\text{FM} \in \{\text{Fe}, \text{Ni}\}$ und $n \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12\}$). Das äußere magnetische Feld war senkrecht zur Grenzfläche orientiert und das äußere elektrische Feld parallel zur Grenzfläche. In beiden Typen von Vielfachschichten stieg der longitudinale spezifische elektrische Widerstand bei $T = 10 \text{ K}$ für Fe/Au- bzw. bei $T = 5 \text{ K}$ für Ni/Au-Vielfachschichten mit steigender Anzahl an Grenzflächen n . Für Fe/Au-Vielfachschichten bestimmten sie die Stärke des *skew scattering*, der dem anomalen Hall-Winkel in der hier vorliegenden Arbeit entspricht, einen Wert von $(7.69 \pm 4.84) \cdot 10^{-4}$ unabhängig von der Anzahl an Grenzflächen, während der entsprechende Parameter in Ni/Au-Vielfachschichten mit steigender Anzahl an Grenzflächen ebenfalls anstieg. Für $n = 1$ und $n = 12$ betrug der *skew scattering*-Parameter schätzungsweise $-0.25 \cdot 10^{-3}$ bzw. $4 \cdot 10^{-3}$. Die Arbeiten von Tsui *et al.* [173] und Kobayashi *et al.* [174] sind vor dem Hintergrund der neueren Arbeiten von Zhang *et al.* [175, 176] nur bedingt vergleich-

bar. Insbesondere in Ni/Au-Vielfachschichten hingen die Stärke beider extrinsischer Mechanismen (*skew scattering* und *side jump*) und des intrinsischen Mechanismus von der Anzahl an Grenzflächen ab. Möglicherweise ist dies auch in Co/Cu-Vielfachschichten zu beobachten. Die anomalen Hall-Winkel der in der hier vorliegenden Arbeit betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) ist von der Größenordnung 10^{-3} bis 10^{-2} für Bi-Defekte in den Grenzflächenlagen der Cu-Schicht und von gleicher Größenordnung wie für Co/Cu(111)-Vielfachschichten [174] bzw. Fe/Au- bzw. Ni/Au-Vielfachschichten [175, 176]. Ferner bleibt noch folgendes hervorzuheben: Entsprechend der Konstruktion der Einheitszelle und der Berücksichtigung von Ladungsverschiebungen bei der Bestimmung des selbstkonsistenten Potentials berücksichtigt die elektronische Struktur der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten die Grenzfläche. Die Grenzfläche tritt somit nicht als möglicher Streuer für die elektronischen Zustände auf, sondern ist bereits inhärent in der elektronischen Struktur enthalten.

Die Identifizierung der zugrundeliegenden Mechanismen für den anomalen Hall-Effekt auf Analyse der Skalenbeziehungen zwischen spezifischen anomalen Hall-Widerstand und longitudinalen spezifischen elektrischen Widerstand ist möglich, aber unter Umständen ohne Aussagekraft. Ausgehend vom Kubo-Formalismus untersuchte Zhang [177] den anomalen Hall-Effekt in ferromagnetisch/nichtmagnetischen-Vielfachschichten. Zhang zeigte, dass ohne genaue Kenntnis verschiedener Eigenschaften und Parameter insbesondere der mittleren freien Weglänge die Skalenbeziehungen zwischen anomaler Hall-Konstante und longitudinale spezifische elektrische Widerstand wie für den *skew scattering*- und den *side jump*-Mechanismus keinerlei Aussagekraft haben [177].

3.2.1.1.4 Zusammenfassung

Die longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{xx} ist im Wesentlichen durch die Quantum-Well-Zustände der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten dominiert. Für Defekte in der ferromagnetischen Schicht dominieren die Quantum-Well-Zustände der nichtmagnetischen Schicht, während für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht die Quantum-Well-Zustände der ferromagnetischen Schicht dominieren. Im Gegensatz hierzu werden die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{zz} durch die ausgedehnten Zustände bestimmt, da sie hinreichend großen Gruppengeschwindigkeiten in z -Richtung besitzen. Die anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} sind in den betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) stark reduziert im Vergleich mit den anomalen Hall-Leitfähigkeiten für fcc-Co bzw. fcc-Cu. Der anomale Hall-Winkel α_{yx}^{AHE} , definiert als $\frac{\sigma_{yx}^{\text{AHE}}}{\sigma_{xx}}$, ist entsprechend geringer in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten als in fcc-Co bzw. fcc-Cu. Hervorzuheben ist, dass der anomale Hall-Winkel ist am größten, wenn Defekte an der Co/Cu-Grenzfläche positioniert sind, wegen der geringen longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit σ_{xx} .

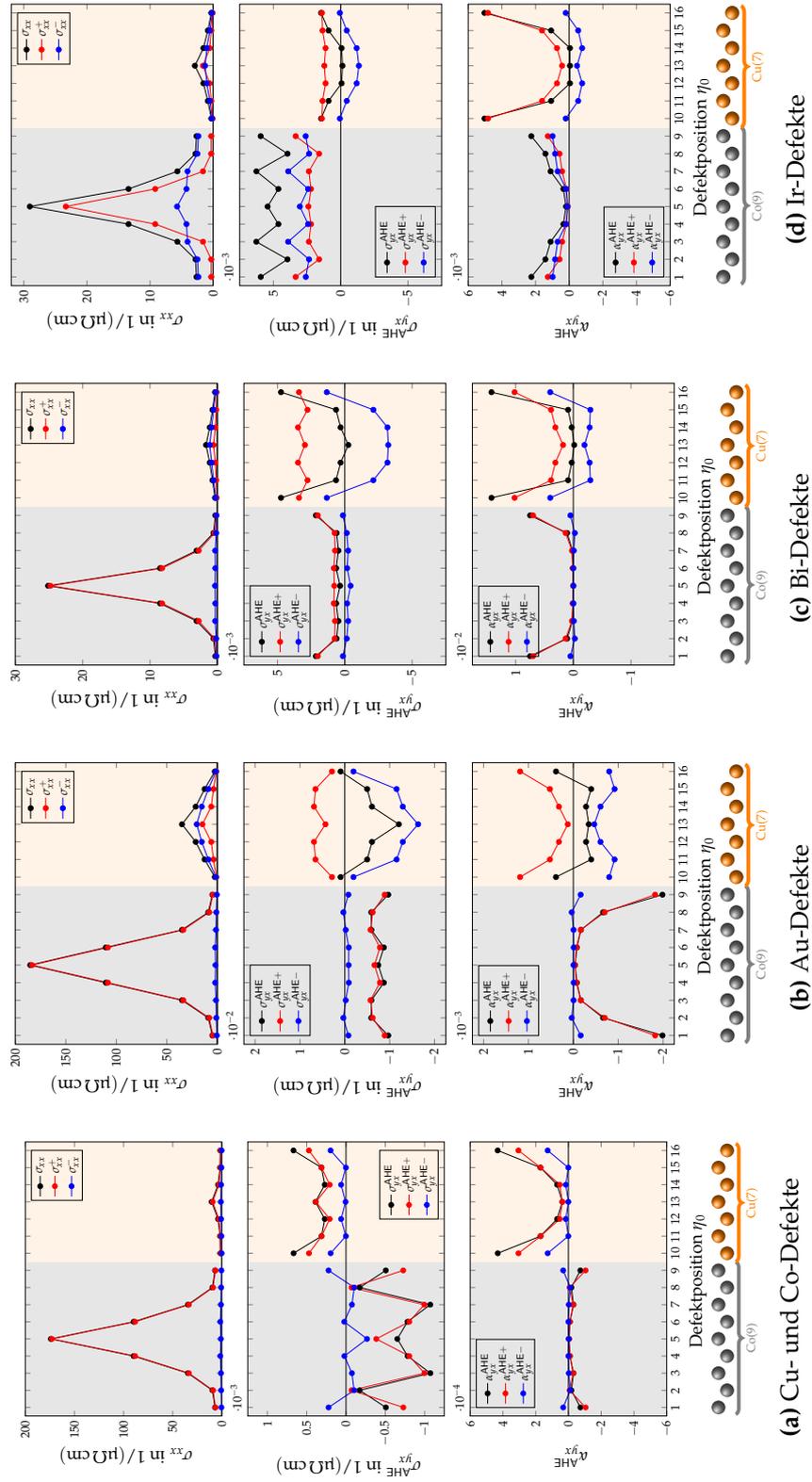


Abbildung 3.2.12.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{xx} , anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} , und anomale Hall-Winkel $\alpha_{yx}^{\text{AHE}} = \sigma_{yx}^{\text{AHE}} / \sigma_{xx}$ in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) mit **(a)** Cu- bzw. Co-Defekten, **(b)** Au-Defekten, **(c)** Bi-Defekten, und **(d)** Ir-Defekten. Zusätzlich sind die Beiträge der Majoritäts- und Minoritätselektronen σ_{xx}^+ , $\sigma_{xx}^{\text{AHE}+}$, $\alpha_{yx}^{\text{AHE}+}$ bzw. σ_{xx}^- , $\sigma_{xx}^{\text{AHE}-}$, $\alpha_{yx}^{\text{AHE}-}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

3.2.1.2. Tensor der Spin-Leitfähigkeit

Der Tensor der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^S = (\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z)^T$ ist ein Tensor dritter Stufe und hat im Allgemeinen 27 Elemente. Bei einer festen Spin-Richtung $\gamma \in \{x, y, z\}$ ist der zugehörige Tensor der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^\gamma$ ein Tensor zweiter Stufe und hat wie der Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$ im Allgemeinen neun unabhängige Elemente. Der Tensor der Spin-Leitfähigkeit mit $\gamma := z$ sowohl in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) als auch in fcc-Co mit Magnetisierung in z -Richtung ist mit

$$\hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}^z & -\sigma_{yx}^z & 0 \\ \sigma_{yx}^z & \sigma_{xx}^z & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz}^z \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

gegeben [146, 168, 169, 178]. Für fcc-Cu mit Spin-Quantisierungsachse in z -Richtung mit magnetischen Defekten ist der Tensor der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^z$ ebenfalls durch Gleichung (3.12) gegeben, während für nichtmagnetische Defekte $\sigma_{xx}^z = \sigma_{yy}^z = \sigma_{zz}^z = 0$ gilt. $\sigma_{yx}^z \neq 0$ besteht weiterhin. Die Tensoren der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^x$ und $\hat{\sigma}^y$ sind in [146] zu finden. Im folgenden wird ausschließlich der Tensor der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^z$ betrachtet. Insbesondere weisen die Tensoren der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$ in Gleichung (3.3) und der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^z$ in Gleichung (3.12) die gleiche Struktur auf.

 3.2.1.2.1 Spin-Hall-Leitfähigkeit $\sigma^{z\text{SHE}}$

Ähnlich wie die anomale Hall-Leitfähigkeit mit der transversalen elektrischen Leitfähigkeit verknüpft ist, ist die Spin-Hall-Leitfähigkeit mit der transversalen Spin-Leitfähigkeit verbunden. Allgemein ist der Tensor der Spin-Hall-Leitfähigkeit für $\gamma \in \{x, y, z\}$

$$\hat{\sigma}^{\gamma\text{SHE}} := \frac{1}{2} \left(\hat{\sigma}^{\gamma\text{G}} - (\hat{\sigma}^{\gamma\text{G}})^T \right) \quad (3.13)$$

durch den antisymmetrischen Anteil desjenigen Anteils des Tensors der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^{\gamma\text{G}}$ gegeben, der gerade unter Zeitumkehr \mathcal{T} ist ($R(\mathcal{T})\hat{\sigma}^{\gamma\text{G}} = \hat{\sigma}^{\gamma\text{G}}$) [172]. In den betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) gilt entsprechend Anhang E.2 für $\gamma := z$

$$\hat{\sigma}^{z\text{SHE}} = \hat{\sigma}^{z\text{G}} = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma_{yx}^z & 0 \\ \sigma_{yx}^z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

sodass wegen Gleichungen (3.3), (3.14) und (G.22) die Spin-Hall-Leitfähigkeit $\sigma^{z\text{SHE}}$ sowie die anomale Hall-Leitfähigkeit σ^{AHE} unabhängig von der Richtung der *in plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feldes $\widehat{E}_\parallel = (\cos \varphi \sin \vartheta, \sin \varphi \sin \vartheta, 0)^T$ ist. Für $\widehat{E} = \widehat{x}$ gilt somit $\sigma^{z\text{SHE}}(\widehat{E}) = \sigma_{yx}^z =: \sigma_{yx}^{z\text{SHE}}$. Aufgrund der numerischen Genauigkeit wird, wie in Anhang B.2.1.2.1.1 erläutert, die Spin-Hall-Leitfähigkeit $\sigma^{z\text{SHE}}$ für $\widehat{E} = \widehat{x}$ nicht direkt durch σ_{yx}^z , sondern durch $\sigma_{yx}^{z\text{SHE}} := \frac{1}{2}(\sigma_{yx}^z - \sigma_{xy}^z)$ bestimmt.

3.2.1.2.1.1 Spin-Hall-Leitfähigkeit $\sigma_{yx}^{z\text{SHE}}$

Die Spin-Hall-Leitfähigkeiten $\sigma_{yx}^{z\text{SHE}}$ sind für Co-, Cu-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 innerhalb der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten in Abb. 3.2.13 dargestellt. Zum Vergleich sind die Spin-Hall-Leitfähigkeiten von fcc-Cu mit Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten und fcc-Co mit Cu-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten dargestellt. Bis auf wenige Ausnahmen sind die Spin-Hall-Leitfähigkeiten der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten betragsmäßig stets kleiner als die entsprechenden Spin-Hall-Leitfähigkeiten der zugehörigen Volumensysteme. Lediglich für Au-Defekte in den drei innersten Lagen der Cu-Schicht ($\eta_0 \in \{12, 13, 14\}$) werden in den Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten größere Werte für die Spin-Hall-Leitfähigkeiten als für fcc-Cu erreicht. Für Au-Defekte in der Cu-Schicht sind die Spin-Hall-Leitfähigkeiten fast genauso groß wie die zugehörige Spin-Hall-Leitfähigkeit von fcc-Cu(Au). Für die nichtmagnetischen Defekte (Au, Bi, Ir) sind die Spin-Hall-Leitfähigkeiten stets positiv. Unter allen möglichen Defektpositionen innerhalb der Cu-Schicht sind die Spin-Hall-Leitfähigkeiten maximal, falls der Defekt in der zentralen Lage ($\eta_0 = 13$) lokalisiert ist. Je näher der Defekt in der Nähe der Co/Cu-Grenzfläche lokalisiert ist, desto geringer sind die Spin-Hall-Leitfähigkeiten. Im Gegensatz zu Defekten in der Cu-Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) kann für die untersuchten Defekte in der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) keine einheitliche Abhängigkeit der Spin-Hall-Leitfähigkeiten von der Defektposition η_0 beobachtet werden. Während die Spin-Hall-Leitfähigkeiten für Cu-, Au-, und Bi-Defekte in den Grenzflächenlagen der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, 9\}$) am größten sind, sind die Spin-Hall-Leitfähigkeiten für Ir-Defekte in den inneren Lagen ($\eta_0 \in \{3, 7\}$) betragsmäßig am größten. Analog zu den anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} in Abb. 3.2.9 spiegelt sich das Vorzeichen der Spin-Hall-Leitfähigkeiten für die Defekte in den Volumensystemen im Vorzeichen der Spin-Hall-Leitfähigkeiten für die Defekte in den jeweiligen Schichten der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten wider. Ausnahmen bilden hierbei Ir-Defekte in der Grenzflächenlagen der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, 9\}$) bzw. Cu-Defekte in der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{2, 7\}$).

Vergleich zwischen anomaler Hall-Leitfähigkeit und Spin-Hall-Leitfähigkeit

In Abb. 3.2.15 sind u. A. die Spin-Hall-Leitfähigkeiten und die anomalen Hall-Leitfähigkeiten für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) dargestellt. Für Cu-, Au-, und Bi-Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) und für Co-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) stimmen die Spin-Hall-Leitfähigkeiten $\sigma_{yx}^{z\text{SHE}}$ und anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} näherungsweise überein. Im Gegensatz zu den anderen Defekten sind Werte der anomalen Hall-Leitfähigkeiten positiv für Ir-Defekte in der ferromagnetischen Schicht, während die Spin-Hall-Leitfähigkeiten negatives Vorzeichen besitzen. Für nichtmagnetische Defekte (Au, Bi, Ir) in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) zeigen die Spin-Hall-Leitfähigkeiten $\sigma_{yx}^{z\text{SHE}}$ und die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} keinen direkten Zusammenhang. So sind die Spin-Hall-Leitfähigkeiten $\sigma_{yx}^{z\text{SHE}}$ für Au-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht positiv, während die entsprechenden anomalen Hall-Leitfähigkeiten mit Ausnah-

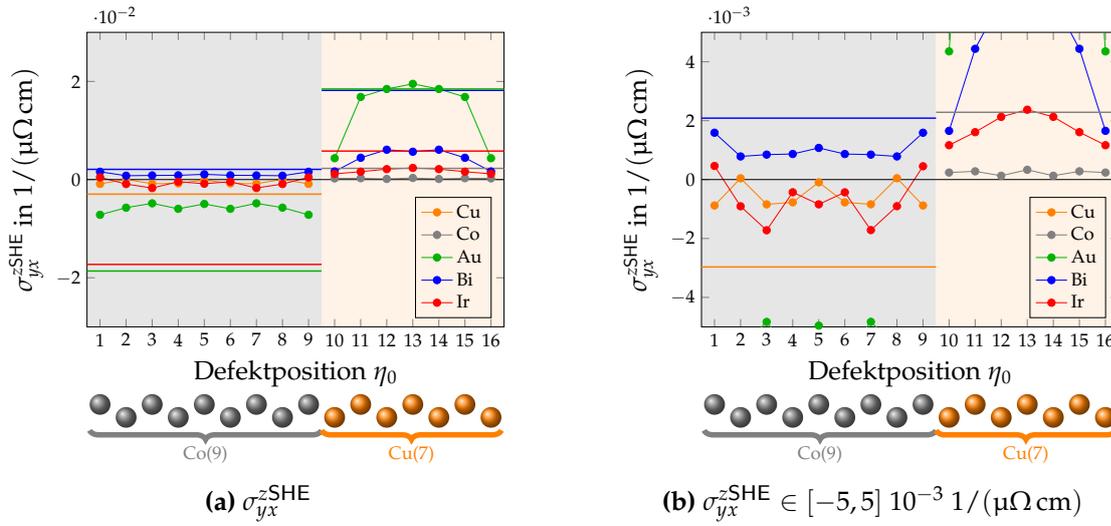


Abbildung 3.2.13.: (a) Spin-Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{zSHE} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) und für fcc-Cu und fcc-Co mit substitutionellen Defekten (Cu, Co, Au, Bi, Ir). Das Koordinatensystem ist in fcc-Cu und fcc-Co so gewählt, dass die z-Achse in Richtung der Spin-Quantisierungsachse bzw. in Richtung der Magnetisierung M orientiert ist. Zur besseren Darstellung ist in (b) der Bereich auf $[-5, 5] \cdot 10^{-3} \text{ 1}/(\mu\Omega \text{ cm})$ eingeschränkt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1 \text{ at.}\%$.

me der Grenzflächenpositionen ($\eta_0 \in \{10, 16\}$) negativ sind. Andererseits beobachtet man für Bi- und Ir-Defekte in den inneren Lagen ($\eta_0 \in \{12, 13, 14\}$) nahezu verschwindende anomale Hall-Leitfähigkeiten, während für diese Defektpositionen innerhalb der nichtmagnetischen Schicht die Spin-Hall-Leitfähigkeiten maximal sind.

Beiträge der Majoritätselektronen und Minoritätselektronen

Für ein Verständnis dieser Beobachtungen betrachte man neben den Spin-Hall-Leitfähigkeiten und den anomalen Hall-Leitfähigkeiten die zugehörigen Beiträge der Majoritäts- und Minoritätselektronen. Diese sind ebenfalls in Abb. 3.2.15 eingezeichnet. Ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung ist der Spin eine Erhaltungsgröße, sodass $|S_{vs}^z(\mathbf{k})| = 1$ und somit $1 - |S_{vs}^z(\mathbf{k})| = 0$ für alle Zustände gilt. Unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung gilt $|S_{vs}^z(\mathbf{k})| \leq 1$, sodass im Allgemeinen $1 - |S_{vs}^z(\mathbf{k})| \geq 0$ ist. Jedoch besitzen mehr als 80 % der Zustände auf der Fermi-Fläche eine Spin-Polarisation $S_{vs}^z(\mathbf{k})$ betragsmäßig von mindestens 0.9 wie in Abb. F.5.1 (a) illustriert. Somit gilt näherungsweise $1 - |S_{vs}^z(\mathbf{k})| \approx 0$, sodass über Gleichung (B.5)

$$\sigma_{yx}^{zSHE+}(\eta_0) \approx \sigma_{yx}^{AHE+}(\eta_0) \quad \text{und} \quad \sigma_{yx}^{zSHE-}(\eta_0) \approx -\sigma_{yx}^{AHE-}(\eta_0) \quad (3.15)$$

für die Spin-Hall-Leitfähigkeiten und anomalen Hall-Leitfähigkeiten der Majoritäts- bzw. Minoritätselektronen zu erwarten sind. Für die Spin-Hall-Leitfähigkeiten und anomale

Hall-Leitfähigkeiten gilt näherungsweise

$$\sigma_{yx}^{zSHE}(\eta_0) \approx \sigma_{yx}^{AHE+}(\eta_0) - \sigma_{yx}^{AHE-}(\eta_0)$$

während $\sigma_{yx}^{AHE}(\eta_0) = \sigma_{yx}^{AHE+}(\eta_0) + \sigma_{yx}^{AHE-}(\eta_0)$ (3.16)

weiterhin exakt gilt. Gleichung (3.16) entspricht so dem nichtrelativistischen Mottschen Zwei-Strom-Modell [179]. Die Beziehungen aus Gleichung (3.15) spiegeln sich in den numerischen Rechnungen in Abb. 3.2.15 gut wider. Sofern Majoritätselektronen dominieren ($|\sigma_{zx}^{AHE+}| \gg |\sigma_{zx}^{AHE-}|$), gelten ausgehend von Gleichung (3.16) $\sigma_{yx}^{zSHE} \approx \sigma_{yx}^{AHE+} \approx \sigma_{yx}^{AHE}$. In diesen Fall stimmen anomale Hall-Leitfähigkeiten und Spin-Hall-Leitfähigkeiten überein wie es für Cu-, Au-, und Bi-Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) und für Co-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) zu beobachten ist. Ausnahmen bilden Cu-Defekte in der zentralen Lage ($\eta_0 = 5$) und in den Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{1, 9\}$) sowie Co-Defekte in den Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{10, 16\}$). In diesen Fällen ist der Beitrag der Minoritätselektronen nicht mehr zu vernachlässigen. Dominieren nun andererseits die Minoritätselektronen ($|\sigma_{zx}^{AHE+}| \ll |\sigma_{zx}^{AHE-}|$), so gelten entsprechend $\sigma_{yx}^{zSHE} \approx -\sigma_{yx}^{AHE-} \approx -\sigma_{yx}^{AHE}$. Spin-Hall-Leitfähigkeiten und anomale Hall-Leitfähigkeiten stimmen betragsmäßig überein, unterscheiden sich lediglich im Vorzeichen. Seien nun weder die Beiträge der Majoritätselektronen σ_{yx}^{AHE+} noch die Beiträge der Minoritätselektronen σ_{yx}^{AHE-} nicht mehr zu vernachlässigen. Besitzen nun σ_{yx}^{AHE+} und σ_{yx}^{AHE-} das gleiche Vorzeichen, ist σ_{yx}^{AHE} im Allgemeinen betragsmäßig größer als σ_{yx}^{zSHE} , wie es für Ir-Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) zu beobachten ist. Besitzen σ_{yx}^{AHE+} und σ_{yx}^{AHE-} unterschiedliches Vorzeichen, so heben sie sich teilweise in der anomalen Hall-Leitfähigkeit auf und verstärken sich in der Spin-Hall-Leitfähigkeit wie es z. B. für Bi- und Ir-Defekte in den inneren Lagen der nichtmagnetischen Schicht festzustellen ist.

3.2.1.2.2 Spin-Hall-Winkel α^{zSHE}

In Analogie zum anomalen Hall-Winkel α^{AHE} beschreibt der Spin-Hall-Winkel $\alpha^{\gamma SHE}$ die Effizienz einen longitudinalen elektrischen Strom in einen transversalen Spin-Strom zu konvertieren. Entsprechend Gleichungen (3.3), (3.14) und (G.35) ist der Spin-Hall-Winkel unabhängig von der *in plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feldes \mathbf{E} . Wie beim anomalen Hall-Winkel betrachtet man im Folgenden den Spezialfall eines äußeren elektrischen Feldes \mathbf{E} in x -Richtung ($\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{x}}$), sodass in diesem Fall der Spin-Hall-Winkel durch $\alpha^{zSHE}(\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{x}}) = \sigma_{yx}^{zSHE}/\sigma_{xx} =: \alpha_{yx}^{zSHE}$ gegeben ist.

3.2.1.2.2.1 Spin-Hall-Winkel α_{yx}^{zSHE}

Die Spin-Hall-Winkel α_{yx}^{zSHE} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte sind in Abb. 3.2.14 dargestellt. Zum Vergleich sind die Spin-Hall-Winkel von fcc-Cu mit Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten und fcc-Co mit Cu-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten

als waagerechte Linien eingetragen. Unter den Volumensystemen zeigen besonders die Systeme fcc-Cu(Bi) und fcc-Cu(Ir) große Spin-Hall-Winkel von ungefähr 8 % bzw. 4 % [48, 51, 78, 180], während in den übrigen Volumensystemen die Spin-Hall-Winkel zwischen -1% und 1% betragen. Experimentell sind für die Spin-Hall-Winkel von Cu mit Bi-Defekten -24% [47] und von Cu mit Ir-Defekten ungefähr 2% [46] bestimmt worden. Während die Spin-Hall-Winkel für die schweren Defekte (Au, Bi, Ir) in fcc-Cu und fcc-Co in der Größenordnung von einigen Prozent liegen, sind die Spin-Hall-Winkel für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten für schwere Defekte im Mittel um eine Größenordnung kleiner. Für Defekte leichter Elemente (Cu, Co) sind die Spin-Hall-Winkel nochmals um eine Größenordnung kleiner. In den Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\vec{M}} = \widehat{\vec{z}}$) werden die betragsmäßig größten Spin-Hall-Winkel für Bi-Defekte mit 0.6% erreicht u. A. für Bi-Defekte in den Grenzflächenlagen der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, 9\}$).

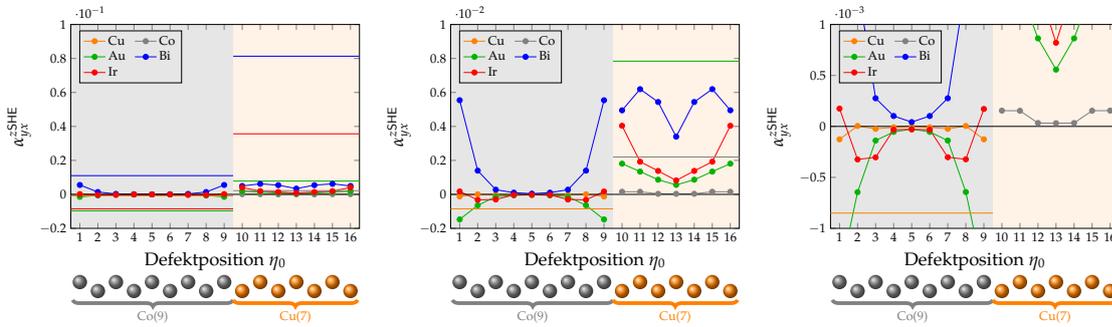


Abbildung 3.2.14.: Spin-Hall-Winkel α_{yx}^{zSHE} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\vec{M}} = \widehat{\vec{z}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

Mit $\alpha_{yx}^{AHE\pm} = \sigma_{yx}^{AHE\pm} / \sigma_{xx}$ und $\alpha_{yx}^{zSHE\pm} = \sigma_{yx}^{zSHE\pm} / \sigma_{xx}$ folgen aus Gleichung (3.15) die Beziehungen $\alpha_{yx}^{zSHE\pm} \approx \pm \alpha_{yx}^{AHE\pm}$, und analog zu Abb. 3.2.12 sind in Abb. 3.2.15 die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} , die Spin-Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{zSHE} und die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} , und die Spin-Hall-Winkel α_{yx}^{zSHE} und die anomalen Hall-Winkel α_{yx}^{AHE} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\vec{M}} = \widehat{\vec{z}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten dargestellt. Zusätzlich sind für alle Größen die Beiträge der Majoritäts- und Minoritätselektronen in Abb. 3.2.15 illustriert. Das in Abschnitt 3.2.1.1.2.1 beschriebene Verhalten für die Spin-Hall-Leitfähigkeiten und anomale Hall-Leitfähigkeiten im Allgemeinen als auch für die Beiträge der Majoritäts- und Minoritätselektronen im Speziellen übertragen sich wegen $\alpha_{yx}^{AHE} = \sigma_{yx}^{AHE} / \sigma_{xx}$ und $\alpha_{yx}^{zSHE} = \sigma_{yx}^{zSHE} / \sigma_{xx}$ unmittelbar auf die Spin-Hall-Winkel und die anomalen Hall-Winkel. Ausgehend von Abb. 3.2.15 sind sowohl die anomalen Hall-Winkel als auch die Spin-Hall-Winkel für Defekte in Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{1, 9\}$ und $\eta_0 \in \{10, 16\}$) im Allgemeinen am größten durch die geringe longitudinale elektrische Leitfähigkeit σ_{xx} für diese Defektpositionen. Für verschiedene Defektpositionen inner-

halb einer Schicht (Cu oder Co) unterscheiden sich die anomalen Hall-Leitfähigkeiten höchstens um eine Größenordnung. Entsprechendes gilt für die Spin-Hall-Leitfähigkeiten. Die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} hingegen überstreichen mehr als zwei Größenordnungen. Entsprechend unterscheiden sich sowohl Spin-Hall-Winkel als auch anomaler Hall-Winkel für verschiedene Defektpositionen um mehrere Größenordnungen. Sowohl die anomale Hall-Leitfähigkeiten als auch die Spin-Hall-Leitfähigkeiten und somit die anomalen Hall-Winkel und Spin-Hall-Winkel der Volumensysteme ermöglichen das Vorzeichen dieser Größen für Defekte in der entsprechenden Schicht in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten vorherzusagen. Aussagen über die Größenordnung der Werte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten liefern die Werte für fcc-Cu bzw. fcc-Co nur bedingt. Da einerseits die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} in fcc-Cu und fcc-Co kleiner als in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten sind und andererseits die Spin-Hall-Leitfähigkeiten und anomalen Hall-Leitfähigkeiten in fcc-Cu und fcc-Co größer sind als in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten, sind folglich Spin-Hall-Winkel und anomaler Hall-Winkel in fcc-Cu und fcc-Co größer als in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten. In [H3] wurde der Einfluss einer vielblättrigen Fermi-Fläche auf den anomalen Hall-Effekt und Spin-Hall-Effekt in nichtmagnetischen und magnetischen Volumensystemen am Beispiel von fcc-Pt und fcc-Co untersucht. Als Vergleich diente fcc-Cu mit einer einblättrigen Fermi-Fläche. Bei Vernachlässigung von Interbandstreuung erreichten die anomalen Hall-Winkel bzw. Spin-Hall-Winkel für einzelne Blätter der Fermi-Fläche Werte in der Größenordnung des *gigantischen* Spin-Hall-Winkel von fcc-Cu(Bi) mit näherungsweise 0.08 [51] bzw. -0.24 [47]. Aufgrund der Vielzahl an Blätter der Fermi-Fläche der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten ($\nu \in \{139, \dots, 167\}$) wird auf eine ähnliche Analyse für diese Systeme verzichtet.

Vergleich mit Literatur

Bi-Defekte

Nach der theoretischen Vorhersage eines gigantischen Spin-Hall-Effektes in verdünnten $\text{Cu}_{1-x}\text{Bi}_x$ -Legierungen durch den *skew scattering*-Mechanismus von Gradhand *et al.* 2010, die einen Spin-Hall-Winkel von 0.08 angaben [48], beobachteten Niimi *et al.* 2012 einen Spin-Hall-Winkel von -0.24 , und beschrieben ihn als „the characteristic S[pin]H[all] angle of the skew scattering on Bi [impurities]“² [47]. Fedorov *et al.* analysierten 2013 den Spin-Hall-Winkel im Rahmen eines relativistischen Streuphasenmodell, ursprünglich von Fert und Levy vorgeschlagen [181, 182], und hierzu im Vergleich den Spin-Hall-Winkel basierend auf der Boltzmann-Gleichung [51] bzw. auf der Kubo-Theorie [52]. Sowohl den *side jump*-Mechanismus als auch den intrinsischen Mechanismus konnten sie als Grund für den Vorzeichenunterschied für den Spin-Hall-Winkel ausschließen. Ferner untersuchten 2015 Gu *et al.* den Einfluss von Korrelationseffekten auf den Spin-Hall-Winkel in $\text{Cu}_{1-x}\text{Bi}_x$ -Legierungen und gaben einen Spin-Hall-Winkel von -0.152 an und führten den Vorzeichenunterschied im Spin-Hall-Winkel auf unterschiedliche

²Übersetzung des Autors: „den charakteristischen S[pin]-H[all]-Winkel des *skew scattering* an Bi-Defekten“

Definitionen des Spin-Hall-Winkels zurück [183]. 2019 bestimmten Chen *et al.* den Spin-Hall-Effekt von $\text{Cu}_{1-x}\text{Bi}_x$ in einer Cu/Bi/Cu-Schicht. Die Dicken der unteren Cu-Schicht, der Bi-Schicht, und der oberen Cu-Schicht betragen 7 nm, 0.015 nm, bzw. 3 nm. Dies wird als δ -Doping bezeichnet und wurde bereits bei der Untersuchung des Riesenmagnetowiderstandes verwendet [184]. Chen *et al.* gaben für die Cu/Bi/Cu-Schicht einen Spin-Hall-Winkel von -0.12 an [37].

Ir-Defekte

Wie für $\text{Cu}_{1-x}\text{Bi}_x$ liegen auch für $\text{Cu}_{1-x}\text{Ir}_x$ -Legierungen in der Literatur unterschiedliche Angaben sowohl über die Größe des Spin-Hall-Winkels als auch über das Vorzeichen vor. Überdies zeigen sich in der Literatur verschiedene Angaben, ob der Spin-Hall-Effekt in $\text{Cu}_{1-x}\text{Ir}_x$ -Legierungen durch intrinsische oder durch extrinsische Mechanismen dominiert wird. Experimentell beobachteten Niimi *et al.* 2011 einen Spin-Hall-Winkel von 0.021 in $\text{Cu}_{1-x}\text{Ir}_x$ -Legierungen mit x zwischen 0.01 und 0.12 [46]. Als dominierenden Mechanismus gaben sie den *skew scattering*-Mechanismus an. Yamanouchi *et al.* gaben als untere Grenze für den Betrag des Spin-Hall-Winkel in $\text{Cu}_{1-x}\text{Ir}_x$ -Legierungen 0.03 an [185]. In den von Takizawa *et al.* untersuchten $\text{Cu}_{1-x}\text{Ir}_x$ -Legierungen zeigte sich ein linearer Zusammenhang zwischen dem spezifischen Spin-Hall-Widerstand ϱ^{SHE} und dem Beitrag des Defektes zum spezifischen Widerstand $\varrho_{\text{Ir}}^{\text{L}} = \varrho_{\text{Cu}_{1-x}\text{Ir}_x}^{\text{L}} - \varrho_{\text{Cu}}^{\text{L}}$. Hiervon ausgehend wurde ein Spin-Hall-Winkel von 0.014 angegeben, und der lineare Zusammenhang zwischen ϱ^{SHE} und $\varrho_{\text{Ir}}^{\text{L}}$ als eindeutiges Indiz für das *skew scattering* als den zugrundeliegenden Mechanismus [186]. Masuda *et al.* gaben für Co/ $\text{Cu}_{1-x}\text{Ir}_x$ -Schichten mit $x = 0.05$ einen Spin-Hall-Winkel von 0.03 bzw. 0.043 an. Ausgehend von der geringen longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit ($\varrho^{\text{L}} = 92.42 \mu\Omega \text{ cm} \Leftrightarrow \sigma^{\text{L}} \approx 0.01 \text{ 1}/(\mu\Omega \text{ cm})$) schlossen sie, dass die von ihnen betrachteten $\text{Cu}_{1-x}\text{Ir}_x$ -Legierungen außerhalb des Bereichs sind, in dem der *skew scattering*-Mechanismus dominiert [187], und somit der *side jump*-Mechanismus oder der intrinsische Mechanismus verantwortlich für den Spin-Hall-Effekt sind [188]. Überdies zeigten Masuda *et al.*, dass die Spin-Hall-Leitfähigkeit konstant und somit nahezu unabhängig von der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeit ist. Für sie ein Indiz, dass entweder der *side jump*-Mechanismus oder der intrinsische Mechanismus in $\text{Cu}_{1-x}\text{Ir}_x$ -Legierungen verantwortlich für den Spin-Hall-Effekt ist [189].

Grenzfläche

Amin *et al.* verglichen Spin-Ströme in magnetischen Volumensystemen (fcc-Co) mit jenen in ferromagnetisch/nichtmagnetische-Vielfachschichten (Co/Cu, Co/Pt) bzw. in nichtmagnetisch/nichtmagnetische-Vielfachschichten (Pt/Cu), die senkrecht zur Grenzfläche fließen [45]. Das äußere elektrische Feld ist hierbei parallel zur Grenzfläche orientiert. Der Transport wurde im Rahmen des Landauer-Büttiker-Formalismus beschrieben. Extrinsische Mechanismen und der intrinsische Mechanismus des Spin-Hall-Effekts wurden nicht betrachtet. Am Beispiel von Co/Cu-Vielfachschichten demonstrierten sie die Modulation der lokalen Spin-Stromdichte durch die Co/Cu-Grenzfläche im

Vergleich mit der Spin-Stromdichte in fcc-Co. Ferner untersuchten sie Co/Cu-Vielfachschichten mit und ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung in der Co-Schicht, um den Beitrag der Co-Schicht zur Spin-Stromdichte zu eliminieren. Hierbei zeigte sich, dass die Grenzfläche Spin-Ströme von vergleichbarer Größenordnung zum intrinsischen Spin-Hall-Effekt in Pt erzeugen kann. Die Größenordnungen der integrierten Spin-Leitfähigkeiten in der Cu-Schicht waren im Bereich $10^{-3} \text{ 1}/(\mu\Omega \text{ cm})$ [45]. Ähnlich wie bei Amin *et al.* zeigen sich auch in den hier betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) der Einfluss der Grenzfläche auf den Spin-Hall-Effekt. Obgleich sowohl longitudinaler elektrische Stromdichte als auch anomale Hall-Stromdichte parallel zur Co/Cu-Grenzfläche fließen, sind die Spin-Hall-Winkel um eine Größenordnung kleiner als die entsprechenden der Volumensysteme. So beobachteten Niimi *et al.*, dass Bi-Defekte für Defektkonzentrationen größer als 0.5 at.% aus dem Volumen an Grenzflächen ansammeln. Wie die anomalen Hall-Winkel sind auch die Spin-Hall-Winkel in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) im Allgemeinen am größten für Defekte an der Grenzfläche, sodass eine Segregation von Defekten an Grenzflächen für den *skew scattering*-induzierten Spin-Hall-Effekt in Vielfachschichten günstig ist.

3.2.1.2.3 Zusammenfassung

Zwischen den Beiträgen der Majoritäts- und Minoritätselektronen zur Spin-Hall-Leitfähigkeit und den Beiträgen der Majoritäts- und Minoritätselektronen zur Hall-Leitfähigkeit beobachtet man $\sigma_{yx}^{\text{zSHE}\pm} = \pm\sigma_{yx}^{\text{AHE}\pm}$ bzw. $\sigma_{yx}^{\text{AHE}} = \sigma_{yx}^{\text{AHE}+} + \sigma_{yx}^{\text{AHE}-}$ und $\sigma_{yx}^{\text{zSHE}} = \sigma_{yx}^{\text{AHE}+} - \sigma_{yx}^{\text{AHE}-}$. Dies entspricht dem nichtrelativistischen Zwei-Strom-Modell. Zurückzuführen ist dies, darauf dass für die Komponente des Spin-Erwartungswertes $S_{vs}^z(\mathbf{k}) = \mathbf{S}_{vs}(\mathbf{k}) \cdot \widehat{\mathbf{M}}$ in Richtung der Magnetisierung $|S_{vs}^z(\mathbf{k})| \approx 1$ in Einheiten von $\frac{\hbar}{2}$ gilt. Ähnlich wie die anomalen Hall-Leitfähigkeiten und die anomalen Hall-Winkel sind auch die Spin-Hall-Leitfähigkeiten und die Spin-Hall-Winkel hervorgerufen durch den *skew scattering*-Mechanismus in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) im Vergleich zu fcc-Co bzw. fcc-Cu stark reduziert.

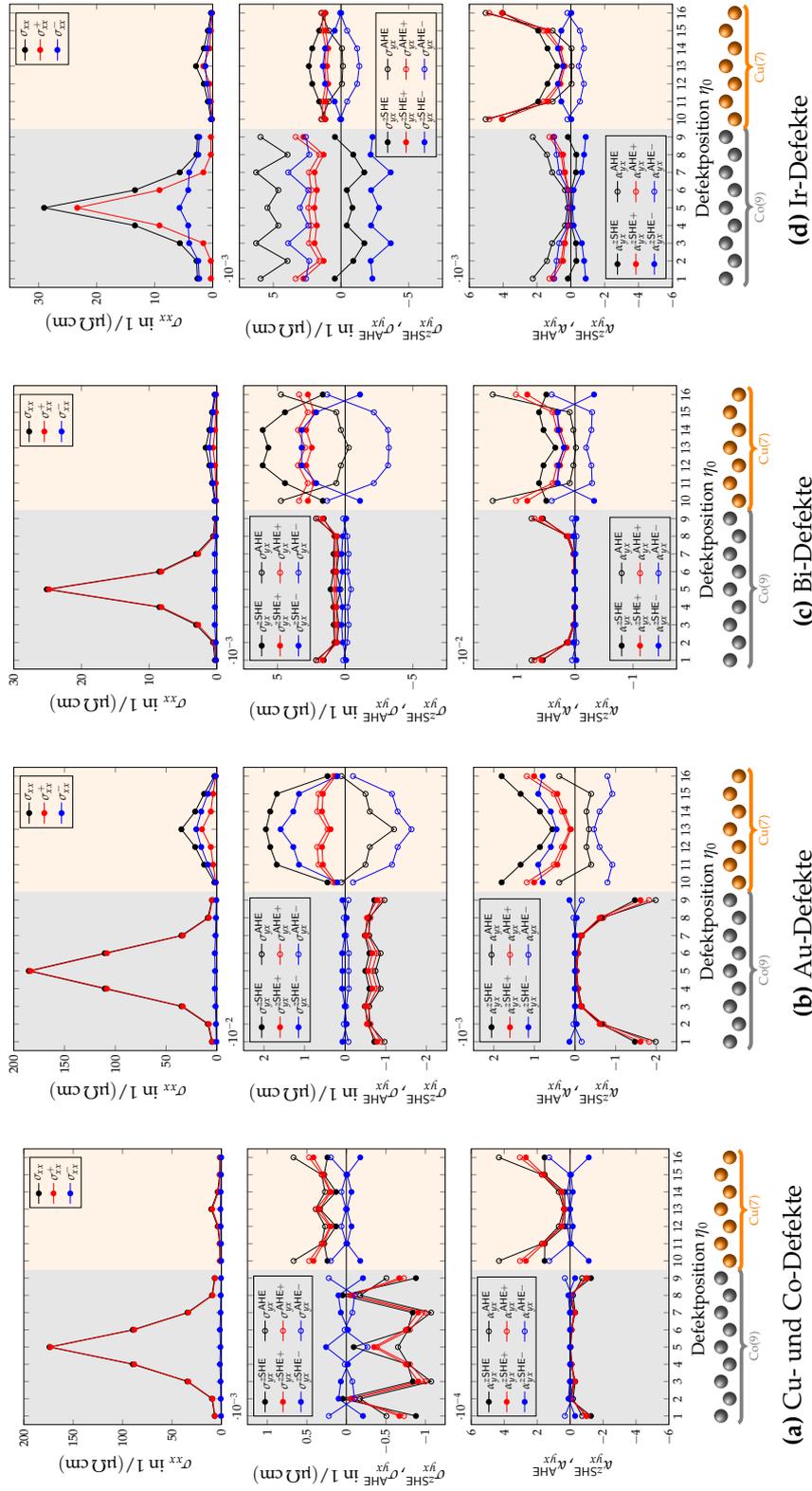


Abbildung 3.2.15: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{xx} , Spin-Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{zSHE} und anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} , und Spin-Hall-Winkel $\alpha_{yx}^{zSHE} = \alpha_{yx}^{zSHE} / \sigma_{xx}$ und anomale Hall-Winkel $\alpha_{yx}^{AHE} = \alpha_{yx}^{AHE} / \sigma_{xx}$ in Co(9)/Cu(7)(001)-Vieltschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) mit (a) Cu- bzw. Co-Defekten, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte. Zusätzlich sind die Beiträge der Majoritäts- und Minoritätselektronen σ_{xx}^+ , σ_{xx}^{zSHE+} , σ_{yx}^{AHE+} , α_{yx}^{zSHE+} , σ_{yx}^{SHE-} , σ_{xx}^- , σ_{xx}^{zSHE-} , σ_{yx}^{AHE-} , α_{yx}^{zSHE-} , α_{yx}^{SHE-} dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

3.2.1.3. Edelstein-Tensor

In Systemen, in denen die Rauminversionssymmetrie gebrochen ist, ermöglicht die Spin-Bahn-Wechselwirkung das Auftreten des Edelstein-Effekts, d.h. durch ein äußeres elektrisches Feld E wird eine Spin-Dichte $s(E)$ induziert. Die in dieser Arbeit betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) sowie die zugrundeliegenden Volumensysteme fcc-Cu und fcc-Co besitzen Rauminversionssymmetrie, wobei in den Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten die zentrale Lage der Co-Schicht ($\eta = 5$) und die zentrale Lage der Cu-Schicht ($\eta = 13$) Inversionszentren bilden. Während für Defekte in den zentralen Lagen ($\eta_0 \in \{5, 13\}$), d.h. in den Inversionszentren, die Rauminversionssymmetrie erhalten bleibt, wird diese durch Defekte in den übrigen Lagen gebrochen. Für diese Defektpositionen ist eine durch den Edelstein-Effekt induzierte Spin-Dichte möglich. In den Volumensystemen fcc-Cu und fcc-Co, beschrieben durch ein fcc-Gitter mit einer einatomigen Basis, stellt jede Atomposition ein Inversionszentrum dar, sodass durch substitutionelle Defekte die Rauminversionssymmetrie nicht aufgehoben wird und ein Edelstein-Effekt hier nicht beobachtet werden kann.

Die magnetische Punktgruppe von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) ist $m'm'4/m$ [168, 169] und der Edelstein-Tensor

$$\hat{\chi} = \begin{pmatrix} \chi_{xx} & -\chi_{yx} & 0 \\ \chi_{yx} & \chi_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{zz} \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

besitzt mit χ_{xx} , χ_{yx} , und χ_{zz} im Allgemeinen drei voneinander unabhängige Elemente [54]. Entsprechend Anhang E.1 gilt für den Edelstein-Tensor

$$\hat{\chi}(\eta_0) = -\hat{\chi}(-\eta_0), \quad (3.18)$$

sodass die Graphen $(\eta_0, \chi_{\alpha\beta}(\eta_0))$ für alle $\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$ sowohl in der Co-Schicht als auch in der Cu-Schicht punktsymmetrisch zur zentralen Lage ($\eta_0 = 5$ bzw. $\eta_0 = 13$) sind. Aufgrund numerischer Instabilitäten, die in Anhang I erläutert werden, zeigen sich für die Graphen $(\eta_0, \chi_{\alpha\beta}(\eta_0))$ Abweichungen von der Punktsymmetrie sowohl innerhalb der ferromagnetischen Schicht bzgl. $\eta_0 = 5$ als auch innerhalb der nichtmagnetischen Schicht bzgl. $\eta_0 = 13$. Daher wird der Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ entsprechend

$$\hat{\chi}^{\text{SYM}}(\eta_0) := \frac{1}{2} (\hat{\chi}(\eta_0) - \hat{\chi}(-\eta_0)) \quad (3.19)$$

symmetrisiert. Somit gilt $\hat{\chi}^{\text{SYM}}(\eta_0) = -\hat{\chi}^{\text{SYM}}(-\eta_0)$ und die Graphen $(\eta_0, \chi^{\text{SYM}}(\eta_0))$ sind jeweils innerhalb einer Schicht (ferromagnetisch oder nichtmagnetisch) punktsymmetrisch zur zentralen Lage. Im folgenden wird stets der symmetrisierte Tensor $\hat{\chi}^{\text{SYM}}$ verwendet, wobei auf den Index SYM verzichtet wird.

3.2.1.3.1 Longitudinaler Edelstein-Effekt χ^L

Das longitudinale Edelstein-Tensorelement χ^L beschreibt über $s^L(E) = \chi^L(\hat{E})E$ für ein beliebiges äußeres elektrisches Feld $E = E\hat{E}$ die in Richtung des äußeren elektrischen Feldes E induzierte Spin-Dichte. Für ein äußeres elektrisches Feld in x -Richtung ($\hat{E} = \hat{x}$) ist das longitudinale Edelstein-Tensorelement χ^L durch $\chi^L(\hat{E} = \hat{x}) = \chi_{xx}$ gegeben, während für ein äußeres elektrisches Feld in z -Richtung ($\hat{E} = \hat{z}$) $\chi^L(\hat{E} = \hat{z}) = \chi_{zz}$ gilt. Für ein beliebiges äußeres elektrisches Feld $E = E\hat{E}$ kann χ^L über Gleichung (G.12) mit Gleichung (3.17) bestimmt werden.

3.2.1.3.1.1 Longitudinaler Edelstein-Effekt χ_{xx}

Die Edelstein-Tensorelemente χ_{xx} von Co(9)/Cu(7)(001)-Viel­schichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten sind in Abhängigkeit von der Defektposition innerhalb der Co(9)/Cu(7)(001)-Einheitszelle in Abb. 3.2.17 (a) gegeben.

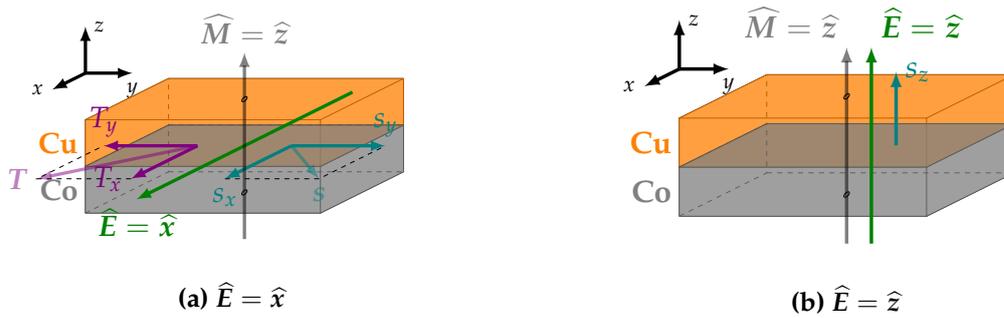


Abbildung 3.2.16.: Co(9)/Cu(7)(001)-Viel­schichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) mit äußerem elektrischen Feld E in (a) x -Richtung und (b) in z -Richtung. Die induzierten Spin-Dichten sind sowohl in (a) und (b) entsprechend Tabelle 3.2.3 eingezeichnet. In (a) ist zusätzlich der Spin-Orbit-Torque entsprechend Tabelle 3.2.4 eingezeichnet, während dieser wegen $t_{zz} = 0$ bei kollinearem Magnetismus in z -Richtung in (b) verschwindet.

Die größten Edelstein-Tensorelemente χ_{xx} in Co(9)/Cu(7)(001)-Viel­schichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) werden sowohl in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) als auch in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) durch Au-Defekte erreicht. Tendenziell werden für Defekte in der ferromagnetischen Schicht größere Edelstein-Tensorelemente χ_{xx} beobachtet als für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht. Für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) werden die betragsmäßig größten Werte für Defektpositionen in den Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{10, 16\}$) erreicht. Die Edelstein-Tensorelemente χ_{zz} und χ_{yx} in Abb. 3.2.17 (b) bzw. Abb. 3.2.19 (a) sind um zwei Größenordnungen größer als die

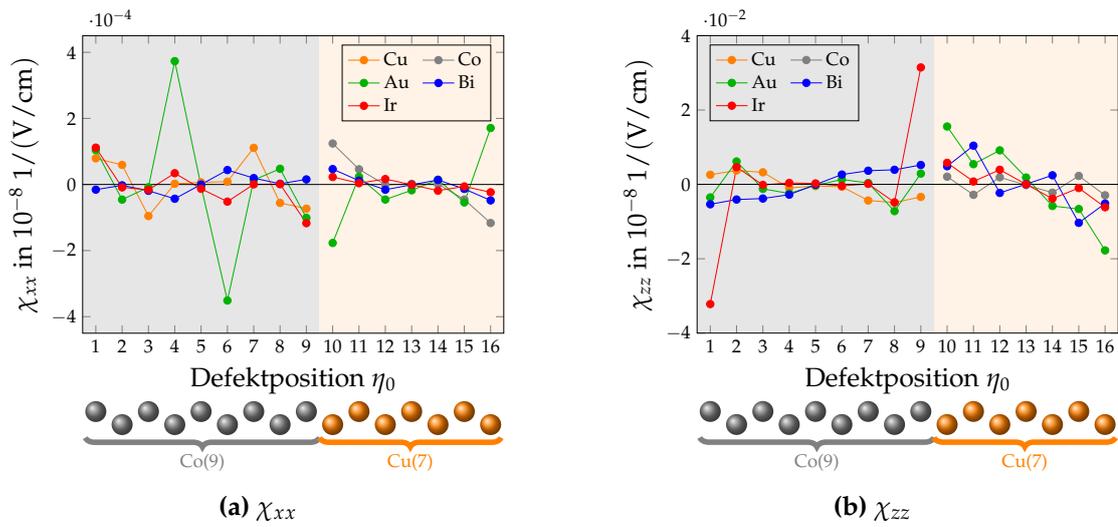


Abbildung 3.2.17.: Longitudinale Edelstein-Tensorelemente (a) χ_{xx} und (b) χ_{zz} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

Edelstein-Tensorelemente χ_{xx} in Abb. 3.2.17 (a) und daher von größerem Interesse. Diese sollen im Folgenden betrachtet werden.

3.2.1.3.1.2 Longitudinaler Edelstein-Effekt χ_{zz}

Ist nun andererseits das äußere elektrische Feld $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ in z -Richtung ($\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{z}}$), d.h. senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche orientiert, so ist die induzierte Spin-Dichte $\mathbf{s}(\mathbf{E}) = s(\mathbf{E})\hat{\mathbf{z}} = \chi_{zz}E\hat{\mathbf{z}}$ ebenfalls in z -Richtung und somit insbesondere in Richtung der Magnetisierung \mathbf{M} orientiert. Je nach Vorzeichen des Tensorelementes χ_{zz} , zeigt die induzierte Spin-Dichte entweder parallel oder antiparallel zur Magnetisierung \mathbf{M} .

Vergleich zwischen Gleichgewichtsmagnetisierungsdichte $\overset{\circ}{m}$ und Nichtgleichgewichtsmagnetisierungsdichte $m(j)$

Die longitudinalen Edelstein-Tensorelemente χ_{zz} sind in Abb. 3.2.17 (b) dargestellt, und im Allgemeinen um zwei Größenordnungen größer als die longitudinalen Edelstein-Tensorelemente χ_{xx} in Abb. 3.2.17 (a), wobei die größten Werte für Ir-Defekte in den Grenzflächenlagen der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, 9\}$) erreicht werden. Entsprechend Gleichung (2.154) ist mit der induzierten Spin-Dichte $\mathbf{s}(\mathbf{E})$ ein induziertes magnetisches Moment $\mathbf{m}(\mathbf{E})$ verknüpft. Experimentell wird oftmals weniger das elektrische Feld \mathbf{E} als vielmehr die elektrische Stromdichte \mathbf{j} vorgegeben, sodass die Beziehung in Gleichung (2.157) geeigneter ist, um die Größenordnung des induzierten magnetischen Momentes $\mathbf{m}(j)$ abzuschätzen. Für eine typische elektrische Stromdichte j mit $j = 10^7 \text{ A/cm}^2$ beträgt die Größenordnung des induzierten magnetischen Momentes $\mathcal{O}(\mathbf{m}(j)) = 10^{-9} \mu_B$. Hierbei wurden entsprechend Abb. 3.2.6 und 3.2.17 (b) $\mathcal{O}(\hat{\chi}) = 10^{-10} \frac{\hbar/2}{\sqrt{\text{cm}}}$ bzw. $\mathcal{O}(\hat{\sigma}) = 11/(\mu\Omega \text{ cm}) \Rightarrow \mathcal{O}(\hat{\sigma}^{-1}) = 1 \mu\Omega \text{ cm}$ verwendet. Entsprechend Abb. 3.1.4 (a) sind die magnetischen Momente im Gleichgewicht $\overset{\circ}{m}$ in der Co-Schicht in der Größenordnung von μ_B und in der Cu-Schicht zwischen $10^{-4} \mu_B$ für Cu-Atome in den zentralen Lagen ($\eta = 13$) und $10^{-1} \mu_B$ für Cu-Atome in den Grenzflächenlagen ($\eta \in \{10, 16\}$). Somit sind die durch den Edelstein-Effekt induzierten magnetischen Momente $\mathbf{m}(\mathbf{E})$ bzw. $\mathbf{m}(j)$ in Richtung der Magnetisierung um mindestens vier Größenordnungen kleiner als die magnetischen Momente im Gleichgewicht.

Beiträge der ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schicht

In Abb. 3.2.18 ist χ_{zz} in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} in z -Richtung ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$) dargestellt. Zusätzlich ist für jede Defektposition der Beitrag der ferromagnetischen Schicht χ_{zz}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht χ_{zz}^{NM} dargestellt. Hierbei gilt $\chi_{zz}(\eta_0) = \chi_{zz}^{\text{FM}}(\eta_0) + \chi_{zz}^{\text{NM}}(\eta_0)$. Für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) wird χ_{zz} im wesentlichen durch den Beitrag der ferromagnetischen Schicht dominiert. Ausnahmen bilden z. B. Co-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$). Für Defekte in der Co-Schicht ist χ_{zz} sowohl durch Beiträge der ferromagnetischen als auch durch Beiträge der nichtmagnetischen Schicht geprägt. So sind für Cu-Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 = 6$) der longitudinale Edelstein-Tensorelemente χ_{zz} durch χ_{zz}^{NM} bestimmt, während für $\eta_0 = 7$ die Beiträge der ferromagnetischen und der nichtmagnetischen Schicht gleich groß sind. Für Ir-Defekte

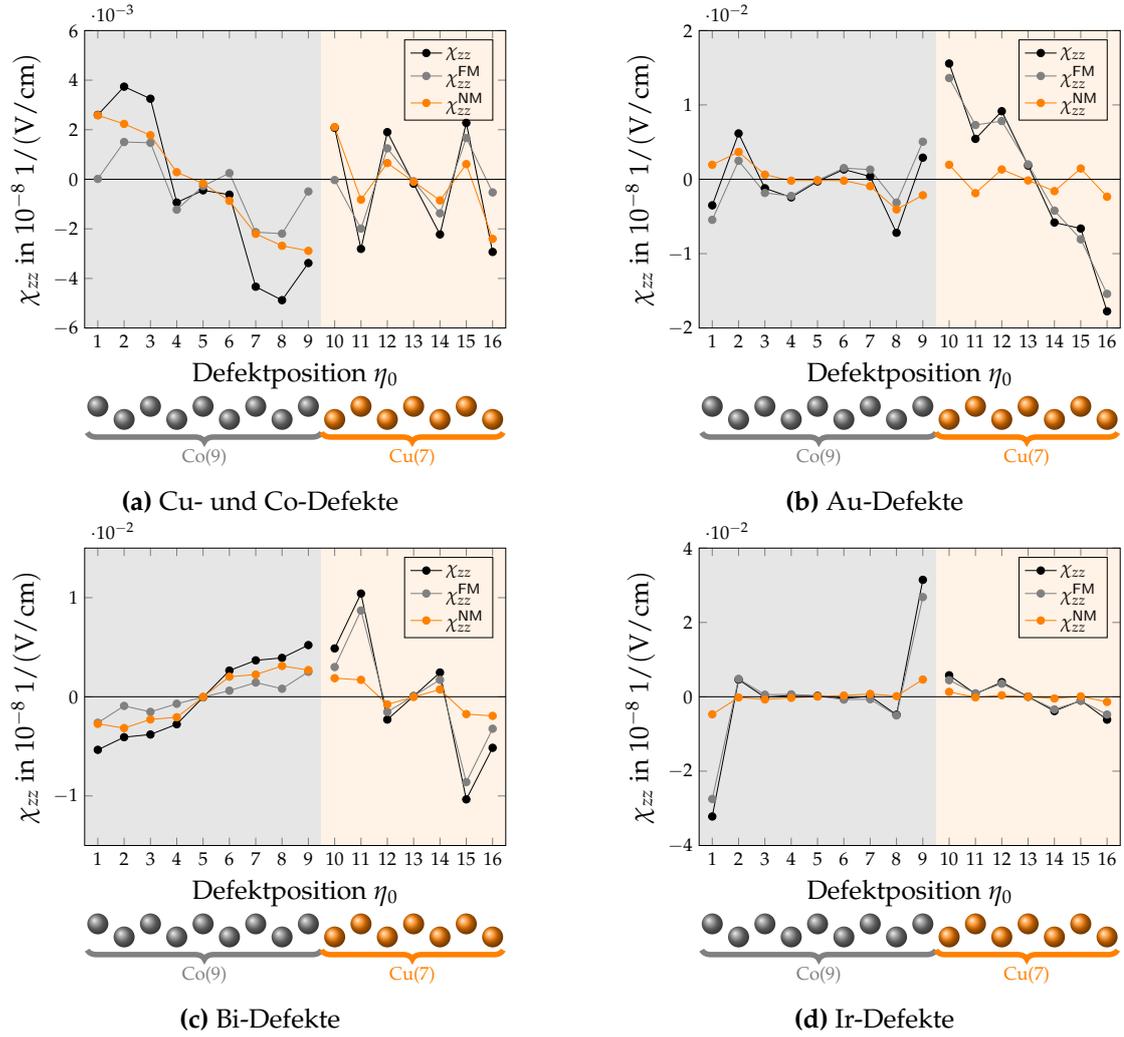


Abbildung 3.2.18.: Longitudinale Edelstein-Tensorelemente χ_{zz} in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte. Zusätzlich sind die Beiträge der ferromagnetischen Schicht χ_{zz}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht χ_{zz}^{NM} entsprechend Gleichung (J.2) dargestellt. Hierbei gilt $\chi_{zz}(\eta_0) = \chi_{zz}^{\text{FM}}(\eta_0) + \chi_{zz}^{\text{NM}}(\eta_0)$. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

in der Co-Schicht hingegen gilt in sehr guter Näherung $\chi_{zz}(\eta_0) \approx \chi_{zz}^{\text{FM}}(\eta_0)$. Für die longitudinalen Edelstein-Tensorelemente χ_{zz} sind in Abb. 3.2.21 die lokalen Beiträge zum longitudinalen Edelstein-Tensorelement χ_{zz}^{η} sowie die symmetrischen und antisymmetrischen Beiträge $\chi_{zz}^{\eta+}$ bzw. $\chi_{zz}^{\eta-}$ dargestellt. Hierbei gilt $\chi_{zz}^{\eta}(\eta_0) \approx \chi_{zz}^{\eta+}(\eta_0)$. Der antisymmetrische Beitrag $\chi_{xx}^{\eta-}$ spielt eine geringere Rolle. Wie in Abb. 3.2.21 beobachtbar,

gilt näherungsweise $\chi_{zz}^{\eta}(\eta_0) \approx \chi_{zz}^{-\eta}(\eta_0)$. Somit bilden sich an inversionssymmetrischen Basisatomen η und $-\eta$ annähernd gleiche Spin-Dichten aus, sodass der integrale Wert χ_{zz} im Allgemeinen größer ist als die lokalen Beiträge χ_{zz}^{η} .

3.2.1.3.2 Transversale Edelstein-Effekte χ^{T_1} und χ^{T_2}

3.2.1.3.2.1 Transversaler Edelstein-Effekt χ_{yx}

Durch ein äußeres elektrisches Feld E in x -Richtung mit $E = E\hat{E}$ und $\hat{E} = \hat{x}$ wird neben einer Spin-Dichte in x -Richtung $s_x(E) = \chi_{xx}E$ auch eine Spin-Dichte in y -Richtung der Größe $s_y(E) = \chi_{yx}E$ induziert. Das entsprechende Edelstein-Tensorelement χ_{yx} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielwandschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) ist für die untersuchten Defekte (Cu, Co, Au, Bi, Ir) in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 in Abb. 3.2.19 (a) dargestellt.

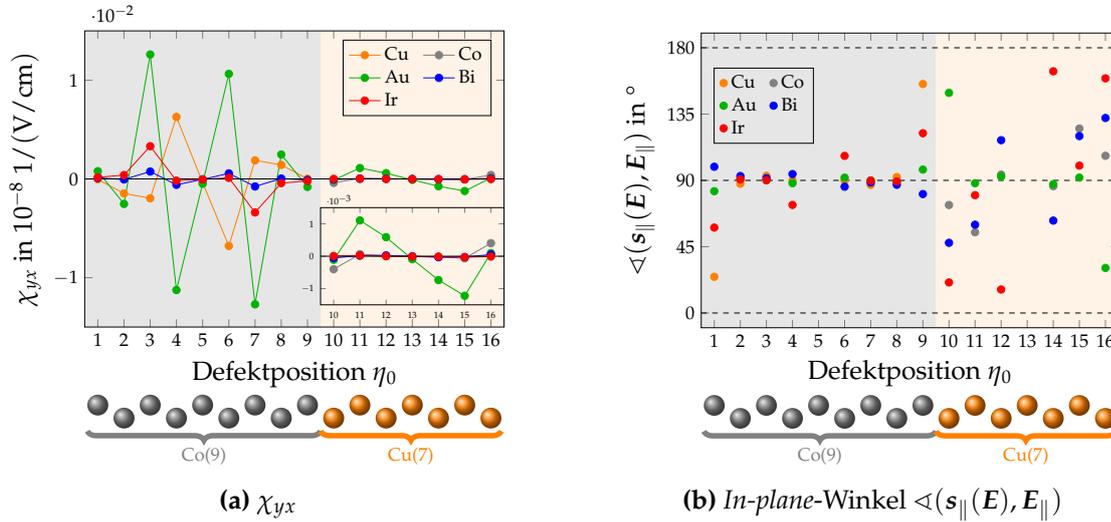


Abbildung 3.2.19.: (a) Transversale Edelstein-Tensorelemente χ_{yx} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielwandschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) für Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 . (b) *In-plane*-Winkel $\angle(s_{\parallel}(E), E_{\parallel})$ entsprechend Gleichung (3.20) in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielwandschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) für Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekte. Sowohl für Defekte in der zentralen Co-Lage ($\eta_0 = 5$) als auch für Defekte in der zentralen Cu-Lage ($\eta_0 = 13$) verschwindet der Edelstein-Tensor und somit ist die induzierte Spin-Dichte identisch Null. In diesen Fällen ist der *in-plane*-Winkel $\angle(s_{\parallel}(E), E_{\parallel})$ nicht definiert. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

Für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) sind die transversalen Edelstein-Tensorelemente χ_{yx} um mindestens eine Größenordnung kleiner als für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$). Innerhalb der ferromagneti-

schen Schicht werden tendenziell große transversale Edelstein-Tensorelemente erzielt, wenn die Defekte in den inneren Lagen der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{3, 4, 6, 7\}$) positioniert sind. Für Defekte in der Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{1, 9\}$) sind die transversalen Edelstein-Effekte im Allgemeinen minimal.

Orientierung der Spin-Dichten

Neben der induzierten Spin-Dichte $\mathbf{s}(\mathbf{E})$ ist insbesondere der Winkel zwischen dieser und dem äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} von Interesse. Entsprechend Gleichung (G.39) mit Gleichung (3.17) ist der Winkel zwischen der induzierten Spin-Dichte $\mathbf{s}(\mathbf{E})$ und dem äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} für ein beliebiges äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ unabhängig vom Azimutwinkel $\varphi = \arctan(E_y/E_x)$ des äußeren elektrischen Feldes \mathbf{E} . Betrachtet man lediglich die *in-plane*-Komponente der induzierten Spin-Dichte $\mathbf{s}_{\parallel}(\mathbf{E}) = (s_x(\mathbf{E}), s_y(\mathbf{E}), 0)^T$ und die *in-plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feldes $\mathbf{E}_{\parallel} = (E_x, E_y, 0)^T$, so gilt

$$\angle(\mathbf{s}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel}) = \arccos\left(\frac{\mathbf{s}_{\parallel}(\mathbf{E}) \cdot \mathbf{E}_{\parallel}}{s_{\parallel}(\mathbf{E})E_{\parallel}}\right) = \arccos\left(\frac{\chi_{xx}}{\sqrt{\chi_{xx}^2 + \chi_{yx}^2}}\right), \quad (3.20)$$

sodass der *in-plane*-Winkel $\angle(\mathbf{s}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel})$ unabhängig vom äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} ist. Man beachte jedoch, dass der *in-plane*-Winkel $\angle(\mathbf{s}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel})$ von der Defektposition η_0 abhängt, da die Tensorelemente χ_{xx} und χ_{yx} von der Defektposition abhängen. Für Defekte in der zentralen Co-Lage ($\eta_0 = 5$) bzw. in der zentralen Cu-Lage ($\eta_0 = 13$) verschwindet der Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ und somit die induzierte Spin-Dichte. In diesen Fällen ist der *in-plane*-Winkel zwischen der *in-plane*-Komponente der Spin-Dichte $\mathbf{s}(\mathbf{E})$ und der *in-plane*-Komponente des elektrischen Feldes \mathbf{E} nicht definiert. Für die untersuchten Defekte sind die *in-plane*-Winkel $\angle(\mathbf{s}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel})$ in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 in Abb. 3.2.19 (b) dargestellt.

Bei einem *in-plane*-Winkel $\angle(\mathbf{s}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel})$ von 0° bzw. 180° ist die *in-plane*-Komponente der induzierten Spin-Dichte $\mathbf{s}_{\parallel}(\mathbf{E})$ parallel bzw. antiparallel zur *in-plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feldes \mathbf{E}_{\parallel} orientiert, während bei einem Winkel von $\angle(\mathbf{s}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel}) = 90^\circ$ die *in-plane*-Komponente der induzierten Spin-Dichten senkrecht zur *in-plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feldes liegt. Mit Ausnahme von Cu- und Ir-Defekten in den Grenzflächenlagen ist für Defekte in der Co-Schicht die induzierte *in-plane*-Spin-Dichte im Allgemeinen nahezu senkrecht zur *in-plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feldes. Für Defekte in der Cu-Schicht ist die Abhängigkeit des *in-plane*-Winkels sowohl von der Defektposition als auch von dem Defekt stärker. So ist z. B. die induzierte Spin-Dichte für Ir-Defekte in der 10. bzw. 12. Lage eher parallel zum äußeren elektrischen Feld ausgerichtet während für einen Ir-Defekt in der dazwischenliegenden 11. Lage die induzierte Spin-Dichte fast senkrecht zum äußeren elektrischen Feld orientiert ist. Während die longitudinalen Tensorelemente χ_{xx} , dargestellt in Abb. 3.2.17 (a), im Allgemeinen für Defekte in der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$)

bzw. für Defekte in der Cu-Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) von gleicher Größenordnung sind, sind die transversalen Tensorelemente χ_{yx} , dargestellt in Abb. 3.2.19 (a), im Allgemeinen für Defekte in der Co-Schicht um eine Größenordnung größer als für Defekte in der Cu-Schicht. In diesen Fällen spielen für die *in-plane*-Winkel die genauen Zahlenwerte eine geringere Rolle. Gilt nämlich $|\chi_{yx}| \gg |\chi_{xx}|$, so ist der *in plane*-Winkel $\angle(s_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel})$ in Gleichung (3.20) unter Verwendung der Näherung $\arccos(x) \approx 90^\circ$ für $|x| \ll 1$ durch $\angle(s_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel}) \approx 90^\circ$ gegeben. In diesen Fällen ist die *in-plane*-Komponente der induzierten Spin-Dichte $s_{\parallel}(\mathbf{E})$ nahezu senkrecht zur *in-plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feld \mathbf{E}_{\parallel} orientiert. Falls χ_{xx} und χ_{yx} von gleicher Größenordnung wie für Defekte in der Cu-Schicht sind, so hängt der *in-plane*-Winkel stark von den individuellen Werten ab und variiert stark für die verschiedenen Defektpositionen innerhalb der Cu-Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$).

Beiträge des symmetrischen und antisymmetrischen Beitrags

Betrachtet man die Zerlegung in die Beiträge der ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schicht χ_{yx}^{FM} bzw. χ_{yx}^{NM} in Abb. 3.2.20, so zeigt sich, dass im Allgemeinen die Spin-Dichte durch den Beitrag der nichtmagnetischen Schicht χ_{yx}^{NM} bestimmt ist. Hilfreich für eine Erklärung ist die Darstellung der lokalen Beiträge zur transversalen Edelstein-Tensorelemente χ_{yx}^{η} , hier am Beispiel von Bi-Defekte in Abb. 3.2.22 dargestellt. Darüberhinaus sind die symmetrischen und antisymmetrischen Beiträge $\chi_{yx}^{\eta+}$ bzw. $\chi_{yx}^{\eta-}$ dargestellt, wobei entsprechend Anhang J.4 der integrale Wert χ_{yx} ausschließlich durch den symmetrischen Beitrag $\chi_{yx}^{\eta+}$ bestimmt ist ($\chi_{yx} = \sum_{\eta} \chi_{yx}^{\eta+}$). Abb. 3.2.22 zeigt, dass die symmetrischen Beiträge $\chi_{yx}^{\eta+}$ im Allgemeinen um mindestens zwei Größenordnungen kleiner als die antisymmetrischen Beiträge sind, sodass lokal an Atomposition η näherungsweise $\chi_{yx}^{\eta}(\eta_0) \approx \chi_{yx}^{\eta-}(\eta_0)$ gilt. Ist der Defekt in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$), so gilt nach Abb. 3.2.20 (c) $\chi_{yx}(\eta_0) \approx \chi_{yx}^{\text{NM}}(\eta_0)$, denn in diesem Fall werden große Beiträge $\chi_{yx}^{\eta+}$ in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta \in \{10, \dots, 16\}$) erzeugt wie z. B. für $\eta_0 = 3$ ersichtlich ist. Hierbei ist zu beachten, dass die symmetrischen Beiträge für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht fünfmal kleiner sind als die entsprechenden Werte für Defekte in der ferromagnetischen Schicht. Somit erklärt sich, dass für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) im Vergleich zu Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Defekten in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) die transversalen Edelstein-Effekte $\chi_{yx}(\eta_0)$ um eine Größenordnung kleiner sind.

Vergleich mit Literatur

2015 untersuchten Kukreja *et al.* in einer ferromagnetisch/nichtmagnetischen-Schicht mit Magnetisierung senkrecht zur Grenzfläche das XMCD-Signal (engl. *x-ray magnetic circular dichroism* (XMCD)) unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes, ebenfalls senkrecht zur Grenzfläche orientiert. Die Analyse des XMCD-Signal zeigt sich, dass sich unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes transiente magnetische

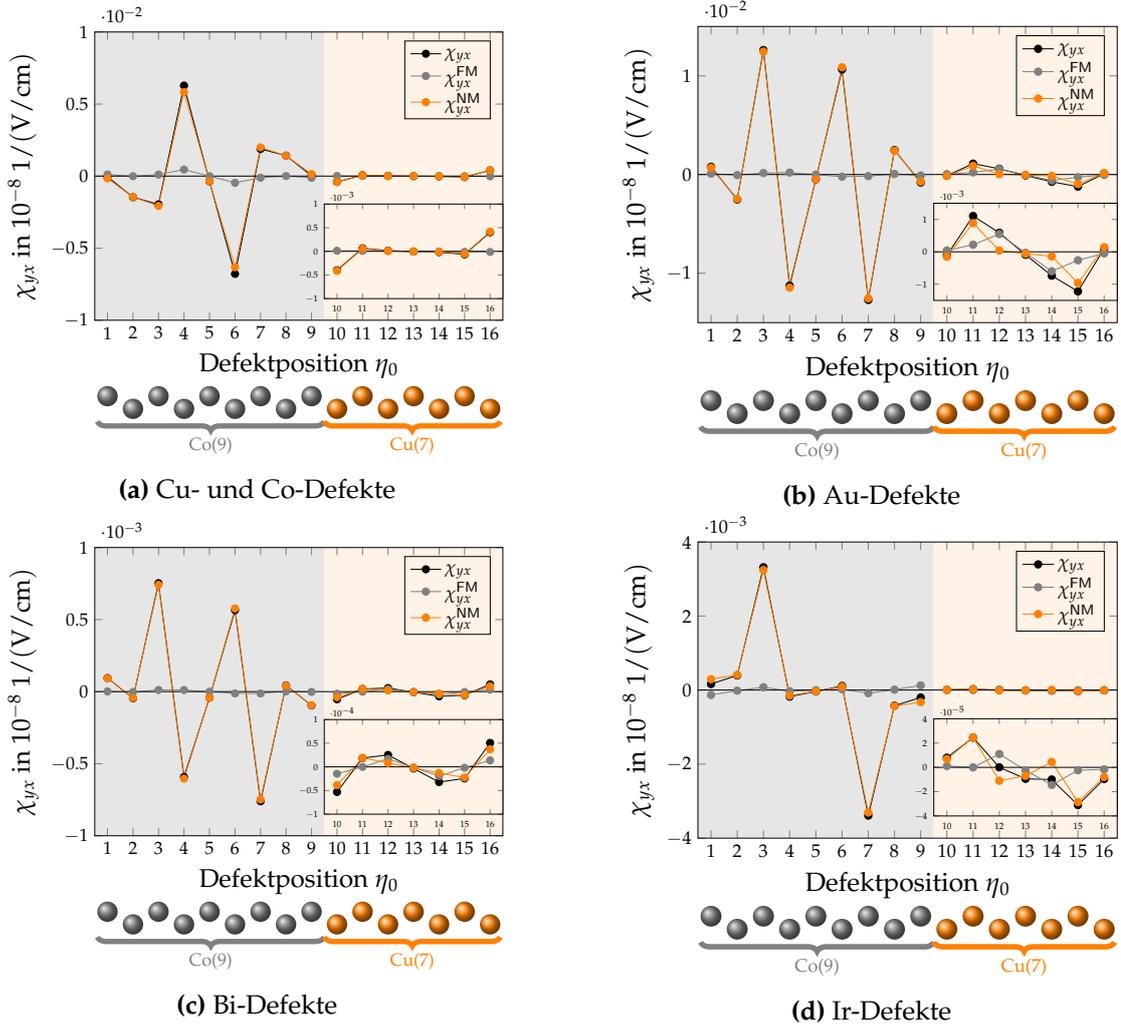


Abbildung 3.2.20.: Transversale Edelstein-Tensorelemente χ_{yx} einer Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte. Zusätzlich sind die Beiträge der ferromagnetischen Schicht χ_{yx}^{FM} und der nicht-magnetischen Schicht χ_{yx}^{NM} entsprechend Gleichung (J.2) dargestellt. Hierbei gilt $\chi_{yx}(\eta_0) = \chi_{yx}^{\text{FM}}(\eta_0) + \chi_{yx}^{\text{NM}}(\eta_0)$. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

Momente in der Cu-Schicht ausbilden. Im Inneren der Cu-Schicht bestimmten sie das magnetische Moment zu $3 \cdot 10^{-5} \mu_B$ pro Cu-Atom, während an der Co/Cu-Grenzfläche das magnetische Moment $4 \cdot 10^{-3} \mu_B$ für das Cu-Atom an der Grenzfläche beträgt [190]. Marmodoro *et al.* folgten dem Aufbau von Kukreja *et al.* und bestimmten unter Verwendung einer *first-principles* Nichtgleichgewichts-Greenschen Funktionsmethode die Änderung der magnetischen Momente in einer Co(8)/Pd(8)(001)-Schicht unter dem

Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes [151]. Aus numerischen Gründen verwendeten Marmodoro *et al.* als nichtmagnetisches Element Pd anstelle von Cu wie von Kukreja *et al.* betrachtet. Die berechneten Änderungen der magnetischen Momente sind von der Größenordnung $\mathcal{O}(\Delta m_z) = 10^{-2} \mu_B$. Ebenso bestimmten Marmodoro *et al.* für das System den Edelstein-Tensor im Rahmen der linearen Antworttheorie nach Kubo [54]. Aus dem Vergleich des Änderungen der magnetischen Momente und dem Edelstein-Tensorelement³ χ_{zz} folgerten sie, dass die Änderungen der magnetischen Momente unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes sowohl in den von ihnen untersuchten Co/Pd-Schichten [151] als auch in den von Kukreja *et al.* [190] untersuchten Co/Cu-Schichten auf den Edelstein-Effekt zurückzuführen sind. Während Marmodoro *et al.* eine Co/Pd-Schicht untersuchten, untersuchten Geranton *et al.* 2016 eine Co(1)/Cu(6)(111)-Schicht mit homogen über die Probe verteilte Defekte (Bi, Ir, C, oder N) mit mittlerer Defektkonzentration $\bar{c} = 0.1$, wobei die Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) liegt [85]. Unter Verwendung der linearisierten Boltzmann-Gleichung bestimmten sie den Edelstein-Tensor, wobei die Größenordnung für das transversale Edelstein-Tensorelement $\mathcal{O}(\chi_{yx}) = 10^{-9} 1/(V/cm)$ betrug [85]. Für die in dieser Arbeit betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) sind die Edelstein-Tensorelemente χ_{zz} von der Größenordnung $10^{-10} 1/(V/cm)$, sodass für eine typische elektrische Stromdichte in z -Richtung magnetische Momente der Größenordnung von $10^{-9} \mu_B$ induziert werden. Somit sind diese um mehrere Größenordnungen kleiner als die von Kukreja *et al.* [190] aus dem XMCD-Signal bestimmten Wert von $4 \cdot 10^{-3} \mu_B$. Die Größenordnung der transversalen Edelstein-Tensorelemente χ_{yx} entspricht hingegen den von Geranton *et al.* [85] bestimmten Werten. Wie bei Geranton *et al.* zeigt sich auch in den hier betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$), dass der *scattering in*-Beitrag zur mittleren freien Weglänge vernachlässigbar für das Edelstein-Tensorelement χ_{yx} ist.

3.2.1.3.3 Zusammenfassung

Für eine typische elektrische Stromdichte $j = 10^7 \text{ A/cm}^2$ gilt für die durch den Edelstein-Effekt induzierten Magnetisierungsdichten im Nichtgleichgewicht $m(j) = 10^{-7} \mu_B$ und sind somit um vier Größenordnungen kleiner die magnetischen Momente im Gleichgewicht mit $\mathcal{O}(\overset{\circ}{m}^\eta) = 1 \mu_B$ für $\eta \in \text{FM}$ und $\mathcal{O}(\overset{\circ}{m}^\eta) < 10^{-2} \mu_B$ für $\eta \in \text{NM}$. Für ein äußeres elektrisches Feld E parallel zur Co/Cu-Grenzfläche, d.h. in der xy -Ebene (*in plane*), ist die *in plane*-Komponente der Spin-Dichte in erster Näherung senkrecht zum äußeren elektrischen Feld E . Die lokalen Beiträge zum Edelstein-Tensor $\widehat{\chi}^\eta(\eta_0)$ sind im Allgemeinen größer als der integrale Wert des Edelstein-Tensors $\widehat{\chi}$. Im Allgemeinen gilt für die induzierten Spin-Dichten an durch Rauminversionssymmetrie verbundenen Basisatome (η und $-\eta$) näherungsweise $s^\eta(E) \approx -s^{-\eta}(E)$, sodass sich diese Beiträge in der Summe über die Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten aufheben.

³In den Referenzen [54, 151] wird der Edelstein-Tensor mit \widehat{p} bezeichnet.

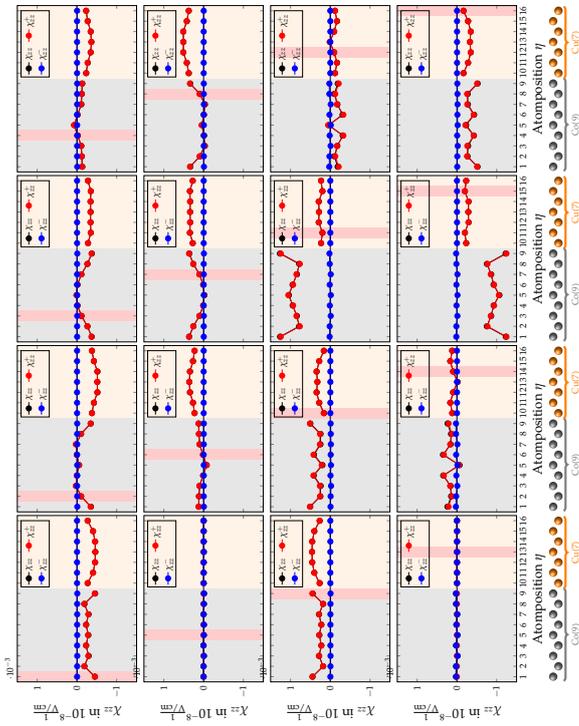


Abbildung 3.2.21.: Lokale Beiträge χ_{zz}^{II} zu den longitudinalen Edelstein-Tensorelementen χ_{zz} für Bi-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Ferner sind die symmetrischen und antisymmetrischen Beiträge χ_{zz}^{II+} bzw. χ_{zz}^{II-} entsprechend Gleichung (J.9) eingezeichnet. Hierbei gilt $\chi_{zz}^{II}(\eta_0) = \chi_{zz}^{II+}(\eta_0) + \chi_{zz}^{II-}(\eta_0)$ für alle $\eta, \eta_0 \in \{1, \dots, 16\}$. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%. Die jeweilige Defektposition η_0 ist durch einen roten Streifen dargestellt.

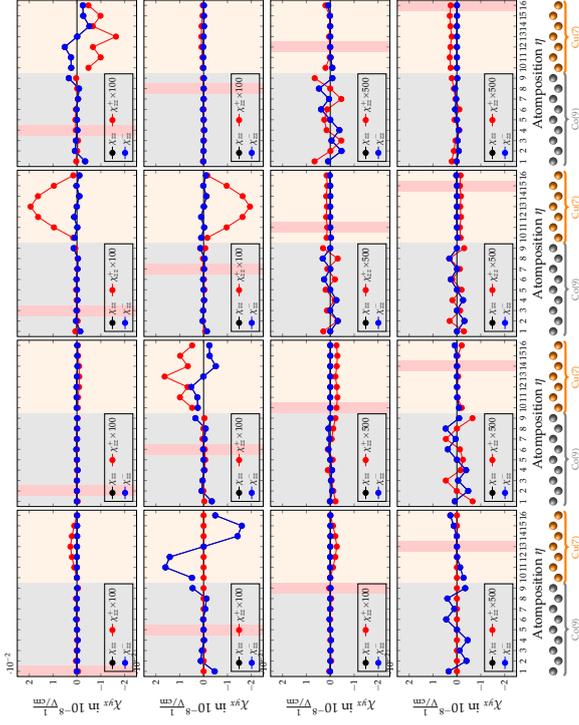


Abbildung 3.2.22.: Lokale Beiträge χ_{yx}^{II} zu den transversalen Edelstein-Tensorelementen χ_{yx} für Bi-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Ferner sind die symmetrischen und antisymmetrischen Beiträge χ_{yx}^{II+} bzw. χ_{yx}^{II-} entsprechend Gleichung (J.9) eingezeichnet. Hierbei gilt $\chi_{yx}^{II}(\eta_0) = \chi_{yx}^{II+}(\eta_0) + \chi_{yx}^{II-}(\eta_0)$ für alle $\eta, \eta_0 \in \{1, \dots, 16\}$. Die Werte der symmetrischen Beiträge χ_{yx}^{II+} sind zur besseren Darstellung für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) und für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) mit dem Faktor 100 bzw. 500 multipliziert dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%. Die jeweilige Defektposition η_0 ist durch einen roten Streifen dargestellt.

3.2.1.4. Spin-Orbit-Torkance

Wie in Abschnitt 1.2.4.2 dargestellt, kann sowohl durch den Spin-Hall-Effekt als auch durch den Edelstein-Effekt in ferromagnetisch/nichtmagnetischen Vielfachschichten ein Drehmoment auf die Magnetisierung ausgeübt werden. Gleichung (1.4) mit Gleichung (1.7) stellt eine vereinfachte Beschreibung dar, die einerseits die lokale Abhängigkeit der Magnetisierung bzw. der magnetischen Momente in ferromagnetischen/nichtmagnetischen Vielfachschichten und andererseits die individuellen Eigenschaften jedes einzelnen Zustandes $\overset{\circ}{\psi}_{kvs}$ vernachlässigt. Um dies zu berücksichtigen wird bei dem durch den Edelstein-Effekt induzierten Spin-Orbit-Torque dieser entsprechend Gleichung (2.104) bestimmt unter Verwendung des Torque-Operators aus Gleichung (2.122). Letzterer wird verwendet um den Erwartungswert entsprechend Gleichung (2.123) zu bestimmen. Der durch den Spin-Hall-Effekt induzierte Spin-Orbit-Torque wird im Folgenden nicht weiter betrachtet. Die über Gleichung (2.156) definierte Spin-Orbit-Torkance \hat{t} hat in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) mit magnetischer Punktgruppe $m'm'4/m$ [168, 169] die Darstellung

$$\hat{t} = \begin{pmatrix} t_{xx} & -t_{yx} & 0 \\ t_{yx} & t_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & t_{zz} \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

wobei für kollinearen Magnetismus in z-Richtung insbesondere $t_{zz} = 0$ gilt [53]. Ausgehend von Gleichung (2.163) verbleiben für den Spezialfall eines sphärischen magnetischen Feldes $B^\eta(\mathbf{r}) = B^\eta(r)$ bei kollinearem Magnetismus in z-Richtung

$$t_{xx}^\eta(\eta_0) \approx \chi_{yx}^\eta(\eta_0) B_z^\eta(r)|_{r=0} \quad \text{und} \quad t_{yx}^\eta(\eta_0) \approx -\chi_{xx}^\eta(\eta_0) B_z^\eta(r)|_{r=0} \quad (3.22)$$

als Beziehungen zwischen Spin-Orbit-Torkance \hat{t} und Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$.

Wie auch der Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ ist auch die Spin-Orbit-Torkance \hat{t} ein Pseudotensor, sodass für die betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten die Spin-Orbit-Torkance punktsymmetrisch zur zentralen Lage der ferromagnetischen Schicht und zur zentralen Lage der nichtmagnetischen Schicht ist, d.h. $\hat{t}(\eta_0) = -\hat{t}(-\eta_0)$. Wegen numerischen Instabilitäten, die in Anhang I erläutert werden, zeigen sich für die Graphen $(\eta_0, t_{\alpha\beta}(\eta_0))$ Abweichungen von der Punktsymmetrie sowohl innerhalb der ferromagnetischen Schicht bzgl. $\eta_0 = 5$ als auch innerhalb der nichtmagnetischen Schicht bzgl. $\eta_0 = 13$, sodass die Spin-Orbit-Torkance \hat{t} wie auch der Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ entsprechend

$$\hat{t}^{\text{SYM}}(\eta_0) := \frac{1}{2} (\hat{t}(\eta_0) - \hat{t}(-\eta_0)) \quad (3.23)$$

symmetrisiert wird. Wie $\hat{\chi}^{\text{SYM}}$ erfüllt auch \hat{t}^{SYM} per Definition die Punktsymmetrie bzgl. der zentralen Lage der ferromagnetischen und bzgl. der zentralen Lage der nichtmagnetischen Schicht, d.h. $\hat{t}^{\text{SYM}}(\eta_0) = -\hat{t}^{\text{SYM}}(-\eta_0)$. Sowohl die Tensorelemente $t_{\alpha\beta}$ als auch

die symmetrisierten Tensorelemente $t_{\alpha\beta}^{\text{SYM}}$ sind für die untersuchten Defekte (Cu, Co, Au, Bi, und Ir) in Abb. I.7.2 dargestellt. Im folgenden werden wie beim Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ stets die symmetrisierten Tensoren \hat{t}^{SYM} für die Spin-Orbit-Torkance verwendet, wobei auf den Index SYM verzichtet wird.

3.2.1.4.1 Longitudinale Spin-Orbit-Torkance t^{L}

3.2.1.4.1.1 Longitudinale Spin-Orbit-Torkance t_{xx}

Die longitudinalen Spin-Orbit-Torkance $t_{xx}(\eta_0)$ für die untersuchten Defekte (Cu, Co, Au, Bi, Ir) in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) sind in Abb. 3.2.23 (a) in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 dargestellt.

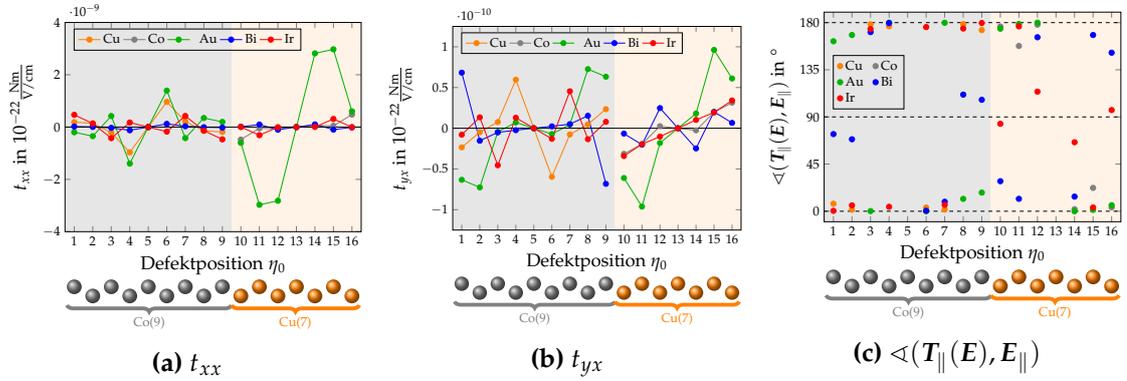


Abbildung 3.2.23.: (a) Longitudinale Spin-Orbit-Torkance t_{xx} und (b) transversale Spin-Orbit-Torkance t_{yx} jeweils in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) für Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 . (c) *In-plane*-Winkel $\angle(\mathbf{T}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel})$ in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) für Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekte. Sowohl für Defekte in der zentralen Co-Lage ($\eta_0 = 5$) als auch für Defekte in der zentralen Cu-Lage ($\eta_0 = 13$) verschwindet die Spin-Orbit-Torkance, sodass der Spin-Orbit-Torque identisch Null ist. In diesen Fällen ist der *in-plane*-Winkel $\angle(\mathbf{T}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel})$ nicht definiert. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

Beiträge der ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schicht

Interessanter als die integralen Größen t_{xx} sind die Beiträge der ferromagnetischen Schicht t_{xx}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht t_{xx}^{NM} . Diese sind am Beispiel von Bi-Defekten in Abb. 3.2.24 (a) dargestellt. Die entsprechenden Abbildungen für Cu- und Co-Defekte, Au-Defekte, und Ir-Defekte sind in Abb. J.5.3 zu finden. Für alle Defektpositionen η_0 gilt $t_{xx}(\eta_0) = t_{xx}^{\text{FM}}(\eta_0) + t_{xx}^{\text{NM}}(\eta_0)$. Der integrale Wert t_{xx} wird fast ausschließlich

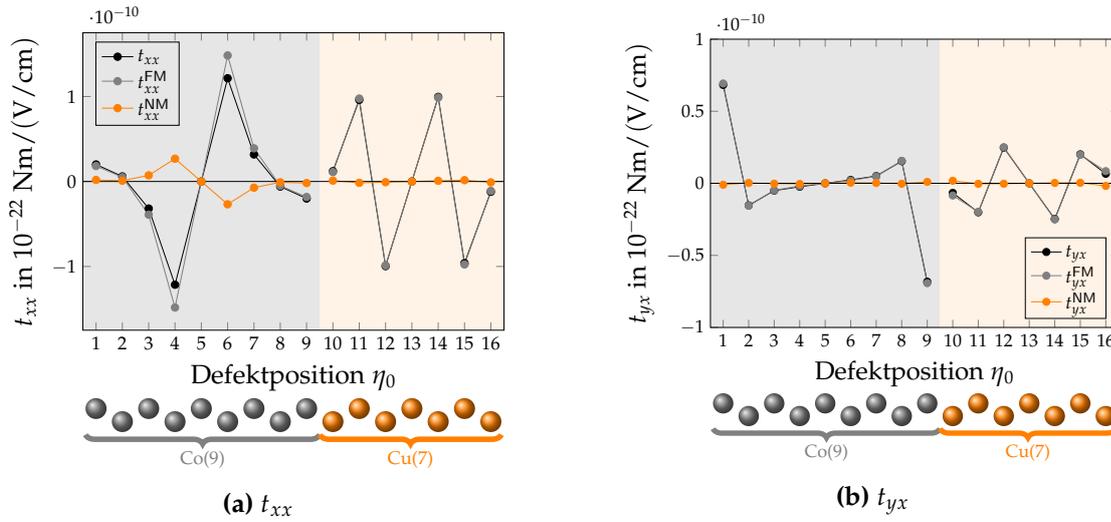


Abbildung 3.2.24.: (a) Longitudinale Spin-Orbit-Torkance t_{xx} und (b) transversale Spin-Orbit-Torkance t_{yx} in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für Bi-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vieltschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$). Zusätzlich sind die Beiträge der ferromagnetischen Schicht t_{xx}^{FM} bzw. t_{yx}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht t_{xx}^{NM} bzw. t_{yx}^{NM} entsprechend Gleichung (J.2) dargestellt. Hierbei gilt $t_{xx}(\eta_0) = t_{xx}^{\text{FM}}(\eta_0) + t_{xx}^{\text{NM}}(\eta_0)$ bzw. $t_{yx}(\eta_0) = t_{yx}^{\text{FM}}(\eta_0) + t_{yx}^{\text{NM}}(\eta_0)$. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%. Die entsprechenden Abbildungen für Cu- und Co-Defekte, Au-Defekte, und Ir-Defekte sind in Abb. J.5.3 dargestellt.

durch den Beitrag der ferromagnetischen Schicht bestimmt ($t_{xx}(\eta_0) \approx t_{xx}^{\text{FM}}(\eta_0)$). Der Beitrag des Basisatoms η zum Erwartungswert des Spin-Orbit-Torque $\mathbf{T}_{vs}^{\eta}(\mathbf{k})$ kann näherungsweise entsprechend Gleichung (2.125) dargestellt werden. In erster Näherung kann die reale Cu-Schicht als nichtmagnetisch betrachtet werden, sodass $\mathbf{B}^{\eta}(\mathbf{r}) = 0$ für $\eta \in \text{NM}$ gilt. So gelten aufbauend aufeinander $\mathbf{T}_{vs}^{\eta}(\mathbf{k}) = 0$ für $\eta \in \text{NM}$ wegen Gleichung (2.125), $t_{\alpha\beta}^{\text{NM}}(\eta_0) = 0$ wegen Gleichung (2.162), und $t_{\alpha\beta}^{\text{NM}}(\eta_0) = 0$. Da das magnetische Feld in der Cu-Schicht, insbesondere in den Grenzflächenlagen ($\eta \in \{10, 16\}$), jedoch nicht vollständig verschwindet, trägt die Cu-Schicht ebenfalls mit einem geringen Beitrag zur Spin-Orbit-Torkance t_{xx} bei.

Vergleich zwischen Edelstein-Tensor und Spin-Orbit-Torkance

Entsprechend Gleichung (3.22) kann ein Zusammenhang zwischen den lokalen Beiträgen zum Edelstein-Tensor und den lokalen Beiträgen zur Spin-Orbit-Torkance abgeleitet werden. Da in der nichtmagnetischen Schicht das magnetische Feld nahezu Null ist, ist die Proportionalität zwischen t_{xx} und χ_{yx} bzw. zwischen t_{yx} und χ_{xx} auf die magnetische Schicht wegen $B_z^{\eta}(\mathbf{r}) \neq 0$ beschränkt. Für Bi-Defekte sind $t_{xx}^{\eta}(\eta_0)$ und $\chi_{yx}^{\eta}(\eta_0)$ in Abb. 3.2.25 dargestellt und für die übrigen Defekte (Co, Cu, Au, Ir) in Abb. J.5.4.

Die Proportionalität zwischen $t_{xx}^\eta(\eta_0)$ und $\chi_{yx}^\eta(\eta_0)$ ist für Bi-Defekte zu beobachten.

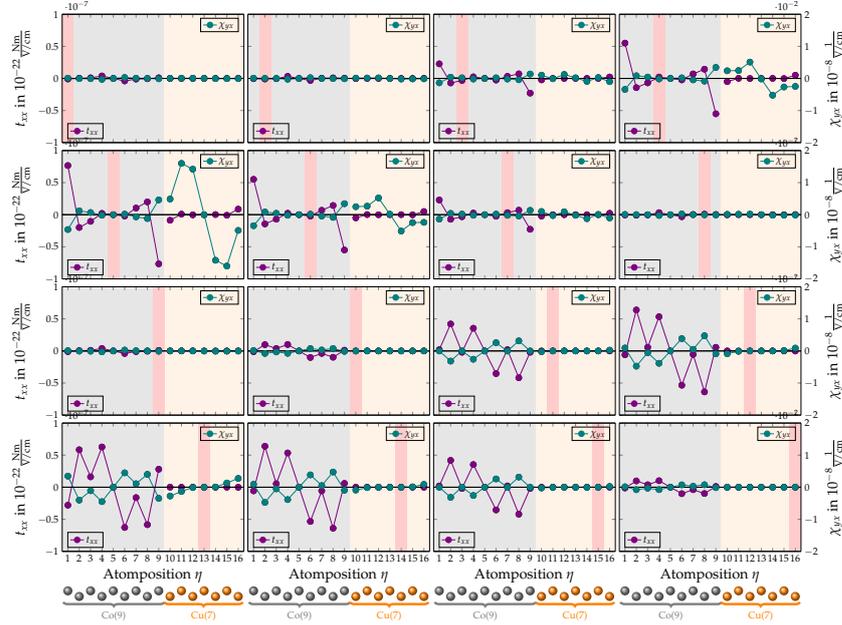


Abbildung 3.2.25.: Lokale Beiträge t_{xx}^η zur longitudinalen Spin-Orbit-Torkance t_{xx} und lokale Beiträge χ_{yx}^η zu transversalen Edelstein-Tensorelementen χ_{yx} für Bi-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%. Die jeweilige Defektposition η_0 ist durch einen roten Streifen dargestellt.

Besonders sichtbar für Defekte in den inneren Lagen der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{11, \dots, 15\}$) bzw. für Bi-Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$). Außerdem zeigt Abb. 3.2.25 repräsentativ für alle untersuchten Defekte (Co, Cu, Au, Bi, Ir), dass lokal die Spin-Orbit-Torkance mit $\mathcal{O}(t_{xx}^\eta) = 10^{-29}$ Nm/(V/cm) um bis zu drei Größenordnungen größer sein kann als der integrale Spin-Orbit-Torque mit $\mathcal{O}(t_{xx}) = 10^{-31}$ Nm/(V/cm). Entsprechend Gleichung (2.164) lässt sich das lokale Drehmoment $T_\alpha^\eta(\mathbf{E})$ auf die Wechselwirkung zwischen der vom äußeren elektrischem Feld \mathbf{E} induzierten Spin-Dichte und dem magnetischen Feld $\mathbf{B}^\eta(\mathbf{r})$ bzw. der Magnetisierung \mathbf{M} zurückführen.

3.2.1.4.2 Transversale Spin-Orbit-Torkance t^{T_1} und t^{T_2}

3.2.1.4.2.1 Transversale Spin-Orbit-Torkance t_{yx}

Die transversalen Spin-Orbit-Torkance t_{yx} sind für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte eingebettet in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) in Abb. 3.2.23 (b) dargestellt. Im Vergleich zur longitudinalen Spin-Orbit-Torkance t_{xx} mit

$\mathcal{O}(t_{xx}) = 10^{-31}$ Nm/(V/cm) ist die transversale Spin-Orbit-Torkance t_{yx} mit $\mathcal{O}(t_{yx}) = 10^{-32}$ Nm/(V/cm) im Allgemeinen um mindestens eine Größenordnung kleiner. Wie bei der longitudinalen Spin-Orbit-Torkance t_{xx} werden die betragsmäßig größten Werte für die transversalen Spin-Orbit-Torkance t_{yx} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) mit Au-Defekten beobachtet. Während die longitudinale Spin-Orbit-Torkance für Au-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) und bisweilen auch in der ferromagnetischen Schicht im Allgemeinen um eine Größenordnung größer als die Werte für die anderen Defekte ist, sind die transversalen Spin-Orbit-Torkance t_{yx} im Allgemeinen für verschiedene Defekte und verschiedenen Defektpositionen von ähnlicher Größenordnung.

Orientierung der Spin-Orbit-Torques

Anstelle beide Elemente der Spin-Orbit-Torkance \hat{t} individuell zu betrachten, bietet es sich an in gleicher Weise wie für die induzierte Spin-Dichte $s(\mathbf{E})$ den Winkel zwischen dem Spin-Orbit-Torque $\mathbf{T}(\mathbf{E})$ und dem äußeren elektrischem Feld \mathbf{E} zu betrachten. Hierbei beschränkt man sich auf den Winkel zwischen der *in plane*-Komponente des Spin-Orbit-Torques $\mathbf{T}_{\parallel}(\mathbf{E}) := (T_x(\mathbf{E}), T_y(\mathbf{E}), 0)^T$ und der *in plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feldes $\mathbf{E}_{\parallel} := (E_x, E_y, 0)^T$, der sich analog zu Gleichung (3.20) ergibt, wobei die Größen entsprechend zu ersetzen sind. Wie $\angle(s_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel})$ aus Gleichung (3.20) ist $\angle(\mathbf{T}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel})$ unabhängig von der *in plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feldes \mathbf{E}_{\parallel} . In Systemen, in denen $|t_{yx}| \ll |t_{xx}|$ gilt, folgt $\angle(\mathbf{T}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel}) \approx \arccos(\text{sgn}(t_{xx}))$. Für positive longitudinale Spin-Orbit-Torkance und negative longitudinale Spin-Orbit-Torkance t_{xx} , d.h. $\text{sgn}(t_{xx}) = +1$ bzw. $\text{sgn}(t_{xx}) = -1$, beträgt der *in plane*-Winkel $\angle(\mathbf{T}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel}) = 0^\circ$ bzw. $\angle(\mathbf{T}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel}) = 180^\circ$. Der *in plane*-Winkel $\angle(\mathbf{T}_{\parallel}(\mathbf{E}), \mathbf{E}_{\parallel})$ ist in Abb. 3.2.23 (c) in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für die verschiedenen Defekte (Cu, Co, Au, Bi, Ir) in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten dargestellt. In der Mehrzahl der Systeme sind die *in plane*-Winkel entweder näherungsweise 0° oder näherungsweise 180° , d.h. die *in plane*-Komponente des Spin-Orbit-Torque $\mathbf{T}_{\parallel}(\mathbf{E})$ ist parallel oder antiparallel zur *in plane*-Komponente des äußeren elektrischem Feld \mathbf{E}_{\parallel} orientiert. Für Bi-Defekte in der Umgebung der Grenzflächenlagen der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, 2, 8, 9\}$) und für Ir-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, 12, 14, 16\}$) betragen die *in plane*-Winkel näherungsweise 90° , sodass die *in plane*-Komponente des Spin-Orbit-Torque $\mathbf{T}_{\parallel}(\mathbf{E})$ und die *in plane*-Komponente des äußeren elektrischen Feldes \mathbf{E}_{\parallel} senkrecht zueinander stehen.

Beiträge der ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schicht

Die Zerlegung der Spin-Orbit-Torkance t_{yx} in die Beiträge der ferromagnetischen und der nichtmagnetischen Schicht t_{yx}^{FM} bzw. t_{yx}^{NM} ist möglich. In Abb. 3.2.24 (b) sind am Beispiel von Bi-Defekten die transversalen Spin-Orbit-Torkance t_{yx} zusammen mit den individuellen Beiträgen der ferromagnetischen Schicht t_{yx}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht t_{yx}^{NM} dargestellt. Die transversalen Spin-Orbit-Torkance t_{yx} für Cu-, Co-, Au-,

und Ir-Defekte sind in Abb. J.5.5 dargestellt. Wie zuvor bei den longitudinalen Spin-Orbit-Torkance t_{xx} in Abb. 3.2.24 (a), werden die transversalen Spin-Orbit-Torkance t_{yx} für alle Defektpositionen fast ausschließlich durch den Beitrag der ferromagnetischen Schicht t_{yx}^{FM} bestimmt. Wie bei der longitudinalen Spin-Orbit-Torkance t_{xx} lässt sich diese Beobachtung darauf zurückzuführen, dass der zugehörige Erwartungswert $T_{vs}^{\eta y}(\mathbf{k})$, näherungsweise durch Gleichung (2.125) beschrieben, fast ausschließlich in der ferromagnetischen Schicht von Null verschieden ist und in der nichtmagnetischen Schicht verschwindet. Signifikante Beiträge der nichtmagnetischen Schicht t_{yx}^{NM} sind für Ir-Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) zu verzeichnen, dennoch gilt auch hier weiterhin $|t_{yx}^{\text{FM}}(\eta_0)| \gg |t_{yx}^{\text{NM}}(\eta_0)|$. Die Beobachtung $t_{yx}(\eta_0) \approx t_{yx}^{\text{FM}}(\eta_0)$ kann wie bei der longitudinalen Spin-Orbit-Torkance ebenfalls anhand der lokalen Beiträge t_{yx}^{η} verifiziert werden. Außerdem kann wie für die longitudinale Spin-Orbit-Torkance t_{xx} die Beziehung in Gleichung (3.22) zwischen dem Edelstein-Tensor und der Spin-Orbit-Torkance nachvollzogen werden. Diese sind in Anhang J.5.1.2.2.1 in Abb. J.5.6 dargestellt.

Vergleich mit Literatur

Unter Verwendung der Boltzmann-Gleichung bestimmten Haney *et al.* in ferromagnetisch/nichtmagnetischen-Schichten die Beiträge vom Spin-Hall-Effekt und vom Edelstein-Effekt zum Spin-Orbit-Torque [191] und hoben bereits die Bedeutung von Grenzflächen hervor. Theoretische Betrachtungen zum Spin-Orbit-Torque unter Verwendung des quantenmechanischen Kubo-Formalismus wurden zuerst von Freimuth *et al.* am Beispiel von Co/Pt(111)- und Mn/W(001)-Schichten gegeben [153]. Weiterhin untersuchten Freimuth *et al.* neben dem Spin-Orbit-Torque den zugehörigen inversen Effekt, den inversen Spin-Orbit-Torque in ferromagnetisch/nichtmagnetischen Schichten [154]. Freimuth *et al.* [153, 154, 156] betrachtete den Einfluss von Defekten im Rahmen der konstanten Γ -Approximation, die im Rahmen der Boltzmann-Transporttheorie einer zustandsunabhängigen Relaxationszeit τ entspricht [153]. Wimmer *et al.* verwendete den Kubo-Formalismus im Rahmen einer relativistischen Korringa-Kohn-Rostoker-Greenschen Funktionsmethode in Kombination mit der CPA (engl. *coherent potential approximation*) zur realistischen Beschreibung von Legierungen $A_{1-x}B_x$ über den gesamten Konzentrationsbereich $x \in [0, 1]$ [53]. Geranton *et al.* nutzen die Boltzmann-Transporttheorie inklusive dem *scattering in*-Beitrag zur Beschreibung des Spin-Orbit-Torque u. A. in Co(1)/Cu(6)(111)-Filmen mit substitutionellen Defekten (Bi, Ir, C, N) [85]. Co/Cu/Co-Schichten wurden darüberhinaus sowohl experimentell von Baek *et al.* [192] als auch theoretisch von Freimuth *et al.* [156] analysiert. Die von Geranton *et al.* bestimmten lokalen longitudinalen Spin-Orbit-Torkances waren von der Größenordnung $\mathcal{O}(t_{xx}^{\eta}) = 10^{-27} \text{ Nm}/(\text{V}/\text{cm})$. Diese ist um zwei Größenordnungen größer als die in den hier untersuchten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) mit $\mathcal{O}(t_{xx}^{\eta}) = 10^{-29} \text{ Nm}/(\text{V}/\text{cm})$.

3.2.1.4.3 Zusammenfassung

Die Spin-Orbit-Torkance \hat{t} wird im Wesentlichen durch die ferromagnetische Schicht bestimmt, da in diesen die Magnetisierung lokal wesentlich von Null verschieden ist. Für ein äußeres elektrisches Feld E parallel zur Co/Cu-Grenzfläche (*in plane*) ist die *in plane*-Komponente der Spin-Orbit-Torques näherungsweise parallel zum äußeren elektrischen Feld E bzw. antiparallel zum äußeren elektrischen Feld E ausgerichtet. Zusammen mit der *in plane*-Komponente der Spin-Dichte bilden die *in plane*-Komponente der Spin-Dichte und die Magnetisierung ein orthogonales Dreibein.

3.2.2. Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche

Im Vergleich zu Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) besitzen Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) eine geringere Symmetrie. Insbesondere ist durch die Wahl $\widehat{M} = \widehat{y}$ die C_{4z} -Symmetrie aufgehoben. Die magnetische Punktgruppe von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) ist $m'mm'$ [168, 169]. In diesem Kapitel werden die Gemeinsamkeiten und Unterschiede zwischen Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) mit den bisher betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) betrachtet. Hierbei wird sowohl der Einfluss der Richtung der Magnetisierung M als auch der Einfluss der Richtung des äußeren elektrischen Feldes E analysiert.

3.2.2.1. Tensor der elektrischen Leitfähigkeit

Tabelle 3.2.1.: Tensoren der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$ und elektrischen Stromdichten $j(E)$ für ein äußeres elektrisches Feld $E = E\widehat{E}$ in x -, y -, und z -Richtung von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) und Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$).

	$\hat{\sigma}$	$j(E)$ für $E = E\widehat{E}$ mit		
		$\widehat{E} = \widehat{x}$	$\widehat{E} = \widehat{y}$	$\widehat{E} = \widehat{z}$
$\widehat{M} = \widehat{y}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & -\sigma_{zx} \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ \sigma_{zx} & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}E \\ 0 \\ \sigma_{zx}E \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ \sigma_{yy}E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\sigma_{zx}E \\ 0 \\ \sigma_{zz}E \end{pmatrix}$
$\widehat{M} = \widehat{z}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{yx} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}E \\ \sigma_{yx}E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\sigma_{yx}E \\ \sigma_{xx}E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sigma_{zz}E \end{pmatrix}$

In Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) mit der magnetischen Punktgruppe $m'mm'$ [168, 169] ist der Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\widehat{\sigma}$ in Tabelle 3.2.1 angegeben [53, 146]. Der Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\widehat{\sigma}$ für fcc-Co mit Magnetisierung \mathbf{M} in y -Richtung besitzt ebenfalls die Form in Tabelle 3.2.1, wobei wegen der kubischen Symmetrie $\sigma_{zz} = \sigma_{xx}$ gilt. Für fcc-Cu mit Spin-Quantisierungsachse in y -Richtung ist $\widehat{\sigma}$ diagonal mit $\sigma_{zz} = \sigma_{xx}$, aber $\sigma_{yy} \neq \sigma_{xx}$. Magnetische Defekte in fcc-Cu brechen die Zeitumkehrsymmetrie, sodass in diesen Fällen der Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\widehat{\sigma}$ die Struktur in Tabelle 3.2.1 besitzt.

3.2.2.1.1 Anomaler Hall-Winkel α^{AHE}

Der anomale Hall-Winkel als Maß für die Größe des anomalen Hall-Effektes bestimmt sich für ein beliebiges äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\widehat{\mathbf{E}}$ mit $\widehat{\mathbf{E}} = (\cos\varphi \sin\vartheta, \sin\varphi \sin\vartheta, \cos\vartheta)^T$ in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) unter Verwendung von Tabelle 3.2.1 über Gleichung (G.35). Für die Spezialfälle äußerer elektrischer Felder \mathbf{E} in x -, y -, bzw. in z -Richtung, d.h. $(\varphi, \vartheta) = (0^\circ, 90^\circ)$, $(\varphi, \vartheta) = (90^\circ, 90^\circ)$, bzw. $(\varphi, \vartheta) = (0^\circ, 0^\circ)$ sind die anomalen Hall-Winkel durch $\alpha^{\text{AHE}}(\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{x}}) = -\sigma_{zx}/\sigma_{xx}$, $\alpha^{\text{AHE}}(\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{y}}) = 0$, bzw. $\alpha^{\text{AHE}}(\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{z}}) = -\sigma_{zx}/\sigma_{zz}$ gegeben. Entsprechend $\sigma^{\text{AHE}}(\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{x}}) = -\sigma_{zx} =: -\sigma_{zx}^{\text{AHE}}$ für $\alpha \in \{x, z\}$ folgt somit für die anomalen Hall-Winkel $\alpha^{\text{AHE}}(\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{x}}) = -\sigma_{zx}/\sigma_{xx} = -\sigma_{zx}^{\text{AHE}}/\sigma_{xx} =: -\alpha_{zx}^{\text{AHE}}$ und $\alpha^{\text{AHE}}(\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{z}}) = -\sigma_{zx}/\sigma_{zz} = -\sigma_{zx}^{\text{AHE}}/\sigma_{zz} = \sigma_{xz}^{\text{AHE}}/\sigma_{zz} =: \alpha_{xz}^{\text{AHE}}$. Insbesondere gilt die Beziehung $\alpha_{xz}^{\text{AHE}} = -\alpha_{zx}^{\text{AHE}}\sigma_{xx}/\sigma_{zz}$. Auf der einen Seite beschreibt der anomale Hall-Winkel α_{xz}^{AHE} die Effizienz, mit der eine longitudinale elektrische Stromdichte parallel zur Co/Cu-Grenzfläche, d.h. in x -Richtung, j_x in die hierzu transversale anomale Hall-Stromdichte senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche, d.h. in z -Richtung, j_z^{AHE} umgewandelt werden kann. Auf der anderen Seite beschreibt der anomale Hall-Winkel α_{zx}^{AHE} die Effizienz der Konversion eines longitudinalen elektrischen Stromdichte senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche, d.h. in z -Richtung, j_z in die hierzu transversale anomale Hall-Stromdichte parallel zur Co/Cu-Grenzfläche, d.h. in x -Richtung, j_x^{AHE} .

3.2.2.1.1.1 Anomaler Hall-Winkel α_{zx}^{AHE}

Die anomalen Hall-Winkel α_{zx}^{AHE} für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten sind in Abb. 3.2.26 dargestellt. Zum Vergleich sind die anomalen Hall-Winkel von fcc-Cu mit Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten und fcc-Co mit Cu-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten eingezeichnet. fcc-Cu mit Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten ist nichtmagnetisch, sodass die anomalen Hall-Winkel in diesen Systemen verschwinden. In den betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten sind die anomalen Hall-Winkel für alle untersuchten Defekte minimal, falls der Defekt in der zentralen Lage der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 = 5$) bzw. der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 = 13$) positioniert ist. Je näher der Defekt den Grenzflächen lokalisiert ist, desto größer wird der anomale Hall-Winkel im Allgemeinen. Ausnahme bilden hierbei Cu-Defekte in der ferromagnetischen Schicht, bei denen der anomale

Hall-Winkel maximal für Defekte in den Lagen $\eta_0 \in \{2, 8\}$ sind. Außerdem erreichen Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Defekten in der nichtmagnetischen Schicht im Allgemeinen größere anomale Hall-Winkel als Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Defekten in der ferromagnetischen Schicht. Ausnahme hierbei bilden Au-Defekte. Die anomalen Hall-Winkel in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) für einen bestimmten Defekt sind im Allgemeinen um ein Größenordnung kleiner als die entsprechenden anomalen Hall-Winkel in fcc-Cu bzw. fcc-Co. Ausnahmen bilden hierbei Bi-Defekte in den Grenzflächenlagen der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, 9\}$), für die der anomale Hall-Winkel annähernd den Wert von fcc-Co(Bi) erreicht.

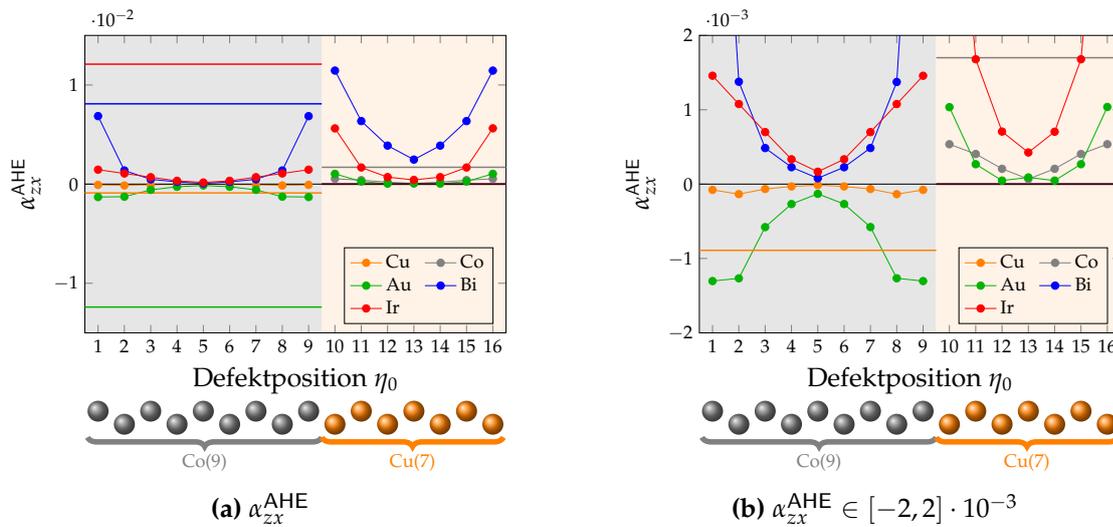


Abbildung 3.2.26.: (a) Anomale Hall-Winkel α_{zx}^{AHE} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 . Zum Vergleich sind die Werte der anomalen Hall-Winkel für Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekte in fcc-Cu und Cu-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in fcc-Co als waagerechte Linien eingezeichnet. In nichtmagnetischen Systemen (fcc-Cu mit Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekte) sind die anomalen Hall-Winkel Null. Zur besseren Darstellung ist in (b) der Bereich auf $\alpha_{zx}^{\text{AHE}} \in [-2, 2] \cdot 10^{-3}$ eingeschränkt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

Vergleich zwischen $\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$ und $\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$

In Abb. 3.2.8 (a) und 3.2.27 (a) sind schematisch Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten dargestellt, wobei in Abb. 3.2.27 (a) die Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) orientiert ist, während in Abb. 3.2.8 (a) die Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) zeigt. Das äußere elektrische Feld $\mathbf{E} = E\widehat{\mathbf{e}}$ sei jeweils in x -Richtung ($\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{x}}$) orientiert, sodass die durch den anomalen Hall-Effekt auftretende anomale Hall-Stromdichte j_{α}^{AHE} in Abb. 3.2.27 (a) senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche

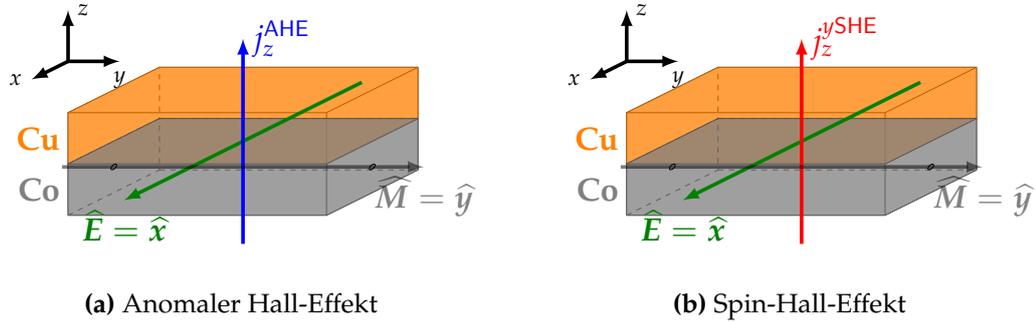


Abbildung 3.2.27.: Schematische Darstellung des (a) anomalen Hall-Effektes und (b) Spin-Hall-Effektes in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) hervorgerufen durch ein äußeres elektrisches Feld E in x -Richtung ($\widehat{E} = \widehat{x}$). Die anomale Hall-Stromdichte j_z^{AHE} in (a) und die Spin-Hall-Stromdichte j_z^{SHE} in (b) sind senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche, d.h. in z -Richtung, orientiert.

($\alpha = z$) und in Abb. 3.2.8 (a) parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\alpha = y$) orientiert ist. Die zu den unterschiedlichen Anordnungen zugehörigen longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} , die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{AHE} und σ_{yx}^{AHE} , und die anomalen Hall-Winkel α_{zx}^{AHE} und α_{yx}^{AHE} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) bzw. mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten sind in Abb. 3.2.30 dargestellt.

Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{xx}

Die Abhängigkeit der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} von der Defektposition η_0 innerhalb einer Schicht sind in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) und in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) ähnlich. So sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} für Defekte in den zentralen Lagen ($\eta_0 = 5$ bzw. $\eta_0 = 13$) maximal und minimal für Defekte in den Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{1, 9\}$ bzw. $\eta_0 \in \{10, 16\}$). Außerdem sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten im Allgemeinen für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) größer als für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$). Die Unterschiede zwischen $\sigma_{xx}(\widehat{M} = \widehat{y})$ und $\sigma_{xx}(\widehat{M} = \widehat{z})$ sind im Allgemeinen für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) größer als für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$). Für Defekte innerhalb der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) sind die Unterschiede zwischen $\sigma_{xx}(\widehat{M} = \widehat{y})$ und $\sigma_{xx}(\widehat{M} = \widehat{z})$ im Allgemeinen am größten, falls der Defekt in der zentralen Lage ($\eta_0 = 5$) positioniert ist und nehmen ab, je näher der Defekt an der Grenzfläche ($\eta_0 \in \{1, 9\}$) positioniert ist.

Außerdem reduziert sich der Einfluss der Magnetisierung von Cu-, über Au-, über Bi-, hin zu Ir-Defekten. Für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) ist die Richtung der Magnetisierung weniger bedeutend. Hier stimmen $\sigma_{xx}(\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}})$ und $\sigma_{xx}(\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}})$ näherungsweise überein. In der nichtmagnetischen Schicht existieren entsprechend Abb. F.2.1 nur kleine magnetische Momente, die durch die angrenzende ferromagnetische Schicht induziert werden. Die Potentialänderung $\Delta\mathcal{U}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0)$ hängt somit in erster Näherung nicht von der Richtung der Magnetisierung ab, sodass die entsprechend Gleichung (2.126) bestimmten Übergangsmatrixelemente und folglich die Relaxationszeiten nach Gleichung (2.139) unabhängig von der Richtung der Magnetisierung sind. Die Ähnlichkeit in der Abhängigkeit der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} von der Defektposition ist auf die Eigenschaften der Quantum-Well-Zustände zurückzuführen. Die quantitativen Unterschiede zwischen $\sigma_{xx}(\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}})$ und $\sigma_{xx}(\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}})$ sind durch die Abhängigkeit der Relaxationszeiten $\tau_{vs}(\mathbf{k})$ von der Magnetisierung \mathbf{M} bedingt.

Anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} und σ_{zx}^{AHE}

Während sich σ_{xx} für $\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$ und $\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$ für einen bestimmten Defekt um Größenordnungen unterscheiden können, sind die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{AHE} und σ_{yx}^{AHE} für einen bestimmten Defekt von ähnlicher Größenordnung. Für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) und für Co-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) stimmen sie im Vorzeichen überein. Auffallend ist, dass die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{AHE} für einen bestimmten Defekt innerhalb einer Schicht gering von der Defektposition abhängen. Für die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} ist besonders für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) eine starke Abhängigkeit zu beobachten. So ist die anomale Hall-Leitfähigkeit unter Verwendung von Gleichung (D.94) durch

$$\sigma_{zx}^{\text{AHE}} \approx \zeta_{\widehat{\sigma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^{\text{F}}} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \sum_{\mathbf{k}'v's'} P_{\mathbf{k}'v's' \rightarrow kvs}^- \tau_{vs}(\mathbf{k}) \tau_{v's'}(\mathbf{k}') v_{vs}^z(\mathbf{k}) v_{v's'}^x(\mathbf{k}') \quad (3.24)$$

näherungsweise gegeben, während σ_{yx}^{AHE} durch Gleichung (3.11) bestimmt wird. Die Quantum-Well-Zustände sowie die Grenzflächenzustände besitzen betragsmäßig große Geschwindigkeitskomponenten parallel zur Co/Cu-Grenzfläche (v^x, v^y), jedoch sehr viel geringere Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche (v^z). Im Gegensatz hierzu besitzen die ausgedehnten Zustände hinreichend große Geschwindigkeitskomponenten sowohl parallel zur Co/Cu-Grenzfläche (v^x, v^y) als auch senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche (v^z).

Wegen Gleichung (3.24) werden die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{AHE} in erster Näherung durch die ausgedehnten Zustände bestimmt. Beiträge der Klassen an Zuständen zu den anomalen Hall-Leitfähigkeiten sind in Abb. J.6.2 dargestellt. Durch die Dominanz der ausgedehnten Zustände hängen die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{AHE}

gering von der Defektposition η_0 ab. Abb. J.6.2 zeigt, dass in realen Systemen insbesondere auch die Quantum-Well-Zustände große Beiträge zu den anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{AHE} besitzen. Der Hintergrund ist, dass ihre Geschwindigkeit in z-Richtung kleiner als die entsprechende der ausgedehnten Zustände ist, dennoch führen die großen Relaxationszeiten dieser Zustände insbesondere für die Quantum-Well-Zustände der ferromagnetischen Schicht für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht bzw. umgekehrt zusammen mit den Geschwindigkeiten in x- und z-Richtung zu signifikanten Beiträgen zur anomalen Hall-Leitfähigkeit.

Während die Graphen $(\eta_0, \sigma_{zx}^{\text{AHE}}(\eta_0))$ und $(\eta_0, \sigma_{yx}^{\text{AHE}}(\eta_0))$ für die anomalen Hall-Leitfähigkeiten stark voneinander abweichen, zeigen sich für die Graphen der anomalen Hall-Winkel $(\eta_0, \alpha_{zx}^{\text{AHE}}(\eta_0))$ und $(\eta_0, \alpha_{yx}^{\text{AHE}}(\eta_0))$ eher geringe Unterschiede. Für beide Richtungen der Magnetisierung sind die anomalen Hall-Winkel maximal, falls die Defekte in den Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{1, 9\}$ bzw. $\eta_0 \in \{10, 16\}$) positioniert sind, und nehmen ab, je näher der Defekt dem Zentrum der entsprechenden Schicht ($\eta_0 = 5$ bzw. $\eta_0 = 13$) kommt. Die Verläufe beider anomalen Hall-Winkel wird hierbei entsprechend $\alpha_{zx}^{\text{AHE}} = \sigma_{zx}^{\text{AHE}}/\sigma_{xx}$ bzw. $\alpha_{yx}^{\text{AHE}} = \sigma_{yx}^{\text{AHE}}/\sigma_{xx}$ im Wesentlichen durch die qualitativ gleichen Abhängigkeiten der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten von der Defektposition bestimmt.

3.2.2.1.1.2 Anomaler Hall-Winkel α_{xz}^{AHE}

Vergleich zwischen Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten und fcc-Co bzw. fcc-Cu

Wie in Abb. 3.2.29 (a) dargestellt, sei nun das äußere elektrische Feld $E = E\hat{E}$ senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{E} = \hat{z}$) orientiert. Die zugehörigen anomalen Hall-Winkel α_{xz}^{AHE} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$) für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte sind in Abb. 3.2.28 dargestellt. Zum Vergleich sind wiederum die anomalen Hall-Winkel von fcc-Cu mit Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten und fcc-Co mit Cu-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten, wobei fcc-Cu(Au), fcc-Cu(Bi), und fcc-Cu(Ir) nichtmagnetisch sind, und der anomale Hall-Winkel somit Null ist. Während die anomalen Hall-Winkel α_{zx}^{AHE} in Abb. 3.2.26 im Allgemeinen um mindestens eine Größenordnung kleiner sind als die anomalen Hall-Winkel von fcc-Cu bzw. fcc-Co, erreichen die anomalen Hall-Winkel σ_{xz}^{AHE} näherungsweise die Werte der Volumensysteme und übersteigen sie sogar wie für Bi-Defekte in den Grenzflächenlagen der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, 9\}$). Wie in Abb. J.6.1 und J.6.2 illustriert, werden sowohl die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{zz} als auch die anomalen Hall-Leitfähigkeiten $\sigma_{xz}^{\text{AHE}} = -\sigma_{zx}^{\text{AHE}}$ im wesentlichen durch die ausgedehnten Zustände bestimmt. Diese sind den Zuständen in Volumensystemen am ähnlichsten, sodass Größen, die von diesen Zuständen dominiert werden, Werte ähnlich denen der Volumensysteme ergeben.

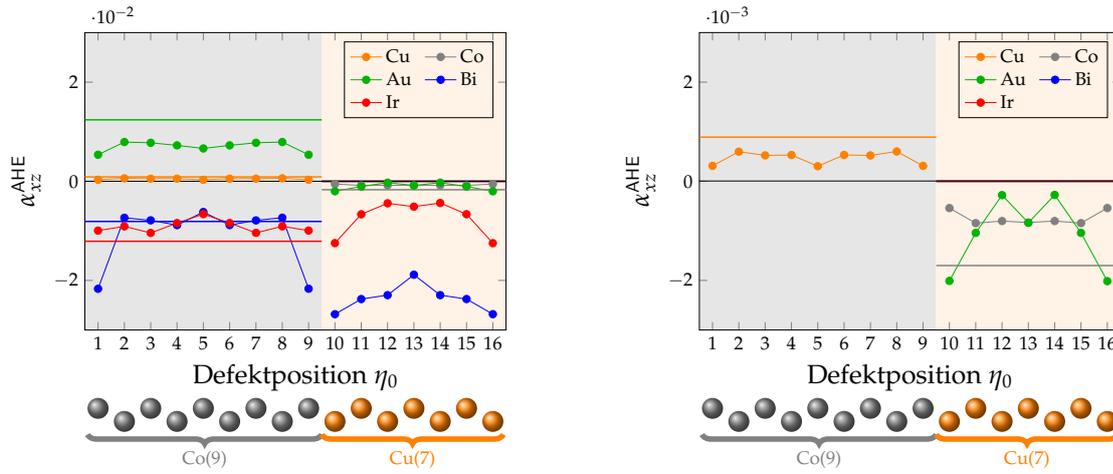


Abbildung 3.2.28.: Anomale Hall-Winkel α_{xz}^{AHE} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 . Zum Vergleich sind die Werte der anomalen Hall-Winkel für Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekte in fcc-Cu und Cu-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in fcc-Co als waagerechte Linien eingezeichnet. Da fcc-Cu lediglich mit Co-Defekten magnetisch sind, ist nur in diesen Systemen der anomale Hall-Winkel von Null verschieden. Zur besseren Darstellung ist die y -Achse rechts auf $\sigma_{xz}^{\text{AHE}} \in [-3, 3] \cdot 10^{-3} \text{ 1}/(\mu\Omega \text{ cm})$ eingeschränkt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1 \text{ at.}\%$.

Vergleich zwischen $\hat{j} = \hat{x}$ und $\hat{j} = \hat{z}$

Im Experiment wird im Allgemeinen nicht das äußere elektrische Feld \vec{E} vorgegeben, sondern die elektrische Stromdichte \vec{j} . In diesem Fall erzeugt eine elektrische Stromdichte $\vec{j} = j\hat{j}$ in x -Richtung ($\hat{j} = \hat{x}$) bzw. in z -Richtung ($\hat{j} = \hat{z}$) eine anomale Hall-Stromdichte in z -Richtung bzw. in x -Richtung in Höhe von

$$j_z^{\text{AHE}}(\vec{j} = j\hat{x}) = \sigma_{zx}^{\text{AHE}} \frac{\sigma_{zz}}{\sigma_{xx}\sigma_{zz} + \sigma_{zx}^2} j \quad \text{bzw.} \quad j_x^{\text{AHE}}(\vec{j} = j\hat{z}) = -\sigma_{xz}^{\text{AHE}} \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}\sigma_{zz} + \sigma_{zx}^2} j, \quad (3.25)$$

sodass $j_x^{\text{AHE}}(\vec{j} = j\hat{z}) = j_z^{\text{AHE}}(\vec{j} = j\hat{x}) \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{zz}}$ wegen $\sigma_{xz}^{\text{AHE}} = -\sigma_{zx}^{\text{AHE}}$ gilt. Wegen $\frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{zz}} \gg 1$ ist bei gleicher betragsmäßiger elektrischer Stromdichte die anomale Hall-Stromdichte in z -Richtung wesentlich größer. Die Anordnung einer elektrischen Stromdichte in z -Richtung und folglich anomale Hall-Stromdichte in x -Richtung ist effizienter als die umgekehrte Anordnung.

Vergleich zwischen ($\vec{M} = \hat{y}, \vec{E} = \hat{z}$) und ($\vec{M} = \hat{z}, \vec{E} = -\hat{y}$)

Betrachtet man nun wie in Abb. 3.2.29 dargestellt einerseits Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$) mit

äußerem elektrischen Feld $E = E\hat{E}$ senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{E} = \hat{z}$) und andererseits Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) mit äußerem elektrischen Feld $E = E\hat{E}$ parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{E} = -\hat{y}$). Somit ist in beiden Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten die anomale Hall-Stromdichte j^{AHE} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{j}^{\text{AHE}} = \hat{x}$). Hierzu sind in Abb. 3.2.31 die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten $\sigma_{zz}(\hat{M} = \hat{y})$ und $\sigma_{yy}(\hat{M} = \hat{z})$, die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{xz}^{AHE} und σ_{xy}^{AHE} , und die anomalen Hall-Winkel α_{xz}^{AHE} und α_{xy}^{AHE} dargestellt.

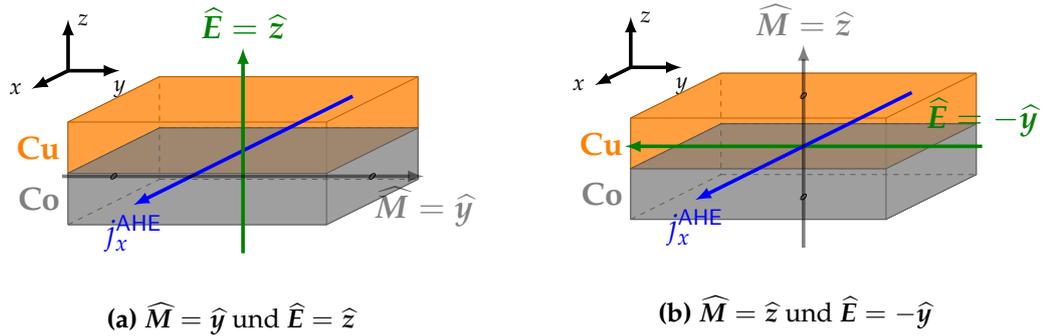


Abbildung 3.2.29.: Schematische Darstellung einer Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschicht mit (a) Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$) und (b) Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$). Das äußere elektrische Feld E sei in (a) in z -Richtung ($\hat{E} = \hat{z}$) orientiert und in (b) in $-y$ -Richtung ($\hat{E} = -\hat{y}$) orientiert. Die anomale Hall-Stromdichte j_x^{AHE} zeigt sowohl in (a) als auch in (b) in x -Richtung.

Der Unterschied der longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{zz} für die zwei Orientierungen der Magnetisierung, d.h. $\hat{M} = \hat{z}$ und $\hat{M} = \hat{y}$ ist eher gering. Insbesondere sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{zz} für Defektpositionen innerhalb einer Schicht annähernd gleich. Ausnahmen bilden z. B. Au-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$). Wesentlich ist für σ_{zz} die Schichtstruktur. Wie Abb. J.6.1 dargestellt, werden die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{zz} im Wesentlichen durch die ausgedehnten Zustände getragen. Da die Tensoren der anomalen Hall-Leitfähigkeiten wegen Gleichung (3.9) antisymmetrisch sind, gelten $\sigma_{xz}^{\text{AHE}} = -\sigma_{zx}^{\text{AHE}}$ und $\sigma_{xy}^{\text{AHE}} = -\sigma_{yx}^{\text{AHE}}$. Somit wird für die Diskussion der anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{AHE} und σ_{xy}^{AHE} auf Abschnitte 3.2.2.1.1.1 und 3.2.1.1.2 verwiesen. Während die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{xy}^{AHE} und σ_{xz}^{AHE} von gleicher Größenordnung sind, sind hingegen die anomalen Hall-Winkel $\alpha_{xz}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{y})$ um mehrere Größenordnungen größer als die anomale Hall-Winkel $\alpha_{xy}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{z})$. Unter Verwendung von $\alpha_{xy}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{y}) = \sigma_{xy}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{z})/\sigma_{yy}(\hat{M} = \hat{z})$ kann der anomale Hall-Winkel $\alpha_{xz}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{y}) = \sigma_{xz}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{y})/\sigma_{zz}(\hat{M} = \hat{y})$ durch $\alpha_{xz}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{y}) = \sigma_{xz}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{y})/\sigma_{xy}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{z})\alpha_{xy}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{y})\sigma_{yy}(\hat{M} = \hat{z})/\sigma_{zz}(\hat{M} = \hat{y})$ dargestellt werden. Unter Berücksichtigung von $\mathcal{O}(\sigma_{xz}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{y})/\sigma_{xy}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{z})) = 1$ ist der Unterschied der anomalen Hall-Winkel in den Größenordnungen darauf zurückzuführen, dass sich

die zu betrachtenden longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten $\sigma_{zz}(\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}})$ und $\sigma_{yy}(\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}})$ sich um mindestens eine Größenordnung unterscheiden. Am größten ist das Verhältnis $\sigma_{yy}(\widehat{\mathbf{M}}=\widehat{\mathbf{z}})/\sigma_{zz}(\widehat{\mathbf{M}}=\widehat{\mathbf{y}})$ für Defekte in den zentralen Lagen, da hierbei durch das Quantum-Confinement bedingt große elektrische Leitfähigkeiten parallel zur Co/Cu-Grenzfläche getragen von den Quantum-Well-Zuständen entstehen. Somit kann der anomale Hall-Winkel, d.h. die Effizienz des anomalen Hall-Effektes, durch die Richtung der Magnetisierung und entsprechender Wahl des äußeren elektrischen Feldes E vergrößert werden. Die Rechnungen zeigen, dass in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche der anomale Hall-Winkel vergrößert werden kann, wenn man die Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ausrichtet und das äußere elektrische Feld bzw. die elektrische Stromdichte statt parallel senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche legt.

3.2.2.1.2 Zusammenfassung

Ähnlich in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) sind auch in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} und σ_{yy} durch die Quantum-Well-Zustände der ferromagnetischen bzw. nichtmagnetischen Schicht bestimmt. Die anomalen Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{AHE} sind auch in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) stark reduziert im Vergleich zu den anomalen Hall-Leitfähigkeiten in fcc-Co bzw. fcc-Cu. Günstig für einen großen anomalen Hall-Winkel α_{zx}^{AHE} sind Defekte an der Co/Cu-Grenzfläche und reduzieren sich umso mehr je näher der Defekt der Schichtmitte ist. Durch die geringere Symmetrie in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) im Vergleich zu Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) gibt es zwei Geometrien für den anomalen Hall-Effekt mit einerseits $\mathbf{E} = E\widehat{x}$ mit j^{AHE} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche mit anomalen Hall-Winkel α_{zx}^{AHE} und andererseits $\mathbf{E} = E\widehat{z}$ mit j^{AHE} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche mit anomalen Hall-Winkel α_{xz}^{AHE} . Wegen $\alpha_{xz}^{\text{AHE}} = \alpha_{zx}^{\text{AHE}} \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{zz}}$ und $\mathcal{O}(\sigma_{xx}/\sigma_{zz}) \gg 1$ erzeugt eine elektrische Stromdichte in z -Richtung eine größere anomale Hall-Stromdichte in x -Richtung als eine betragsgleiche elektrische Stromdichte in x -Richtung eine anomale Hall-Stromdichte in z -Richtung.

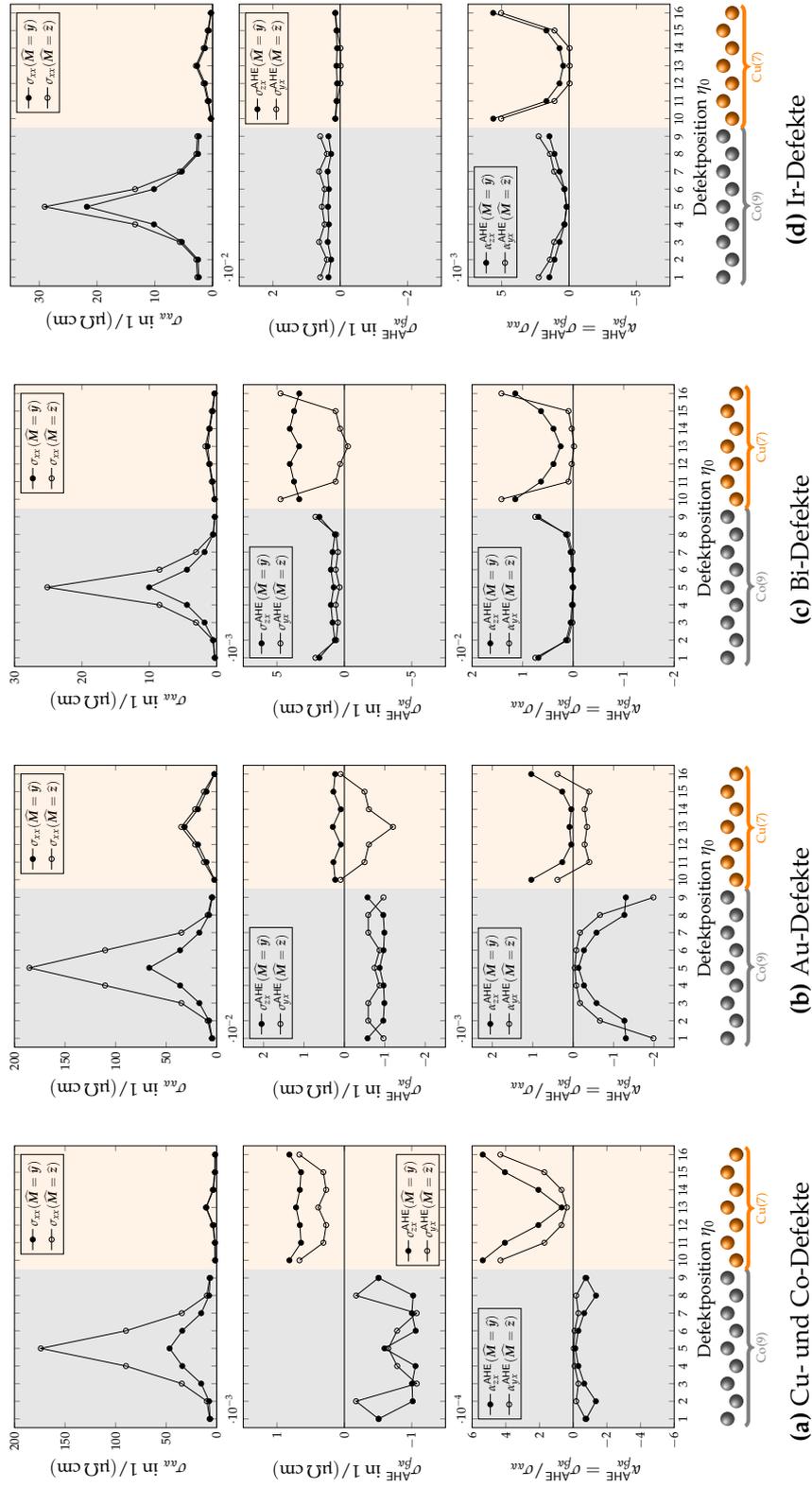


Abbildung 3.2.30.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten $\sigma_{xx}(\hat{M} = \hat{y})$ und $\sigma_{xx}(\hat{M} = \hat{z})$, anomale Hall-Leitfähigkeiten $\sigma_{zx}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{y})$ und $\sigma_{yx}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{z})$, und anomale Hall-Winkel $\alpha_{zx}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{y})$ und $\alpha_{yx}^{\text{AHE}}(\hat{M} = \hat{z})$ von $\text{Co}(9)/\text{Cu}(7)(001)$ -Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu -Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$) bzw. mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu -Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) mit (a) Cu- und Co-Defekten, (b) Au-Defekten, (c) Bi-Defekten, und (d) Ir-Defekten. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

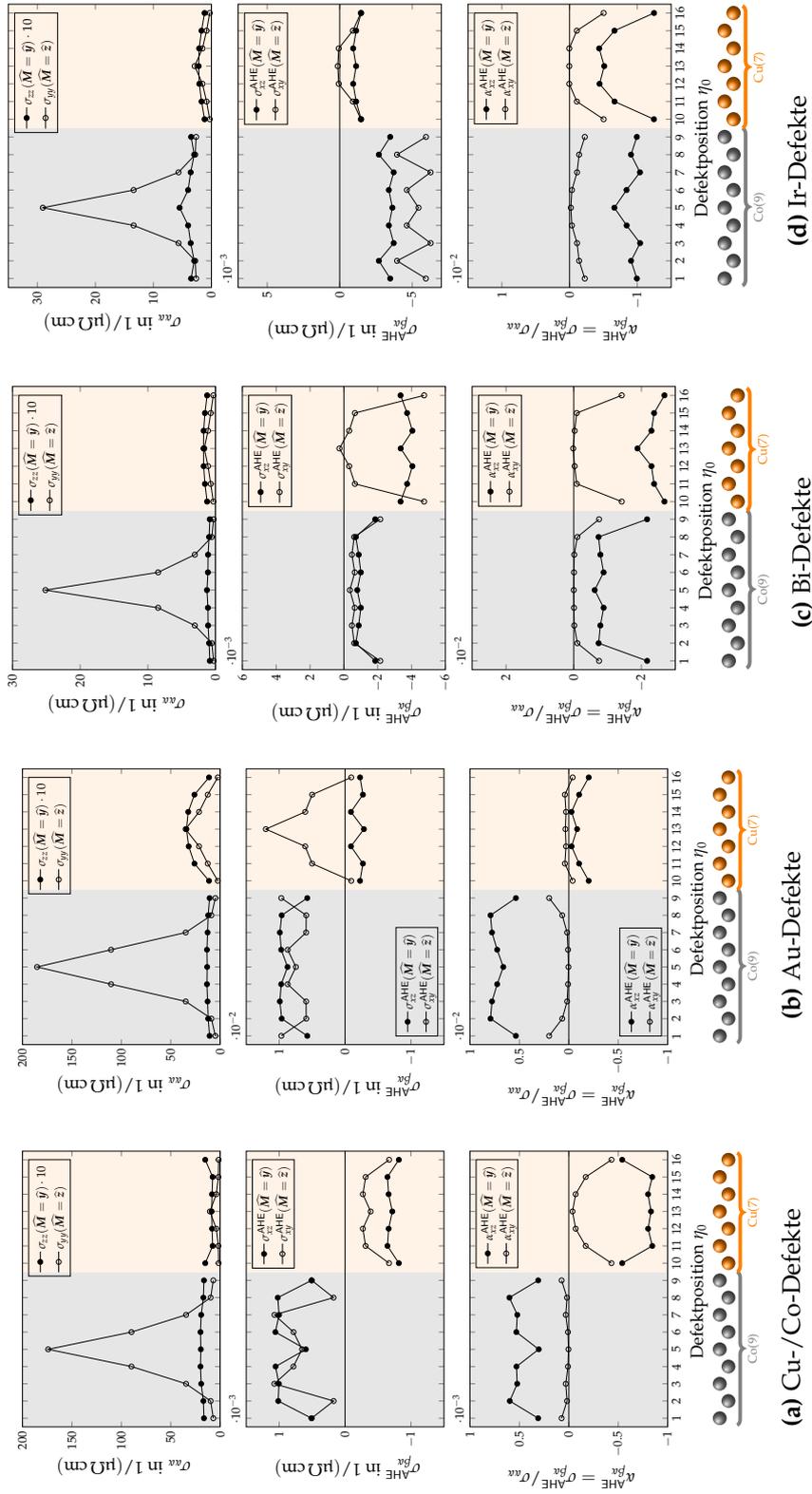


Abbildung 3.2.31.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten $\sigma_{zz}(\widehat{M} = \widehat{y})$, $\sigma_{yy}(\widehat{M} = \widehat{z})$, anomale Hall-Leitfähigkeiten $\sigma_{xz}^{AHE}(\widehat{M} = \widehat{y})$ und $\sigma_{xy}^{AHE}(\widehat{M} = \widehat{z})$ und anomale Hall-Winkel $\alpha_{xz}^{AHE}(\widehat{M} = \widehat{y}) = \sigma_{xz}^{AHE}(\widehat{M} = \widehat{y})/\sigma_{zz}(\widehat{M} = \widehat{y})$ und $\alpha_{xy}^{AHE}(\widehat{M} = \widehat{z}) = \sigma_{xy}^{AHE}(\widehat{M} = \widehat{z})/\sigma_{yy}(\widehat{M} = \widehat{z})$ von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) bzw. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$). (a) Cu- bzw. Co-Defekten, (b) Au-Defekten, (c) Bi-Defekten, und (d) Ir-Defekten jeweils in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 . Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

3.2.2.2. Tensor der Spin-Leitfähigkeit

Tabelle 3.2.2.: Tensoren der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^\gamma$ und Spin-Stromdichten $j^\gamma(E)$ für ein äußeres elektrisches Feld $E = E\hat{E}$ in x -, y -, und z -Richtung von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$) und Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$).

	$\hat{\sigma}^\gamma$	$j^\gamma(E)$ für		
		$E = E\hat{x}$	$E = E\hat{y}$	$E = E\hat{z}$
$\hat{M} = \hat{y}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^y & 0 & -\sigma_{zx}^y \\ 0 & \sigma_{yy}^y & 0 \\ \sigma_{zx}^y & 0 & \sigma_{zz}^y \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^y E \\ 0 \\ \sigma_{zx}^y E \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ \sigma_{yy}^y E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\sigma_{zx}^y E \\ 0 \\ \sigma_{zz}^y E \end{pmatrix}$
$\hat{M} = \hat{z}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^z & -\sigma_{yx}^z & 0 \\ \sigma_{yx}^z & \sigma_{xx}^z & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz}^z \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^z E \\ \sigma_{yx}^z E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\sigma_{yx}^z E \\ \sigma_{xx}^z E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \sigma_{zz}^z E \end{pmatrix}$

Der Tensor der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^y$, d.h. die y -Komponente des Tensors der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^S = (\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y, \hat{\sigma}^z)^T$, besitzt in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$) die Darstellung in Tabelle 3.2.2, während für die Darstellungen der Tensoren der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^x$ und $\hat{\sigma}^z$ auf Referenzen [53, 146] verwiesen wird. Die Tensoren der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^y$ für fcc-Cu mit Spin-Quantisierungsachse und fcc-Co mit Magnetisierung in y -Richtung besitzen ebenfalls die Struktur in Tabelle 3.2.2, wobei $\sigma_{zz}^y = \sigma_{xx}^y$ und $\sigma_{xx}^y \neq \sigma_{yy}^y$ gilt. Für fcc-Cu mit nichtmagnetischen Defekten gilt $\sigma_{xx}^y = \sigma_{yy}^y = \sigma_{zz}^y = 0$.

3.2.2.2.1 Spin-Hall-Winkel $\alpha^{y\text{SHE}}$

Wie bei dem anomalen Hall-Effekt sind in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$) zwei voneinander verschiedene Anordnungen für den Spin-Hall-Effekt möglich. Diese sind in Abb. 3.2.27 (b) und 3.2.32 (a) dargestellt. Für ein äußeres elektrisches Feld E in x -Richtung beschreibt der Spin-Hall-Winkel $\alpha^{y\text{SHE}}(\hat{E} = \hat{x}) = -\sigma_{zx}^y/\sigma_{xx}^y = -\sigma_{zx}^{y\text{SHE}}/\sigma_{xx}^y =: -\alpha_{zx}^{y\text{SHE}}$, wie in Abb. 3.2.27 (b) dargestellt, die Effizienz, mit der eine elektrische Stromdichte in x -Richtung j_x , d.h. parallel zur Co/Cu-Grenzfläche, in eine hierzu transversale Spin-Stromdichte in z -Richtung $j_z^{y\text{SHE}}$, d.h. senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche, transformiert werden kann. Entsprechend Abb. 3.2.32 (a) beschreibt der Spin-Hall-Winkel $\alpha_{xz}^{y\text{SHE}}(\hat{E} = \hat{z}) = -\sigma_{zx}^y/\sigma_{zz}^y = -\sigma_{zx}^{y\text{SHE}}/\sigma_{zz}^y = \sigma_{xz}^{y\text{SHE}}/\sigma_{zz}^y =: \alpha_{xz}^{y\text{SHE}}$, wie eine elektrische Stromdichte in z -Richtung j_z , d.h. senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche, in eine hierzu transversale Spin-Stromdichte in x -Richtung $j_x^{y\text{SHE}}$, d.h. parallel zur Co/Cu-Grenzfläche, umgewandelt werden kann. Ferner gilt

$\alpha_{xz}^{y\text{SHE}} = -\alpha_{zx}^{y\text{SHE}} \sigma_{xx} / \sigma_{zz}$. Für Spin-Hall-Winkel $\alpha^{z\text{SHE}}$ für ein beliebiges äußeres elektrisches Feld E sei auf Gleichung (G.35) unter Berücksichtigung von Tabelle 3.2.2 verwiesen.

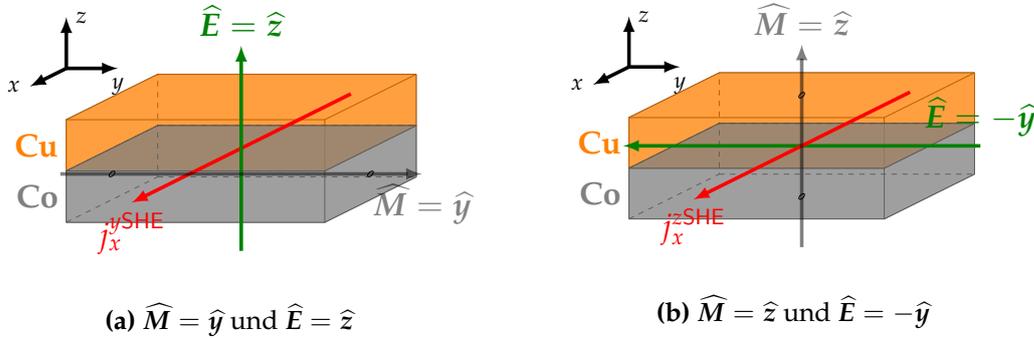


Abbildung 3.2.32.: Schematische Darstellung einer Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschicht mit (a) Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) und (b) Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$). Das äußere elektrische Feld E sei in (a) in z -Richtung ($\widehat{E} = \widehat{z}$) orientiert und in (b) in $-y$ -Richtung ($\widehat{E} = -\widehat{y}$) orientiert. Die Spin-Hall-Stromdichte $j_x^{\gamma\text{SHE}}$ zeigt sowohl in (a) ($\gamma = y$) als auch in (b) ($\gamma = z$) in x -Richtung.

3.2.2.2.1.1 Spin-Hall-Winkel $\alpha_{zx}^{y\text{SHE}}$

Die Spin-Hall-Winkel in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte sind in Abb. 3.2.33 in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 dargestellt. Zusätzlich sind die Spin-Hall-Winkel von fcc-Cu mit Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten und fcc-Co mit Cu-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten als waagerechte Linien eingetragen. Hierbei sind besonders die großen Spin-Hall-Winkel von fcc-Cu(Bi) und fcc-Cu(Ir) mit $\alpha_{zx}^{y\text{SHE}} \approx 0.08$ bzw. mit $\alpha_{zx}^{y\text{SHE}} \approx 0.04$ hervorzuheben. Die Spin-Hall-Winkel in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) beträgt für Defekte in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) $|\alpha_{zx}^{y\text{SHE}}| \leq 0.0025$. Ausnahmen bilden hierbei Bi-Defekte in den Grenzflächenlagen der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) mit einem Spin-Hall-Winkel von etwas mehr als 0.005. Für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) sind die Spin-Hall-Winkel höchstens 0.01. Im Vergleich zu den jeweiligen Volumensystemen sind die Spin-Hall-Winkel in den Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit $X \in \{\text{Cu}, \text{Co}, \text{Au}, \text{Bi}, \text{Ir}\}$ im Allgemeinen um mindestens eine Größenordnung kleiner als die der Volumensysteme fcc-Cu(X) bzw. fcc-Co(X). Die geringen Spin-Hall-Winkel in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten können ähnlich zu den anomalen Hall-Winkeln auf die starke Unterdrückung des *skew scattering*-Beitrages in Systemen mit vielblättrigen Fermi-Flächen [H3] zurückgeführt werden. Die Fermi-Fläche von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung

\vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\vec{M}} = \widehat{\vec{y}}$) besteht, wie in Abschnitt F.3.2.2 dargestellt, aus 29 Blättern ($\nu \in \{139, \dots, 167\}$), während die Fermi-Flächen von fcc-Cu einblättrig ($\nu \in \{11\}$) und von fcc-Co vierblättrig ($\nu \in \{8, 9, 10, 11\}$) sind. Diese sind in Abb. F.3.1 dargestellt.

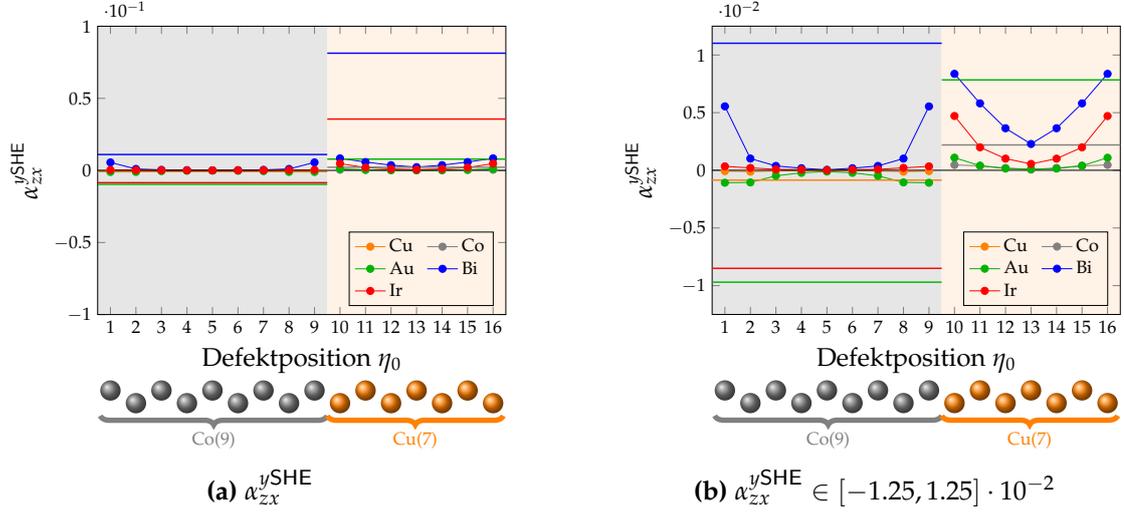


Abbildung 3.2.33.: (a) Spin-Hall-Winkel α_{zx}^{ySHE} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\vec{M}} = \widehat{\vec{y}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 . Zum Vergleich sind die Werte der Spin-Hall-Winkel für Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekte in fcc-Cu und Cu-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in fcc-Co als waagerechte Linien eingezeichnet. Zur besseren Darstellung ist in (b) der Bereich auf $\alpha_{zx}^{ySHE} \in [-1.25, 1.25] \cdot 10^{-2}$ eingeschränkt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.-%.

Vergleich zwischen anomalen Hall-Winkeln und Spin-Hall-Winkeln

In Abb. 3.2.34 sind sowohl die Spin-Hall-Winkel als auch die anomalen Hall-Winkel von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\vec{M}} = \widehat{\vec{y}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 dargestellt. Im Allgemeinen sind die Spin-Hall-Winkel am größten für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Defekte in den Grenzflächenlagen sowohl der ferromagnetischen als auch der nichtmagnetischen Schicht. Ähnliches Verhalten zeigte sich bereits auch bei den anomalen Hall-Winkel α_{zx}^{AHE} und ist wegen $\alpha_{zx}^{ySHE} = \sigma_{zx}^{ySHE} / \sigma_{xx}$ bzw. $\alpha_{zx}^{AHE} = \sigma_{zx}^{AHE} / \sigma_{xx}$ einerseits auf die ähnlichen Werte der Spin-Hall-Leitfähigkeiten und anomalen Hall-Leitfähigkeiten in Abb. J.6.3 und andererseits auf die geringen longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{xx} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Defekte in den Grenzflächenlagen zurückzuführen. Entsprechend können die Diskussionen über die anomalen Hall-Winkel unmittelbar auf die Spin-Hall-Winkel übertragen werden.

3.2. Transporteigenschaften von Co/Cu-Vielgeschichten

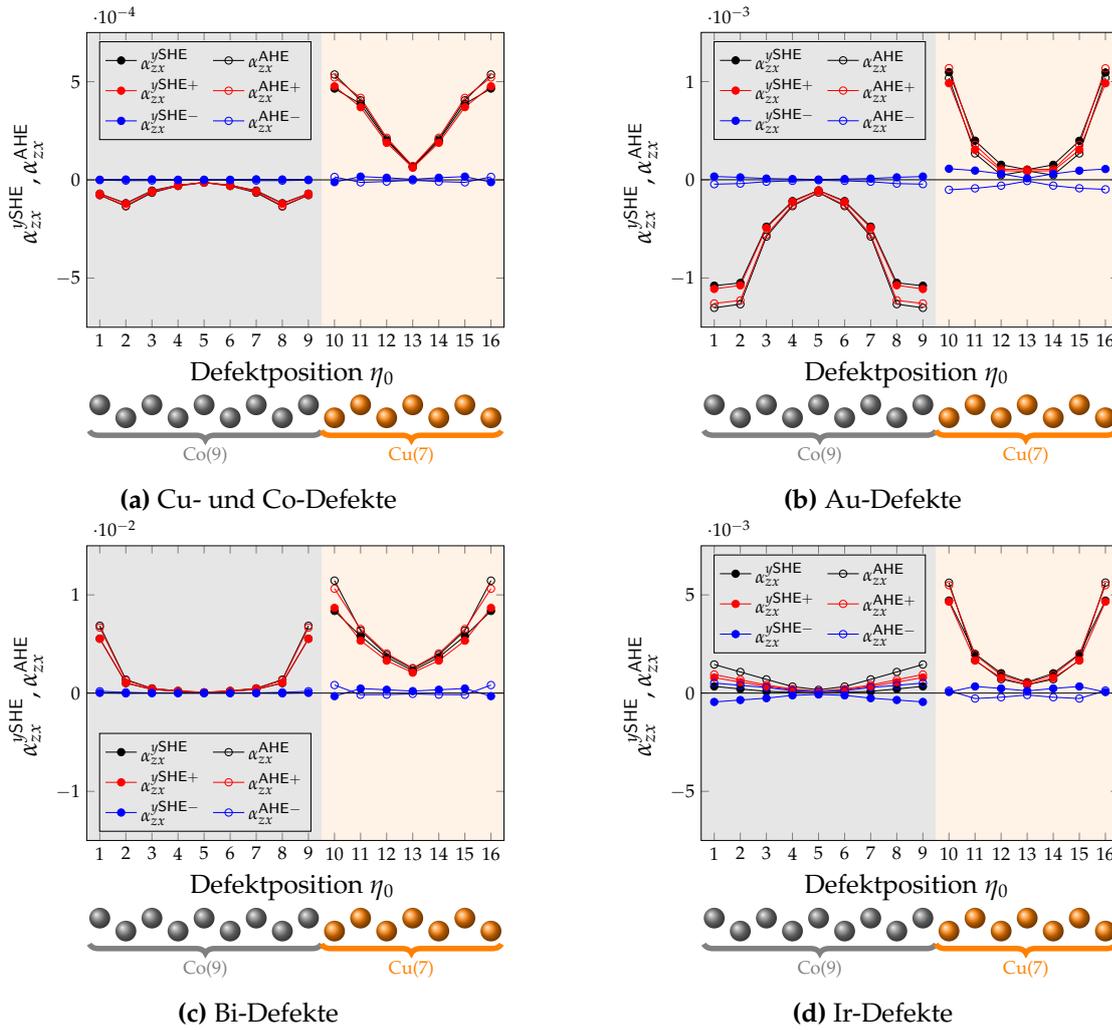


Abbildung 3.2.34.: Spin-Hall-Winkel $\alpha_{zx}^{ySHE} = \sigma_{zx}^{ySHE} / \sigma_{xx}$ und anomale Hall-Winkel $\alpha_{zx}^{AHE} = \sigma_{zx}^{AHE} / \sigma_{xx}$ von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielgeschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$) mit (a) Cu- bzw. Co-Defekten, (b) Au-Defekten, (c) Bi-Defekten, und (d) Ir-Defekten jeweils in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 . Zusätzlich sind sowohl für den Spin-Hall-Winkel als auch für den anomalen Hall-Winkel die Beiträge der Majoritätselektronen ($\alpha_{zx}^{ySHE+} = \sigma_{zx}^{ySHE+} / \sigma_{xx}$, $\alpha_{zx}^{AHE+} = \sigma_{zx}^{AHE+} / \sigma_{xx}$) und der Minoritätselektronen ($\alpha_{zx}^{ySHE-} = \sigma_{zx}^{ySHE-} / \sigma_{xx}$, $\alpha_{zx}^{AHE-} = \sigma_{zx}^{AHE-} / \sigma_{xx}$) eingetragen. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

In Abb. 3.2.34 sind die Spin-Hall-Winkel und die anomalen Hall-Winkel zusammen mit den jeweiligen Beiträgen der Majoritäts- und Minoritätselektronen dargestellt. Für die Mehrheit der Zustände auf der Fermi-Fläche gilt $|S_{vs}^y(\mathbf{k})| \approx 1$ wie in Abschnitt F.5 diskutiert. Aus Gleichung (B.5) folgen nun zusammen mit $\alpha_{zx}^{ySHE\pm} = \sigma_{zx}^{ySHE\pm} / \sigma_{xx}$ und

$\alpha_{zx}^{\text{AHE}} = \sigma_{zx}^{\text{AHE}\pm} / \sigma_{xx}$ für die Beiträge der Majoritäts- und Minoritätselektronen zum Spin-Hall-Winkel und anomalen Hall-Winkel

$$\alpha_{zx}^{y\text{SHE}+}(\eta_0) \approx \alpha_{zx}^{\text{AHE}+}(\eta_0) \quad \text{bzw.} \quad \alpha_{zx}^{y\text{SHE}-}(\eta_0) \approx -\alpha_{zx}^{\text{AHE}-}(\eta_0). \quad (3.26)$$

Die Beziehungen in Gleichung (3.26) spiegeln sich in den numerischen Rechnungen in Abb. 3.2.34 wider. Da in der Mehrheit der betrachteten Systeme die Majoritätselektronen sowohl die Spin-Hall-Winkel als auch die anomalen Hall-Winkel dominieren, besitzen die Spin-Hall-Winkel ähnliche Abhängigkeiten vom Defektyp X und von der Defektposition η_0 wie die anomale Hall-Winkel. Entsprechend können Aussagen für die anomalen Hall-Winkel auf die Spin-Hall-Winkel übertragen werden. Für die in Abb. 3.2.8 (b) und 3.2.27 (b) dargestellten Geometrien sind die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten $\sigma_{xx}(\widehat{M} = \widehat{y})$ und $\sigma_{xx}(\widehat{M} = \widehat{z})$, die Spin-Hall-Leitfähigkeiten $\sigma_{zx}^{y\text{SHE}}(\widehat{M} = \widehat{y})$ und $\sigma_{yx}^{z\text{SHE}}(\widehat{M} = \widehat{z})$, und die Spin-Hall-Winkel $\alpha_{zx}^{y\text{SHE}}(\widehat{M} = \widehat{y})$ und $\alpha_{yx}^{z\text{SHE}}(\widehat{M} = \widehat{z})$ in Abb. 3.2.36 dargestellt. Auch hier können die Aussagen für die anomalen Hall-Leitfähigkeiten und anomalen Hall-Winkel auf die Spin-Hall-Leitfähigkeiten und Spin-Hall-Winkel übertragen werden, sodass hier auf eine detaillierte Darstellung verzichtet wird.

3.2.2.2.1.2 Spin-Hall-Winkel $\alpha_{xz}^{y\text{SHE}}$

Die zur Anordnung in Abb. 3.2.29 (a) zugehörigen Spin-Hall-Winkel als Funktion der Defektposition η_0 von Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) sind in Abb. 3.2.35 zusammen mit den entsprechenden Spin-Hall-Winkeln von fcc-Cu und fcc-Co mit Spin-Quantisierungsachse bzw. Magnetisierung in y -Richtung dargestellt.

Aufgrund der kubischen Symmetrie der Volumensysteme gilt $\sigma_{zz} = \sigma_{xx}$, sodass für diese $\alpha_{xz}^{y\text{SHE}} = -\alpha_{zx}^{y\text{SHE}}$ gilt. Entsprechend sind auch hier die großen Spin-Hall-Winkel von fcc-Cu(Bi) und fcc-Cu(Ir) mit ungefähr -0.08 und -0.04 zu beobachten. Für die Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten gilt im Allgemeinen $\sigma_{xx}/\sigma_{zz} \gg 1$, sodass die Spin-Hall-Winkel $\alpha_{xz}^{y\text{SHE}}$ im Allgemeinen betragsmäßig größer sind als die Spin-Hall-Winkel $\alpha_{zx}^{y\text{SHE}}$ aus Abb. 3.2.33. So erreichen die Spin-Hall-Winkel in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Au-Defekten in der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) annähernd die Spin-Hall-Winkel des Systems fcc-Co(Au) mit 0.01 . Die Spin-Hall-Stromdichten in z - bzw. in x -Richtung sind entsprechend Gleichung (3.25) gegeben, wobei hier die anomalen Hall-Leitfähigkeiten durch die entsprechenden Spin-Hall-Leitfähigkeiten zu ersetzen sind. Wie beim anomalen Hall-Effekt kann bei gleicher elektrischer Stromdichte in z - bzw. in x -Richtung eine größere Spin-Hall-Stromdichte in x -Richtung als in z -Richtung erzeugt werden.

Ähnlich zur anomalen Hall-Stromdichte kann die Spin-Hall-Stromdichte parallel zur Co/Cu-Grenzfläche vergrößert werden, falls die Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche statt senkrecht zu dieser orientiert ist. Hierbei ist das äußere elektrische Feld E bzw. die elektrische Stromdichte j senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche orientiert. Die zu

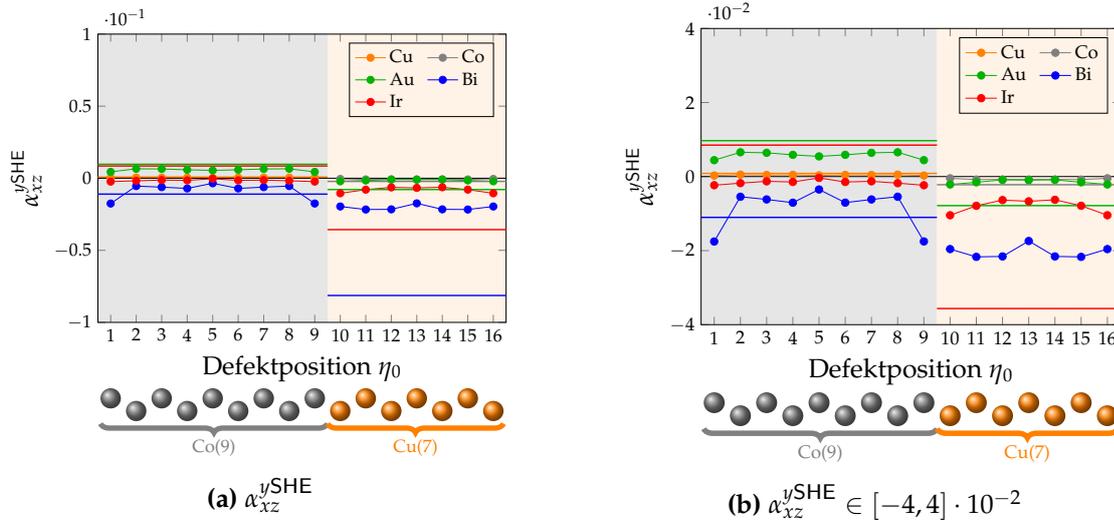


Abbildung 3.2.35.: (a) Spin-Hall-Winkel $\alpha_{xz}^{y\text{SHE}}$ von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 . Zum Vergleich sind die Werte der Spin-Hall-Winkel für Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekte in fcc-Cu und Cu-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten in fcc-Co als waagerechte Linien eingezeichnet. Zur besseren Darstellung ist in (b) der Bereich auf $\alpha_{xz}^{y\text{SHE}} \in [-4, 4] \cdot 10^{-2}$ eingeschränkt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

Abb. 3.2.31 entsprechenden Abbildungen für die Spin-Hall-Winkel, die näherungsweise dem Verhältnis zwischen Spin-Hall-Stromdichte und elektrischer Stromdichte entsprechen, sind in Abb. 3.2.37 präsentiert. Die Spin-Hall-Winkel $\alpha_{xz}^{y\text{SHE}}$ sind im Allgemeinen signifikant größer als die Spin-Hall-Winkel $\alpha_{xy}^{z\text{SHE}}$. Wie bei den anomalen Hall-Winkeln in Abb. 3.2.31 ist dieses darauf zurückzuführen, dass sich die longitudinalen elektrischen Leitfähigkeiten $\sigma_{zz}(\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}})$ und $\sigma_{yy}(\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}) = \sigma_{xx}(\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}})$ um Größenordnungen unterscheiden.

3.2.2.2.2 Zusammenfassung

Wie in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) gilt auch in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) für die Komponente des Spin-Erwartungswertes parallel zur Magnetisierung, d.h. $S_{vs}^y(\mathbf{k}) = \mathbf{S}_{vs}(\mathbf{k}) \cdot \widehat{\mathbf{M}}$, näherungsweise $|S_{vs}^y(\mathbf{k})| \approx 1$ in Einheiten von $\frac{\hbar}{2}$. Somit gilt auch hier $\sigma_{zx}^{y\text{SHE}\pm} \approx \pm \sigma_{zx}^{\text{AHE}\pm}$. Entsprechend übertragen sich die Beobachtungen von den anomalen Hall-Winkeln auf die Spin-Hall-Winkel. Im Vergleich zwischen Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) mit Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) zeigt sich, dass in erste-

ren mit $E = E\hat{z}$ und im zweiten mit $E = E\hat{z}$ eine Spin-Hall-Stromdichte in x -Richtung erzeugt werden kann, wobei in der Konfiguration $(\hat{M} = \hat{y}, E = E\hat{z})$ im Allgemeinen größere Spin-Hall-Stromdichten als in der Konfiguration $(\hat{M} = \hat{z}, E = -E\hat{y})$ generieren kann.

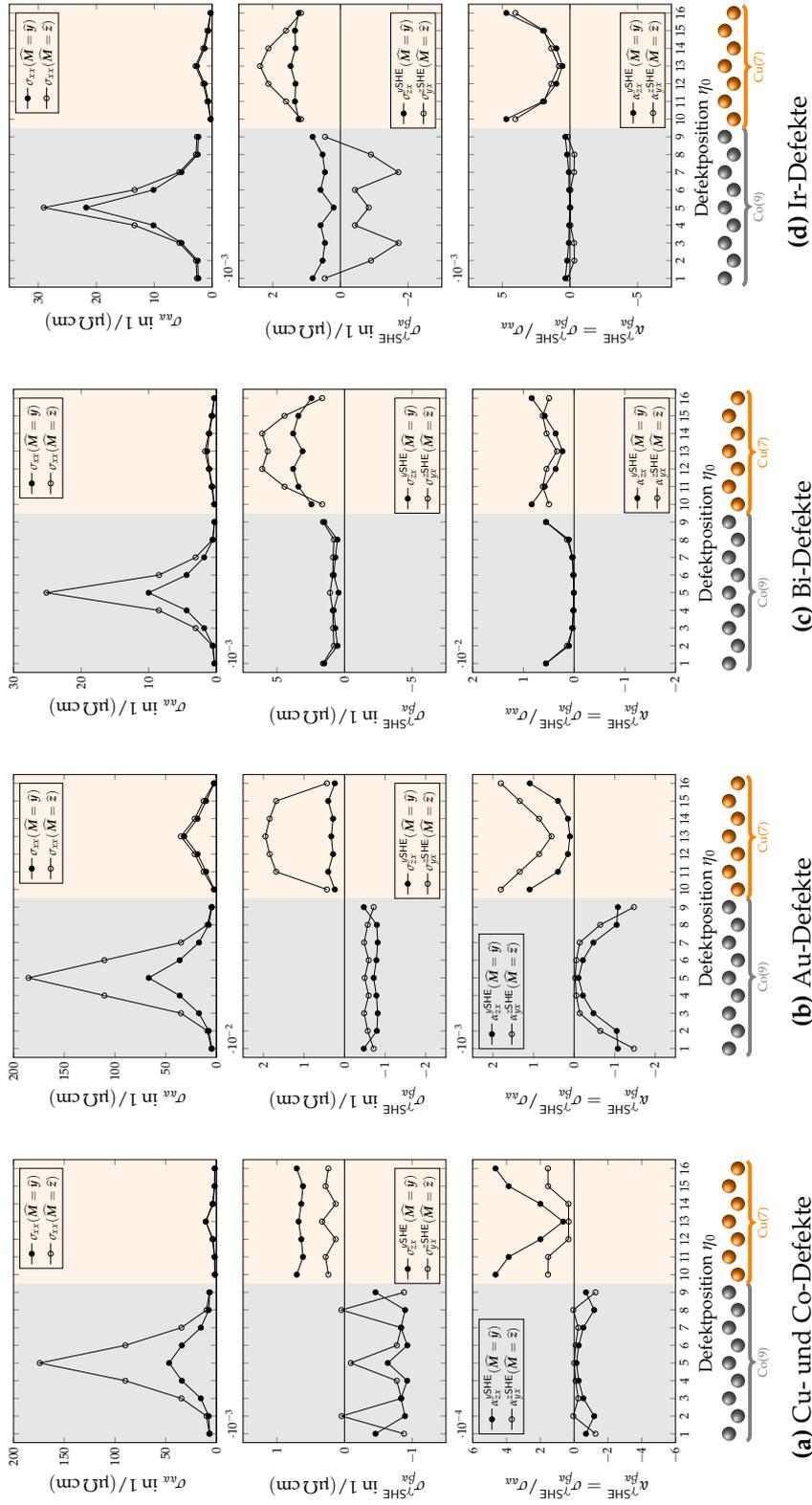


Abbildung 3.2.36.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten $\sigma_{xx}(\hat{M} = \hat{y})$ und $\sigma_{xx}(\hat{M} = \hat{z})$, Spin-Hall-Leitfähigkeiten $\sigma_{yx}^{\text{SHE}}(\hat{M} = \hat{y})$ und $\sigma_{yx}^{\text{SHE}}(\hat{M} = \hat{z})$, und Spin-Hall-Winkel $\alpha_{yx}^{\text{SHE}}(\hat{M} = \hat{y})$ und $\alpha_{yx}^{\text{SHE}}(\hat{M} = \hat{z})$ von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$) bzw. mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) mit (a) Cu- und Co-Defekten, (b) Au-Defekten, (c) Bi-Defekten, und (d) Ir-Defekten. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

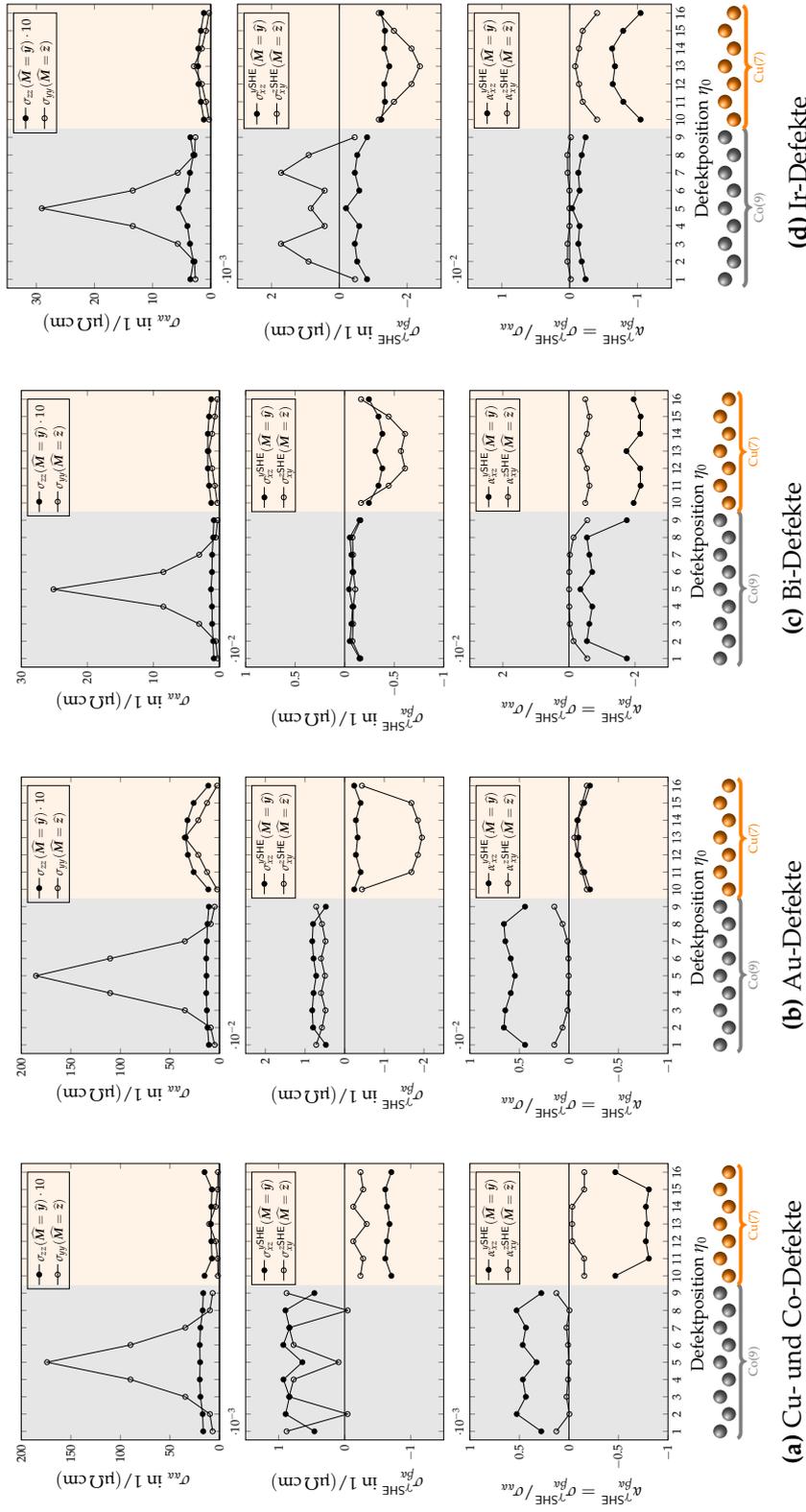


Abbildung 3.2.37.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten $\sigma_{xx}(\hat{M} = \hat{y})$ und $\sigma_{yy}(\hat{M} = \hat{z})$, Spin-Hall-Leitfähigkeiten $\sigma_{xz}^{\text{SHE}}(\hat{M} = \hat{y})$ und $\sigma_{xy}^{\text{SHE}}(\hat{M} = \hat{z})$ und Spin-Hall-Winkel $\alpha_{xz}^{\text{SHE}}(\hat{M} = \hat{y})$ und $\alpha_{xy}^{\text{SHE}}(\hat{M} = \hat{z})$ von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$) bzw. mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) mit (a) Cu- und Co-Defekten, (b) Au-Defekten, (c) Bi-Defekten, und (d) Ir-Defekten. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

3.2.2.3. Edelstein-Tensor

Der Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) in Tabelle 3.2.3 besitzt mit χ_{xy} , χ_{yx} , χ_{yz} , und χ_{zy} im Allgemeinen vier von Null verschiedene und voneinander unabhängige Tensorelemente. Für den Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) gilt Gleichung (3.18) entsprechend Anhang E.1. Wie in Abb. I.7.3 dargestellt, weichen einige Tensorelemente von dieser Beziehung ab. Dies ist wie beim Edelstein-Tensor in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$) auf numerische Instabilitäten zurückzuführen (siehe hierzu Anhang I). Aus diesem Grund verwendet man Gleichung (3.18) und definiert den symmetrisierten Tensor $\hat{\chi}^{\text{SYM}}$ über Gleichung (3.19). Somit erfüllt $\hat{\chi}^{\text{SYM}}$ per Definition die Punktsymmetrie bzgl. der zentralen Lage der ferromagnetischen und bzgl. der zentralen Lage der nichtmagnetischen Schicht, d.h. $\hat{\chi}^{\text{SYM}}(\eta_0) = -\hat{\chi}^{\text{SYM}}(-\eta_0)$. Die Tensoren $\hat{\chi}$ und $\hat{\chi}^{\text{SYM}}$ von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, bzw. Ir-Defekten sind in Abb. I.7.3 dargestellt. Im folgenden werden stets die symmetrisierten Tensoren $\hat{\chi}^{\text{SYM}}$ verwendet, wobei auf den Index SYM verzichtet wird.

3.2.2.3.1 Transversale Edelstein-Effekte $\chi^{\text{T}1}$ und $\chi^{\text{T}2}$

3.2.2.3.1.1 Transversale Edelstein-Effekte χ_{xy} und χ_{zy}

Für ein äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ in y -Richtung ($\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{y}}$), d.h. parallel zur Co/Cu-Grenzfläche und parallel zur Magnetisierung \mathbf{M} besitzt entsprechend Tabelle 3.2.3 die induzierte Spin-Dichte $\mathbf{s}(\mathbf{E})$ eine von Null verschiedene Komponente sowohl in x -Richtung, d.h. parallel zur Co/Cu-Grenzfläche und senkrecht zum äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} bzw. zur Magnetisierung \mathbf{M} mit $s_x(\mathbf{E}) = \chi_{xy}E$ als auch in z -Richtung, d.h. sowohl senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche als auch senkrecht zum äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} bzw. zur Magnetisierung \mathbf{M} mit $s_z(\mathbf{E}) = \chi_{zy}E$. Die entsprechende Geometrie ist in Abb. 3.2.38 (a) dargestellt.

Die Edelstein-Tensorelemente χ_{xy} und χ_{zy} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) für die untersuchten Defekte (Cu, Co, Au, Bi, Ir) sind in Abb. 3.2.39 dargestellt. Zunächst fällt auf, dass die Edelstein-Tensorelemente χ_{xy} mit $\mathcal{O}(\chi_{xy}) = 10^{-9} \text{ 1/(V/cm)}$ im Allgemeinen um drei Größenordnungen größer sind als die Edelstein-Tensorelemente χ_{zy} mit $\mathcal{O}(\chi_{zy}) = 10^{-12} \text{ 1/(V/cm)}$. Durch die Vielfachschichtstruktur, insbesondere durch die Co/Cu-Grenzfläche, hängt der Edelstein-Effekt im besonderen Maße von der Defektposition innerhalb der Vielfachschicht ab. Es zeigt sich, dass für alle untersuchten Defekte der Edelstein-Effekt χ_{xy} für Defekte in der ferromagnetischen Schicht um eine Größenordnung größer ist als für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht. Die größten Werte für alle untersuchten Defekte werden für die Defektpositionen $\eta_0 \in \{4, 6\}$ erreicht⁴.

⁴Für Cu-Defekte sind die betragsmäßig größten Werte für $\eta_0 \in \{3, 7\}$ zu beobachten, jedoch sind diese

Tabelle 3.2.3.: Edelstein-Tensoren $\hat{\chi}$ und induzierte Spin-Dichten $s(\mathbf{E})$ für ein äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ in x -, y -, und z -Richtung von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) und Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$).

		$s(\mathbf{E})$ für $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ mit			
		$\hat{\chi}$	$\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{x}}$	$\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{y}}$	$\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{z}}$
$\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$		$\begin{pmatrix} 0 & \chi_{xy} & 0 \\ \chi_{yx} & 0 & \chi_{yz} \\ 0 & \chi_{zy} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ \chi_{yx}E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \chi_{xy}E \\ 0 \\ \chi_{zy}E \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ \chi_{yz}E \\ 0 \end{pmatrix}$
$\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$		$\begin{pmatrix} \chi_{xx} & -\chi_{yx} & 0 \\ \chi_{yx} & \chi_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \chi_{xx}E \\ \chi_{yx}E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\chi_{yx}E \\ \chi_{xx}E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \chi_{zz}E \end{pmatrix}$

Für Defekte in der Umgebung der Co/Cu-Grenzfläche ($\eta_0 \in \{1, 2, 8, 9\}$) innerhalb der Co-Schicht sind die Werte um eine Größenordnung kleiner als der Maximalwert und somit in der Größenordnung des Edelstein-Effekts für Defekte in der Cu-Schicht. Konkret werden für Cu- und Au-Defekte in der ferromagnetischen Schicht die betragsmäßig größten Werte für das Tensorelement χ_{xy} erreicht. Insbesondere beobachtet man, dass für Defekte in den der Nähe der zentralen Lage der ferromagnetischen Schicht größere Werte für χ_{xy} erreicht werden als für Defekte in der Nähe der Co/Cu-Grenzfläche.

Orientierung der Spin-Dichten

Wegen $s(\mathbf{E}) \cdot \hat{\mathbf{E}} = 0$ sind die induzierten Spin-Dichten stets senkrecht zum äußeren elektrischen Feld $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ mit $\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{y}}$ und somit ausschließlich in der xz -Ebene orientiert. Für die Orientierung der Spin-Dichte innerhalb der xz -Ebene wurde der Winkel $\sphericalangle(s(\mathbf{E}), \hat{\mathbf{x}})$ zwischen induzierter Spin-Dichte $s(\mathbf{E})$ und der x -Richtung über

$$\sphericalangle(s(\mathbf{E}), \hat{\mathbf{x}}) = \arccos\left(\frac{s(\mathbf{E}) \cdot \hat{\mathbf{x}}}{s(\mathbf{E})}\right) = \arccos\left(\frac{\chi_{xy}}{\sqrt{\chi_{xy}^2 + \chi_{zy}^2}}\right) \quad (3.27)$$

bestimmt. Für die untersuchten Defekte sind diese Winkel in Abb. 3.2.39 (c) dargestellt. Mit wenigen Ausnahmen gilt $\sphericalangle(s(\mathbf{E}), \hat{\mathbf{x}}) \approx 0^\circ$ bzw. $\sphericalangle(s(\mathbf{E}), \hat{\mathbf{x}}) \approx 180^\circ$, sodass $s(\mathbf{E})$ fast nahezu vollständig in x -Richtung zeigt. Hierbei bestimmt das Vorzeichen von χ_{xy} , ob $s(\mathbf{E})$ in positive ($\chi_{xy} > 0$) oder in negative x -Richtung ($\chi_{xy} < 0$) orientiert ist. Für die meisten untersuchten Systeme gilt $|\chi_{xy}| \gg |\chi_{zy}|$ sodass näherungsweise $\sphericalangle(s(\mathbf{E}), \hat{\mathbf{x}}) \approx \arccos(\text{sgn}(\chi_{xy}))$ gilt. Für $\text{sgn}(\chi_{xy}) = +1$ folgt somit $\sphericalangle(s(\mathbf{E}), \hat{\mathbf{x}}) \approx 0^\circ$, während für $\text{sgn}(\chi_{xy}) = -1$ entsprechend $\sphericalangle(s(\mathbf{E}), \hat{\mathbf{x}}) \approx 180^\circ$ gilt.

nur geringfügig größer als die Werte für Defektpositionen $\eta_0 \in \{4, 6\}$.

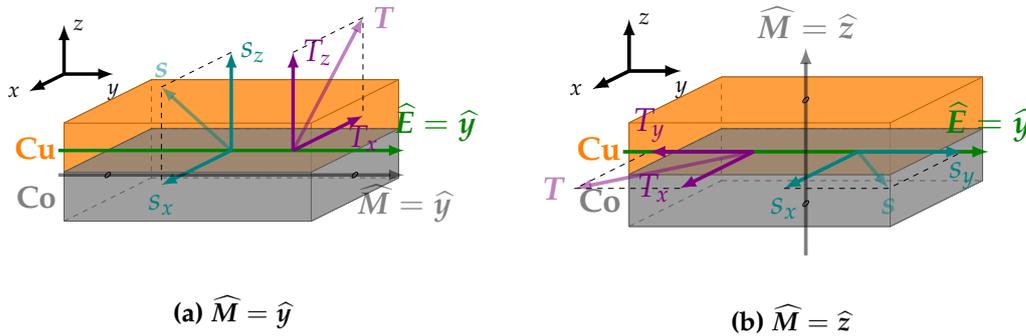


Abbildung 3.2.38.: Co(9)/Cu(7)(001)-Vieltschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} (a) parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$) und (b) senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$). Das äußere elektrische Feld \mathbf{E} sei sowohl in (a) als auch in (b) in y -Richtung ($\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{y}}$) orientiert. Zusätzlich sind die induzierten Spin-Dichte entsprechend Tabelle 3.2.3 und die Spin-Orbit-Torque entsprechend Tabelle 3.2.4 in (a) und (b) eingezeichnet.

Vergleich zwischen $\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$ und $\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$

Abschließend soll hier noch der Einfluss der Richtung der Magnetisierung auf die in x -Richtung induzierte Spin-Dichte betrachtet werden. Das äußere elektrische Feld \mathbf{E} sei weiterhin in y -Richtung orientiert. Entsprechend Tabelle 3.2.3 gilt $\chi_{xy} \neq 0$ sowohl für Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) als auch für Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$). In beiden Fällen besitzen die durch ein äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ in y -Richtung ($\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{y}}$) induzierten Spin-Dichten $\mathbf{s}(\mathbf{E})$ eine von Null verschiedene Komponente in x -Richtung ($s_x(\mathbf{E}) = \chi_{xy}E$). Für die untersuchten Defekte sind die Tensorelemente χ_{xy} sowohl für Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$) als auch für Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) in Abb. 3.2.44 dargestellt. Für alle untersuchten Defekte ist χ_{xy} sowohl für Defekte innerhalb der ferromagnetischen Schicht als auch für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht in Co(9)/Cu(7)(001)-Vieltschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) um eine Größenordnung größer als in Co(9)/Cu(7)(001)-Vieltschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$). Die durch ein äußeres elektrisches Feld \mathbf{E} in y -Richtung induzierte Spin-Dichte in x -Richtung ist größer, wenn die Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche statt senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche orientiert ist.

Exemplarisch werden hierzu Bi-Defekte betrachtet für Position $\eta_0 = 6$ innerhalb der ferromagnetischen Schicht und für Position $\eta_0 = 11$ innerhalb der nichtmagnetischen Schicht. Die Beiträge der individuellen Lagen zum Edelstein-Tensorelement χ_{xy} sind für Bi-Defekte in Positionen $\eta_0 = 6$ und $\eta_0 = 11$ in Abb. 3.2.40 dargestellt. Neben den integralen Werten χ_{xy}^η sind zusätzlich die symmetrischen Beiträge $\chi_{xy}^{\eta+}$ und die antisymmetrischen Beiträge $\chi_{xy}^{\eta-}$ dargestellt. Insbesondere der symmetrische Beitrag

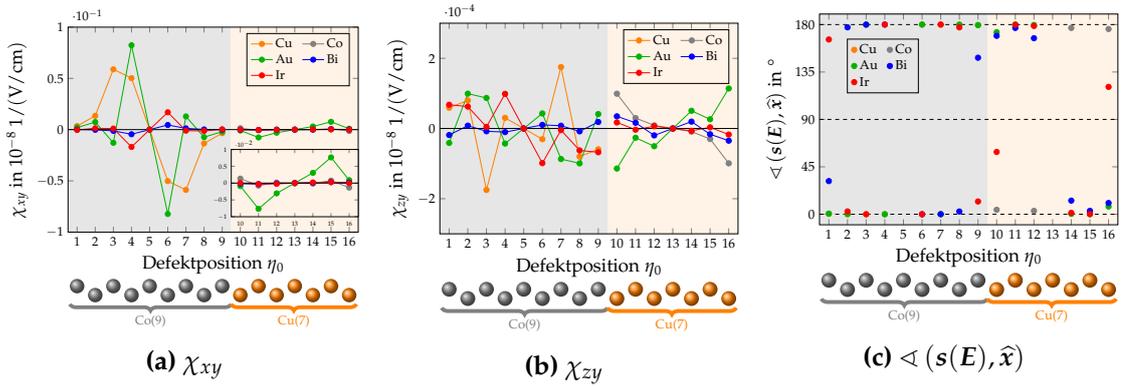


Abbildung 3.2.39.: Transversaler Edelstein-Effekt **(a)** χ_{xy} und **(b)** χ_{zy} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten. Man beachte die unterschiedlichen Größenordnungen von χ_{xy} und χ_{zy} mit $\mathcal{O}(\chi_{xy}) = 10^{-9} \text{ 1/(V/cm)}$ und $\mathcal{O}(\chi_{zy}) = 10^{-12} \text{ 1/(V/cm)}$. **(c)** Winkel $\angle(s(E), \hat{x})$ zwischen der induzierten Spin-Dichte $s(E) = (\chi_{xy}E, 0, \chi_{zy}E)^T$ und der x -Richtung für ein äußeres elektrisches Feld $E = E\widehat{E}$ in y -Richtung ($\widehat{E} = \widehat{y}$) in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$). Für $\eta_0 \in \{5, 13\}$ besitzen die Co/Cu-Vielfachschichten weiterhin Rauminversionssymmetrie, sodass keine Spin-Dichte durch den Edelstein-Effekt induziert wird. Mit wenigen Ausnahmen ist die induzierte Spin-Dichte $s(E)$ nahezu vollständig in positive x -Richtung ($\angle(s(E), \hat{x}) = 0^\circ$) bzw. in negative x -Richtung ($\angle(s(E), \hat{x}) = 180^\circ$) orientiert. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1 \text{ at.}\%$.

bestimmt wegen $\chi_{xy}(\eta_0) = \sum_{\eta} \chi_{xy}^{\eta}(\eta_0) = \sum_{\eta} \chi_{xy}^{\eta+}(\eta_0)$ den integralen Werte alleine.

Sowohl die lagen aufgelösten Beiträge χ_{xy}^{η} als auch die antisymmetrischen Beiträge $\chi_{xy}^{\eta-}$ sind für die Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) und für die Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) von ähnlicher Größenordnung. Im Allgemeinen sind die Beiträge χ_{xy}^{η} für $\widehat{M} = \widehat{z}$ größer als die entsprechenden Beiträge für $\widehat{M} = \widehat{y}$. Dass die integralen Werte χ_{xy} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) größer sind als in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) liegt daran, dass ausschließlich der symmetrische Beitrag $\chi_{xy}^{\eta+}$ den integralen Wert bestimmt. Diese sind in Systemen mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche annähernd eine Größenordnung größer als in Systemen mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche. In ungestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten gilt entsprechend Gleichung (E.9) $\chi_{xy}^{\eta} = -\chi_{xy}^{-\eta}$ bzw. $\chi_{yx}^{\eta+} = 0$. Durch den Defekt hingegen wird die Rauminversionssymmetrie im Allgemeinen aufgehoben, sodass $\chi_{xy}^{\eta} \neq -\chi_{xy}^{-\eta}$ bzw. $\chi_{xy}^{\eta+} \neq 0$. Entsprechend beschreibt der symmetrische Beitrag

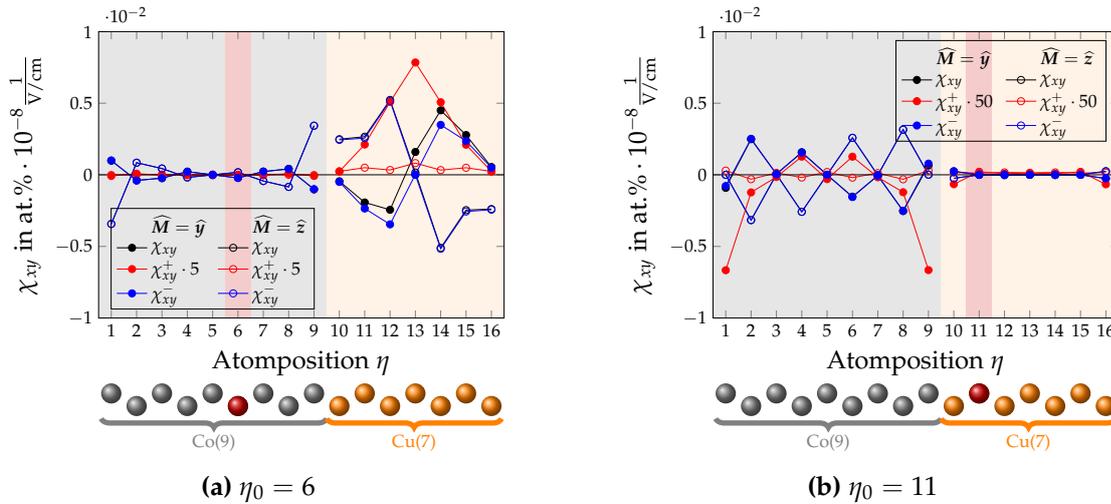


Abbildung 3.2.40.: Beiträge der einzelnen Lagen zum Edelstein-Tensorelement χ_{xy} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten für Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) bzw. für Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) für Bi-Defekte an Position (a) $\eta_0 = 6$ und (b) $\eta_0 = 11$. Zusätzlich sind die symmetrischen und antisymmetrischen Beiträge $\chi_{xy}^{\eta+}$ bzw. $\chi_{xy}^{\eta-}$ dargestellt. Hierbei beachte man, dass die symmetrische Beiträge für Defektposition $\eta_0 = 6$ zur besseren Darstellung fünfmal so groß und für Defektposition $\eta_0 = 11$ fünfzigmal so groß dargestellt sind. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

die Asymmetrie in den lokal induzierten Spin-Dichten s_x^{η} und $s_x^{-\eta}$. Unter Umständen wird durch die geringere Symmetrie in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) im Vergleich zu Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) die Asymmetrie zwischen η und $-\eta$ verstärkt und ermöglicht so im Allgemeinen größere Werte für den Edelstein-Tensor $\widehat{\chi}$.

3.2.2.3.1.2 Transversale Edelstein-Effekte χ_{yx} und χ_{yz}

Vergleich zwischen Gleichgewichtsmagnetisierungsdichte $\overset{\circ}{m}$ und Nichtgleichgewichtsmagnetisierungsdichte $m(j)$

Entsprechend Tabelle 3.2.3 induziert sowohl ein äußeres elektrisches Feld $\vec{E} = E\widehat{E}$ in x -Richtung ($\widehat{E} = \widehat{x}$) als auch ein äußeres elektrisches Feld $\vec{E} = E\widehat{E}$ in z -Richtung ($\widehat{E} = \widehat{z}$) eine Spin-Dichte in y -Richtung, d.h. in Richtung der Magnetisierung \vec{M} . Im ersten Fall bestimmt das Tensorelement χ_{yx} die Größe der induzierten Spin-Dichte $s_y(\vec{E}) = \chi_{yx}E$, während im zweiten Fall die Spin-Dichte $s_y(\vec{E})$ durch das Tensorelement χ_{yz} quantifiziert wird. Die Tensorelemente χ_{yx} und χ_{yz} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) sind für die untersuchten Defekte

(Cu, Co, Au, Bi, Ir) in Abb. 3.2.41 dargestellt. Da die magnetischen Momente im Gleichgewicht $\overset{\circ}{m}$ und die induzierten magnetischen Momente $m(E)$, die über Gleichung (2.154) mit der induzierten Spin-Dichte $s(E)$ zusammenhängen, beide in y -Richtung orientiert sind, ist die Größenordnung der induzierten magnetischen Momente von besonderem Interesse. In Abhängigkeit von der elektrischen Stromdichte j stellen sich die induzierte Spin-Dichte $s(j)$ und das induzierte magnetische Moment durch Gleichung (2.157) dar. Um die Größenordnung des induzierten magnetischen Momentes $m(j)$ zu bestimmen wird eine elektrische Stromdichte j mit $j = 10^7 \text{ A/cm}^2$ betrachtet. Unter Verwendung von $\mathcal{O}(\hat{\chi}) = 10^{-8} \frac{\text{h}/2}{\text{V/cm}}$ und $\mathcal{O}(\hat{\sigma}) = 1 \frac{1}{\mu\Omega\text{cm}} \Rightarrow \mathcal{O}(\hat{\sigma}^{-1}) = 1 \mu\Omega\text{cm}$ gilt somit $\mathcal{O}(m(j)) = 10^{-7} \mu_B$. Die magnetischen Momente im Gleichgewicht $\overset{\circ}{m}$ sind innerhalb der ferromagnetischen Schicht von der Größenordnung $\mathcal{O}(\overset{\circ}{m}_y) = 1 \mu_B$ und innerhalb der nichtmagnetischen Schicht von der Größenordnung $\mathcal{O}(\overset{\circ}{m}_y) \in [10^{-4} \mu_B, 10^{-2} \mu_B]$ gemäß Abb. F.2.1. Somit sind die durch den Edelstein-Effekt induzierten magnetischen Momente $m(j)$ bei einer typischen Stromdichte j mit $j = 10^7 \text{ A/cm}^2$ um drei bis sieben Größenordnungen kleiner als die magnetischen Momente im Gleichgewicht.

Unter den untersuchten Defekten werden die größten Werte von χ_{yx} jeweils in der ferromagnetischen und in der nichtmagnetischen Schicht für Au-Defekte erreicht, wobei die Werte für Au-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht im Mittel dreimal so groß sind wie für Au-Defekte in der ferromagnetischen Schicht. Für Cu-, Au-, und Ir-Defekte in der ferromagnetischen Schicht sind die Tensorelemente χ_{yx} von ähnlicher Größe, während die Werte für Bi-Defekte in der ferromagnetischen Schicht im Allgemeinen um eine Größenordnung kleiner sind. Jedoch zeigt der Graph $(\eta_0, \chi_{yx}(\eta_0))$ für alle Defekte eine ähnliche Abhängigkeit von der Defektposition in der ferromagnetischen Schicht. So ist der Graph $(\eta_0, \chi_{yx}(\eta_0))$ punktsymmetrisch zur zentralen Lage der ferromagnetischen Schicht und insbesondere verschwindet χ_{yx} für Defekte in der zentralen Lage der ferromagnetischen Schicht, da für Defekte in dieser Position die Rauminversionssymmetrie bestehen bleibt. Während betragsmäßig große Werte für Defekte für die Positionen $\eta_0 \in \{3, 7\}$ ⁵, sind die Tensorelemente χ_{yx} betragsmäßig am kleinsten für Defekte in den Grenzflächenlagen der Co-Schicht ($\eta_0 \in \{1, 9\}$) und ihren angrenzenden Lagen ($\eta_0 \in \{2, 8\}$). Für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht sind auch hier für alle untersuchten Defekte wiederum die Graphen $(\eta_0, \chi_{yx}(\eta_0))$ punktsymmetrisch zur zentralen Lage der Cu-Schicht ($\eta_0 = 13$). Da Defekte in der zentralen Lage die Rauminversionssymmetrie nicht aufheben, verschwindet in diesen Fällen der Edelstein-Effekt χ_{yx} . Der Verlauf der Graphen $(\eta_0, \chi_{yx}(\eta_0))$ ist für alle untersuchten Defekte gleich. Die betragsmäßig größten Werte werden für die Lagen $\eta_0 \in \{12, 14\}$ erreicht, und verringern sich je näher der Defekt an der Co/Cu-Grenzfläche lokalisiert ist, und sind folglich betragsmäßig am kleinsten für Defekte in den Cu-Grenzflächenlagen ($\eta_0 \in \{10, 16\}$). Auch wenn der Verlauf der Graphen $(\eta_0, \chi_{yx}(\eta_0))$ für alle untersuchten Defekte gleich ist, fallen insbesondere Au-Defekte auf. Während die Werte von χ_{yx} für Co-, Bi-, und Ir-Defekte von ähnlicher Größe sind, sind die entsprechenden Werte für Au-Defekte im Vergleich um eine Größenordnung größer.

⁵Für Bi-Defekte werden die betragsmäßig größten Werte für Defektpositionen $\eta_0 \in \{4, 6\}$ erreicht, jedoch

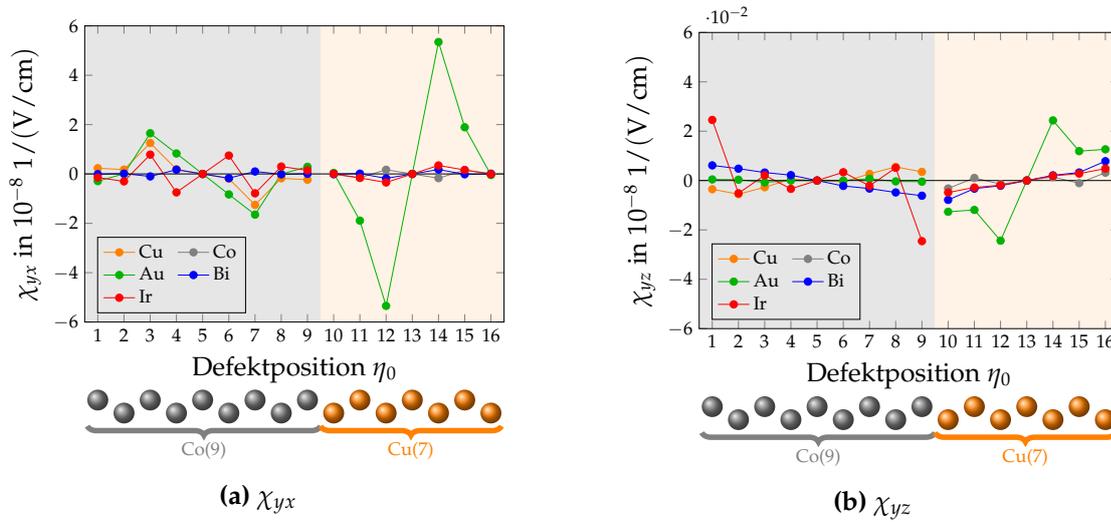


Abbildung 3.2.41.: Edelstein-Tensorelemente **(a)** χ_{yx} und **(b)** χ_{yz} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte. Man beachte, dass sich die Werte für das Tensorelement χ_{yx} im Allgemeinen um zwei Größenordnungen größer sind als die Werte für das Tensorelement χ_{yz} . Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

Durch ein äußeres elektrisches Feld \mathbf{E} in z -Richtung lässt sich über das vermittelnde Tensorelement χ_{yz} ebenfalls eine Spin-Dichte in Richtung der Magnetisierung \mathbf{M} mit $\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$ induzieren. Beim Vergleich der Werte für χ_{yx} und χ_{yz} zeigt sich unmittelbar, dass die Werte für χ_{yz} im Mittel um zwei Größenordnungen kleiner als die Werte für χ_{yx} sind. Um eine große Spin-Dichte in Richtung der Magnetisierung zu erzeugen, ist es somit günstiger, dass äußere elektrische Feld \mathbf{E} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche d.h. in x -Richtung statt senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche, d.h. in z -Richtung zu orientieren. Für Bi- und Ir-Defekte in der ferromagnetischen als auch für Cu-, Bi-, und Ir-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht sind die Graphen $(\eta_0, \chi_{yz}(\eta_0))$ punktsymmetrisch zur zentralen Lage der jeweiligen Schicht. Für diese Defekte steigt der Graph $(\eta_0, |\chi_{yx}(\eta_0)|)$ ausgehend von der zentralen Lage hin zu den Grenzflächenlagen monoton an, sodass die betragsmäßig größten Werte für Defekte in den Grenzflächenlagen erreicht werden. Bei Cu-Defekten wird das Maximum von $|\chi_{yx}|$ bereits für die Defektpositionen $\eta_0 \in \{2, 8\}$ erreicht. Hierbei kann χ_{yx} selbst monoton ansteigen z. B. für Cu- und Bi-Defekte in der ferromagnetischen Schicht und Bi- und Ir-Defekte in der nichtmagnetischen Schicht, oder χ_{yx} ist alternierend im Vorzeichen wie bei Ir-Defekten in der ferromagnetischen Schicht.

sind diese Werte nur unwesentlich größer als jene für die Defektpositionen $\eta_0 \in \{3, 7\}$.

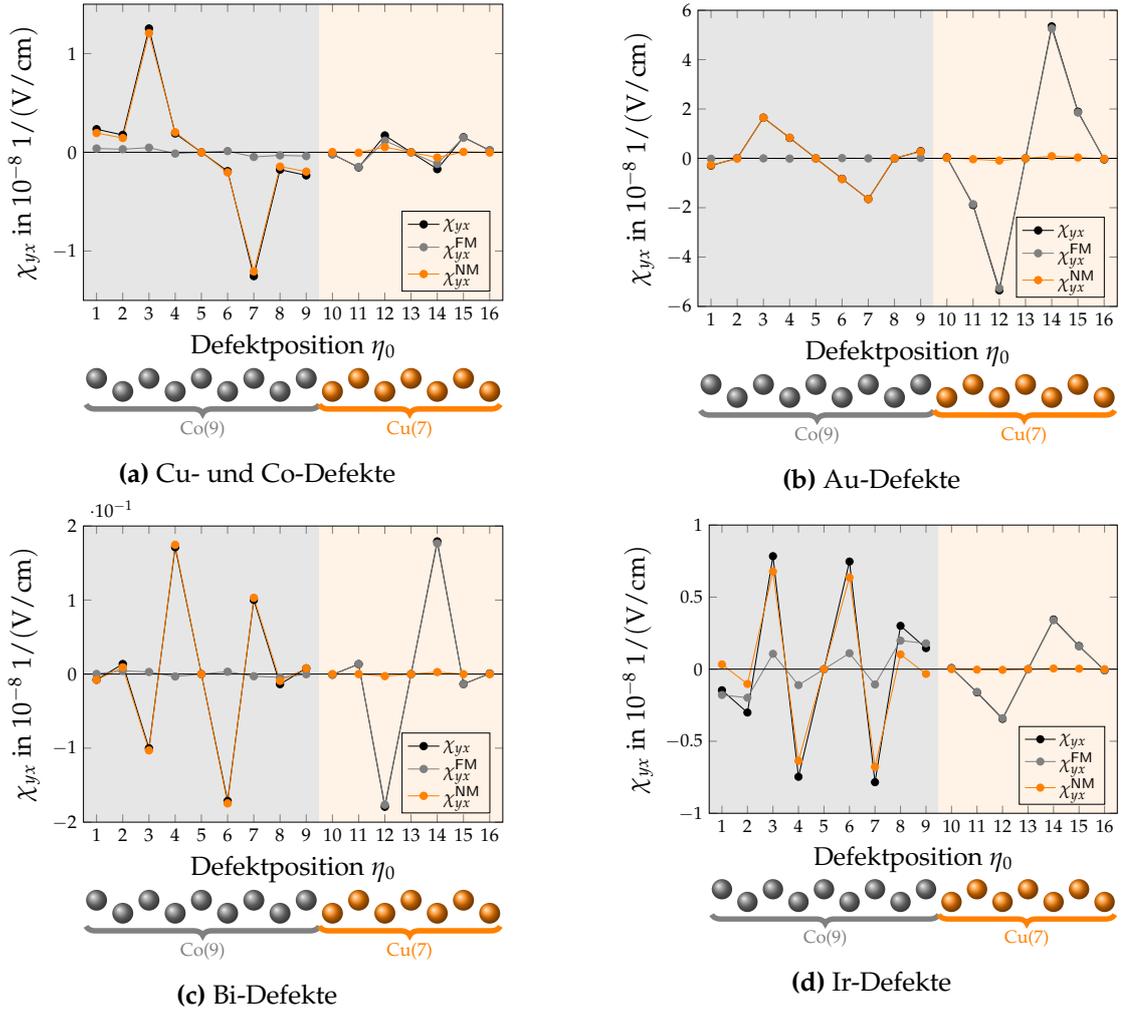


Abbildung 3.2.42.: Transversaler Edelstein-Effekt χ_{yx} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte. Zusätzlich sind die Beiträge der ferromagnetischen Schicht χ_{yx}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht χ_{yx}^{NM} entsprechend Gleichung (J.2) dargestellt. Hierbei gilt $\chi_{yx}(\eta_0) = \chi_{yx}^{\text{FM}}(\eta_0) + \chi_{yx}^{\text{NM}}(\eta_0)$. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

Vergleich der verschiedenen Defekte

Wie in Abb. 3.2.39 (a) dargestellt und in Abschnitt 3.2.2.3.1.1 diskutiert, ist die induzierte Spin-Dichte in x -Richtung $s_x(E) = \chi_{xy}E$ für alle untersuchten Defekte um eine Größenordnung größer, wenn Defekte in der ferromagnetischen Schicht positioniert sind ($\max_{\eta_0 \in \text{FM}} |\chi_{xy}(\eta_0)| \gg \max_{\eta_0 \in \text{NM}} |\chi_{xy}(\eta_0)|$). Für das Tensorelement χ_{yx} hingegen zeigt sich diesbezüglich kein einheitliches Bild unter den untersuchten Defekten. Für

Au-Defekte werden größere Beiträge erreicht, falls der Defekt in der nichtmagnetischen Schicht positioniert ist, während für Ir-Defekte sich ein entgegengesetztes Bild zeigt. Hier werden im Mittel größere Werte für Defekte in der nichtmagnetischen Schicht erreicht. Für Bi-Defekte lassen sich sowohl innerhalb der ferromagnetischen Schicht als auch innerhalb der nichtmagnetischen Schicht annähernd gleich große Werte erreichen ($\max_{\eta_0 \in \text{FM}} |\chi_{yx}(\eta_0)| \approx \max_{\eta_0 \in \text{NM}} |\chi_{yx}(\eta_0)|$). Im Allgemeinen ist χ_{yx} für Defekte in den inneren Lagen der Schichten größer als für Defekte in den Grenzflächenlagen. Die betragsmäßig kleinsten Werte werden für Defekte in den Grenzflächenlagen angenommen, d.h. $\arg \min_{\eta_0 \in \text{FM}} |\chi_{yx}(\eta_0)| \in \{1, 9\}$ bzw. $\arg \min_{\eta_0 \in \text{NM}} |\chi_{yx}(\eta_0)| \in \{10, 16\}$ ⁶. Ob Defekte in der ferromagnetischen oder in der nichtmagnetischen Schicht für eine durch ein äußeres elektrisches Feld E in x -Richtung induzierte Spin-Dichte $s_y(E)$ günstig sind, hängt somit von den individuellen Eigenschaften des Defektes ab. Für die untersuchten Defekte ist die Spin-Dichte im Allgemeinen größer, wenn Defekte im Inneren der Schichten positioniert sind als in der Nähe der Co/Cu-Grenzfläche. Ob Defekte in der ferromagnetischen oder in der nichtmagnetischen Schicht einen großen transversalen Edelstein-Effekt χ_{yx} hängt wesentlich vom jeweiligen Defekt ab. Einheitlicher zeigt sich hingegen das Bild, wenn man die Beiträge der ferromagnetischen und der nichtmagnetischen Schicht betrachtet. Diese entsprechenden Beiträge der ferromagnetischen Schicht und der nichtmagnetischen Schicht sind ebenfalls in Abb. 3.2.42 dargestellt. So gilt für alle untersuchten Defekte in guter Näherung

$$\chi_{yx}(\eta_0) \approx \begin{cases} \chi_{yx}^{\text{NM}}(\eta_0) & \text{für } \eta_0 \in \text{FM} \\ \chi_{yx}^{\text{FM}}(\eta_0) & \text{für } \eta_0 \in \text{NM} \end{cases} \quad (3.28)$$

wobei sich die größten Abweichungen bei Ir-Defekten in der Co-Schicht zeigen. Dennoch gilt auch hier weiterhin $|\chi_{yx}^{\text{NM}}(\eta_0)| \gg |\chi_{yx}^{\text{FM}}(\eta_0)|$.

Vergleich mit Literatur

Anstelle von ferromagnetisch/nichtmagnetischen-Schichten bestimmten Fabian *et al.* 2021 die Spin-Akkumulation in nichtmagnetischen metallischen dünnen Schichten (Cu, Ag, Au, Ta, Pd, Pt, U) verschiedener Dicke (3, 7, 9, 11 Monolagen) unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes [193]. Sowohl das elektrische Feld als auch die Spin-Quantisierungsachse sind hierbei parallel zur Metall/Vakuum-Grenzfläche orientiert. Fabian *et al.* bestimmten die Ergebnisse einerseits unter Verwendung einer Nichtgleichgewichts-Greenschen Funktionsmethode (Keldysh-Formalismus) und andererseits unter Verwendung der semiklassischen Boltzmann-Gleichung. Die an den Enden der metallischen Schicht induzierten magnetischen Momente unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes reichten von $10^{-6} \mu_B$ für Cu bis hin zu $10^{-4} \mu_B$ für U [193]. Fabian *et al.* verglichen die Verhältnisse zwischen der Spin-Akkumulation

⁶Hierbei kennzeichnet $\arg \min$ das Argument des Minimums. Sei z. B. $A = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)\}$ mit $(x_1, y_1) = (1, 2)$, $(x_2, y_2) = (-3, 10)$, $(x_3, y_3) = (4, -9)$, dann ist $\min_i |y_i| = 2$ und somit ist $\arg \min_i |y_i| = 1$.

und der elektrischen Stromdichte mit den intrinsischen Spin-Hall-Winkeln und attribuierten die berechneten Spin-Akkumulation weniger als Folge des Edelstein-Effektes, sondern als Folge des Spin-Hall-Effekts in metallischen Schichten [193]. Interessanterweise entspricht die Formel zur Bestimmung der Spin-Akkumulation in Referenz [193] formal dem Ausdruck für den Edelstein-Tensor in Gleichung (2.152). Die von Fabian *et al.* betrachteten Systeme besitzen, wie die in dieser Arbeit untersuchten Co/Cu-Vielfachschichten mit Defekten in den zentralen Lagen der Co- bzw. Cu-Schicht, Raum-inversionssymmetrie. Entsprechend verschwindet der Edelstein-Effekt über die gesamte Probe. Lokal hingegen können sich trotz vorhandener Raum-inversionssymmetrie Spin-Dichten ausbilden, wobei diese für Positionen \mathbf{r} und $-\mathbf{r}$ den gleichen Betrag, aber unterschiedliches Vorzeichen haben. Lokal werden in den hier betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) vom Edelstein-Effekt induzierte magnetische Momente der Größenordnung $10^{-7} \mu_B$ für eine typische elektrische Stromdichte der Größenordnung 10^7 A/cm^2 [193] beobachtet. Somit ist diese von ähnlicher Größenordnung wie die von Fabian *et al.* bestimmten für Cu als vergleichbares leichtes Element. Ob die induzierten magnetischen Momente entweder durch den Edelstein-Effekt oder durch den Spin-Hall-Effekt hervorgerufen werden, bleibt hingegen offen.

3.2.2.3.2 Zusammenfassung

In Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) ist die durch den Edelstein-Effekt induzierte Spin-Dichte für ein beliebiges äußeres elektrisches Feld stets in der Ebene senkrecht zu diesem ($\mathbf{s}(\mathbf{E}) \cdot \widehat{\mathbf{E}} = 0$). Ferner zeigt sich, dass für $\mathbf{E} = E\widehat{\mathbf{y}}$ die Spin-Dichte näherungsweise entweder parallel oder antiparallel zur x -Richtung ausgerichtet ist. Für diese Wahl des äußeren elektrischen Feldes ist die induzierte Spin-Dichte in x -Richtung s_x im Allgemeinen größer, wenn die Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche statt senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche orientiert ist. Die Größenordnung der induzierten magnetischen Momente betragen wiederum für eine typische elektrische Stromdichte $j = 10^7 \text{ A/cm}^2$ $\mathcal{O}(m(j)) = 10^{-7} \mu_B$, während die magnetischen Momente im Gleichgewicht $\mathcal{O}(\overset{\circ}{m}^\eta) = 1 \mu_B$ für $\eta \in \text{FM}$ bzw. $\mathcal{O}(\overset{\circ}{m}^\eta) \in [10^{-4} \mu_B, 10^{-2} \mu_B]$ für $\eta \in \text{NM}$ betragen.

3.2.2.4 Spin-Orbit-Torkance

Der Tensor der Spin-Orbit-Torkance \widehat{t} von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} in y -Richtung ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) ist in Tabelle 3.2.4 angegeben. und hat die gleiche Struktur wie der Edelstein-Tensor $\widehat{\chi}$, wobei bei kollinearem Magnetismus in y -Richtung t_{yx} und t_{yz} verschwinden. In diesem Fall gibt es mit t_{xy} und t_{zy} nur zwei von Null verschiedene Tensorelemente. Unter Verwendung von Gleichung (2.163) gilt für den Spezialfall eines sphärischen magnetischen Feldes $\mathbf{B}^\eta(\mathbf{r}) = \mathbf{B}^\eta(r)$ bei kollinearem Magnetismus in y -Richtung

$$t_{xy}^{\eta}(\eta_0) \approx -\chi_{zy}^{\eta}(\eta_0) B_y^{\eta}(r)|_{r=0} \quad \text{und} \quad t_{zy}^{\eta}(\eta_0) \approx \chi_{xy}^{\eta}(\eta_0) B_y^{\eta}(r)|_{r=0}. \quad (3.29)$$

Die Spin-Orbit-Torkance \hat{t} wird wie in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) entsprechend Gleichung (3.23) symmetrisiert, wobei im Folgenden auf den Index SYM verzichtet wird. Die Tensorstruktur der Spin-Orbit-Torkance \hat{t} in Tabelle 3.2.4 spiegelt sich, wie in Anhang I.7.2.2 dargestellt, in den numerischen Rechnungen wider.

3.2.2.4.1 Transversale Spin-Orbit-Torkance $t^{\top 1}$ und $t^{\top 2}$

3.2.2.4.1.1 Transversale Spin-Orbit-Torkance t_{xy} und t_{zy}

Vergleich zwischen magnetischer Flussdichte im Gleichgewicht $\overset{\circ}{\mathbf{B}}$ und durch Spin-Orbit-Torque induzierter magnetischer Flussdichte $\mathbf{B}(j)$

Die transversalen Spin-Orbit-Torkance t_{xy} und t_{zy} , überdies die einzigen Null verschiedenen Tensorelemente der Spin-Orbit-Torkance \hat{t} , für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten sind in Abb. 3.2.43 dargestellt. Wie beim Edelstein-Tensor verschwindet die Spin-Orbit-Torkance sowohl in fcc-Cu als auch in fcc-Co. Der Spin-

Tabelle 3.2.4.: Spin-Orbit-Torkance \hat{t} und Spin-Orbit-Torque $T(E)$ für ein äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\widehat{\mathbf{E}}$ in x -, y -, und z -Richtung von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) und Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$). Die Tensorelemente t_{yx} und t_{yz} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) bzw. t_{zz} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) verschwinden für kollinearen Magnetismus und sind zur Verdeutlichung durchgestrichen.

		$T(E)$ für $E = E\widehat{\mathbf{E}}$ mit			
		$\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{x}}$	$\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{y}}$	$\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{z}}$	
$\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$	\hat{t}	$\begin{pmatrix} 0 & t_{xy} & 0 \\ \cancel{t_{yx}} & 0 & \cancel{t_{yz}} \\ 0 & t_{zy} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ \cancel{t_{yx}E} \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} t_{xy}E \\ 0 \\ t_{zy}E \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ \cancel{t_{yz}E} \\ 0 \end{pmatrix}$
	\hat{t}	$\begin{pmatrix} t_{xx} & -t_{yx} & 0 \\ t_{yx} & t_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \cancel{t_{zz}} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} t_{xx}E \\ t_{yx}E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -t_{yx}E \\ t_{xx}E \\ 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cancel{t_{zz}E} \end{pmatrix}$

Orbit-Torque kann ausgehend von Gleichung (2.157) in Abhängigkeit der Stromdichte j

3. Ergebnisse

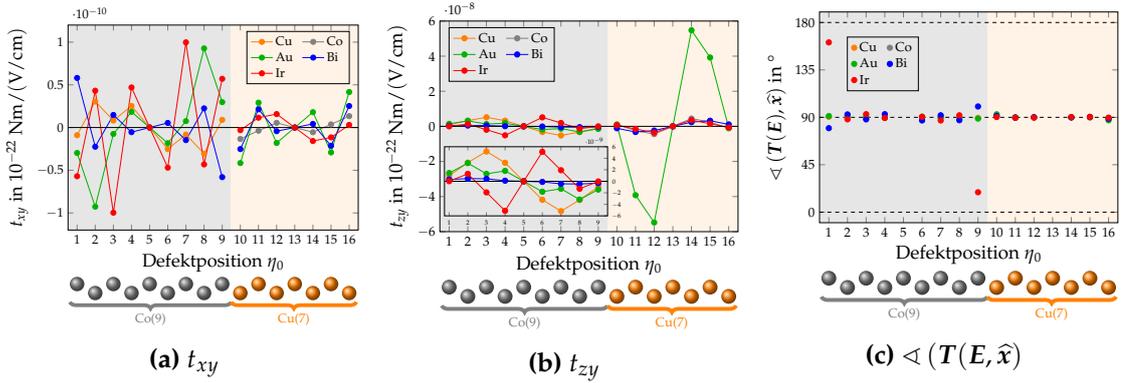


Abbildung 3.243.: Transversale Spin-Orbit-Torkance **(a)** t_{xy} und **(b)** $t_{z\gamma}$ für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) mit Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekten. **(c)** Winkel $\angle(T(\mathbf{E}), \widehat{\mathbf{x}})$ zwischen dem Spin-Orbit Torque $\mathbf{T}(\mathbf{E}) = (t_{xy}E, 0, t_{z\gamma}E)^T$ und der x -Richtung für ein äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\widehat{\mathbf{e}}$ in y -Richtung ($\widehat{\mathbf{E}} = \widehat{\mathbf{y}}$) in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für Cu-, Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$). Für $\eta_0 \in \{5, 13\}$ besitzen die Co/Cu-Vielfachschichten weiterhin Raum inversionssymmetrie, sodass in diesen Fällen kein Spin-Orbit Torque auftritt. Mit wenigen Ausnahmen ist der Spin-Orbit Torque $\mathbf{T}(\mathbf{E})$ nahezu vollständig in z -Richtung ($\angle(T(\mathbf{E}), \widehat{\mathbf{x}}) = 90^\circ$) orientiert. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

dargestellt werden. Der Spin-Orbit-Torque übt ein Drehmoment auf die Magnetisierung im Gleichgewicht $\dot{\mathbf{M}} = \dot{m}_{\text{EZ}}/V_{\text{EZ}}$ bzw. auf die magnetischen Momente im Gleichgewicht $\dot{\mathbf{m}}^j$ aus. Die Größe der magnetischen Flussdichte $\mathbf{B}(j)$, die ein solches Drehmoment bewirkt, kann über $\mathbf{T}(j) \approx \dot{m}_{\text{EZ}} \times \mathbf{B}(j)$ abgeschätzt werden. Mit typischen Größenordnungen für die Spin-Orbit-Torkance \hat{t} und der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$ bzw. des spezifischen elektrischen Widerstandes $\rho = \hat{\sigma}^{-1}$ mit $\mathcal{O}(\hat{t}) = 10^{-30}$ Nm/(V/cm) bzw. $\mathcal{O}(\hat{\sigma}) = 1$ 1/($\mu\Omega$ cm) $\Leftrightarrow \mathcal{O}(\hat{\sigma}^{-1}) = 1$ $\mu\Omega$ cm folgt für $j = 10^7$ A/cm² somit $\mathcal{O}(B_\gamma(j)) = \frac{1}{\mathcal{O}(\dot{m}_{\text{EZ}})} \mathcal{O}(T_\alpha(j)) = 10^{-7}$ T. Die durch den Spin-Orbit-Torque induzierten magnetischen Felder besitzen für eine elektrische Stromdichte j mit $j = 10^7$ A/cm² magnetische Flussdichten in der Größenordnung von 10^{-7} T. Die magnetische Flussdichte $\mathring{\mathbf{B}}$ durch die Magnetisierung im Gleichgewicht $\dot{\mathbf{M}} = \dot{\mathbf{m}}/V$ bestimmt sich hingegen über $\mathring{\mathbf{B}} = \mu_0 \dot{m}_{\text{EZ}}/V_{\text{EZ}}$, wobei das Volumen der tetragonalen Einheitszelle von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten $V_{\text{EZ}} = \left(\frac{a(\text{fcc-Cu})}{\sqrt{2}}\right)^2 \cdot \frac{16}{2} a(\text{fcc-Cu}) = \frac{16}{4} a(\text{fcc-Cu})^3$ beträgt. Die Gitterkonstante von fcc-Cu und die magnetischen Momente innerhalb der Einheitszelle der Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten sind in Tabelle 3.1.1 bzw. in Abb. F.2.1 gegeben. Die magnetische Flussdichte im Gleichgewicht beträgt somit $\mathcal{O}(B_y) = \mathcal{O}(\mu_0) \frac{\mathcal{O}(\dot{m}_{\text{EZ}})}{\mathcal{O}(V_{\text{EZ}})} = 1$ T und ist somit um mehrere Größenordnungen größer als die durch den Spin-Orbit-Torque

hervorgerufenen magnetischen Flussdichten $\mathbf{B}(j)$. Betrachtet man nun die beiden von Null verschiedenen Tensorelemente der Spin-Orbit-Torkance im Vergleich. Die Spin-Orbit-Torkance t_{zy} sind im Allgemeinen um mindestens eine Größenordnung, im Falle von Au-Defekten in der Cu-Schicht sogar um zwei Größenordnungen, größer als die Spin-Orbit Torkance t_{xy} .

Orientierung der Spin-Orbit-Torques

In Analogie zur induzierten Spin-Dichte $\mathbf{s}(\mathbf{E})$ ist der Winkel zwischen Spin-Orbit-Torque $\mathbf{T}(\mathbf{E})$ und der x -Richtung entsprechend Gleichung (3.27) gegeben, wobei die Edelstein-Tensorelemente durch die entsprechenden Elemente der Spin-Orbit-Torkance zu ersetzen sind. Das in der Probe wirkende Drehmoment $\mathbf{T}(\mathbf{E})$ auf die Magnetisierung \mathbf{M} ist wie in Abb. 3.2.43 (c) illustriert somit fast vollständig in z -Richtung orientiert. Zurückzuführen lässt sich dies darauf, dass sich die Tensorelemente t_{xy} und t_{zy} wie oben beschrieben um mehrere Größenordnungen unterscheiden. Für $|t_{zy}| \gg |t_{xy}|$ gilt $\angle(\mathbf{T}(\mathbf{E}), \hat{\mathbf{x}}) \approx 90^\circ$, wobei $\arccos(x) \approx 90^\circ$ für $x := \text{sgn}(t_{xy}) \frac{|t_{xy}|}{|t_{zy}|} \ll 1$ (Potenzreihenentwicklung) verwendet wurde. Wie in den zuvor betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$) gilt auch in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) $\hat{t}(\eta_0) \approx \hat{t}^{\text{FM}}(\eta_0)$ für alle η_0 . Wie zuvor ist dies darauf zurückzuführen, dass in der nichtmagnetischen Schicht wegen $m^\eta \approx 0$ kein Drehmoment erzeugt werden kann. Die theoretisch abgeleiteten Beziehungen aus Gleichung (3.29) zeigen sich in den numerischen Rechnungen. Die lokalen Beiträge t_{xy}^η und χ_{zy}^η bzw. t_{zy}^η und χ_{xy}^η sind in Abb. J.6.6 bzw. Abb. J.6.7 dargestellt. Entsprechend Tabelle 3.2.4 besitzt der Spin-Orbit-Torque $\mathbf{T}(\mathbf{E})$ für ein äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ in y -Richtung ($\hat{\mathbf{E}} = \hat{\mathbf{y}}$) sowohl für Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) als auch für Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$) von Null verschiedene Komponenten in x -Richtung. Als einziges gemeinsames Tensorelement beschreibt t_{xy} für $\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$ und $\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$ den Einfluss der Richtung der Magnetisierung auf den entstehenden Spin-Orbit-Torque, während das äußere elektrische Feld unverändert bleibt. Beide Tensorelemente t_{xy} für die unterschiedlichen Richtungen der Magnetisierung sind Cu- und Co-, Au-, Bi-, und Ir-Defekte in Abb. 3.2.45 dargestellt. Während die induzierten Spin-Dichten $\mathbf{s}(\mathbf{E})$ für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$) im Allgemeinen größer ist als in Systemen mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$) (Abb. 3.2.44), sind die Tensorelemente t_{xy} für $\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{y}}$ und $\widehat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{z}}$ von ähnlicher Größe.

3.2.2.4.2 Zusammenfassung

Die mit der Magnetisierung verbundene magnetische Flussdichte beträgt im Gleichgewicht $\mathcal{O}(\mathring{\mathbf{B}}^\eta) = 1 \text{ T}$, während für eine typische äußere elektrische Stromdichte mit $j = 10^7 \text{ A/cm}^2$ die durch den Spin-Orbit-Torque induzierten magnetischen Flussdichten $\mathcal{O}(\mathbf{B}^\eta(j)) = 10^{-7} \text{ T}$ betragen. Wie bei den Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschicht-

ten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) wird auch in den Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) die Spin-Orbit-Torkance fast ausschließlich durch die ferromagnetische Schicht bestimmt. Analog zur Spin-Dichte ist auch der Spin-Orbit-Torque im Allgemeinen stets in der Ebene senkrecht zum äußeren elektrischen Feld. Für ein äußeres elektrisches Feld $E = E\widehat{y}$ ist der Spin-Orbit-Torque näherungsweise in x -Richtung orientiert, sodass Spin-Dichte, Spin-Orbit-Torque und Magnetisierung jeweils orthogonal zueinander stehen. Schließlich zeigt sich, dass der Spin-Orbit-Torque senkrecht zu s_x und Magnetisierung in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$), d.h. T_z , größer ist als in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$), d.h. T_y .

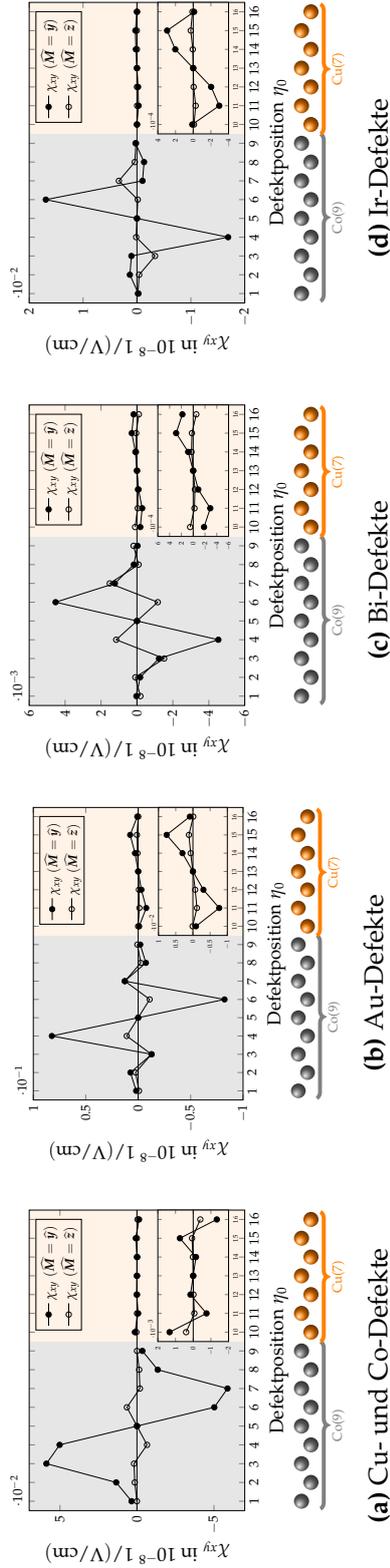


Abbildung 3.2.44.: Edelstein-Tensorelement χ_{xy} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielstschichten mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) und mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$) für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte. Die innen liegenden Abbildungen stellen χ_{xy} für $\vec{M} \in \{\hat{y}, \hat{z}\}$ für $\eta_0 \in \text{NM}$ vergrößert dar. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1 \text{ at.}\%$.

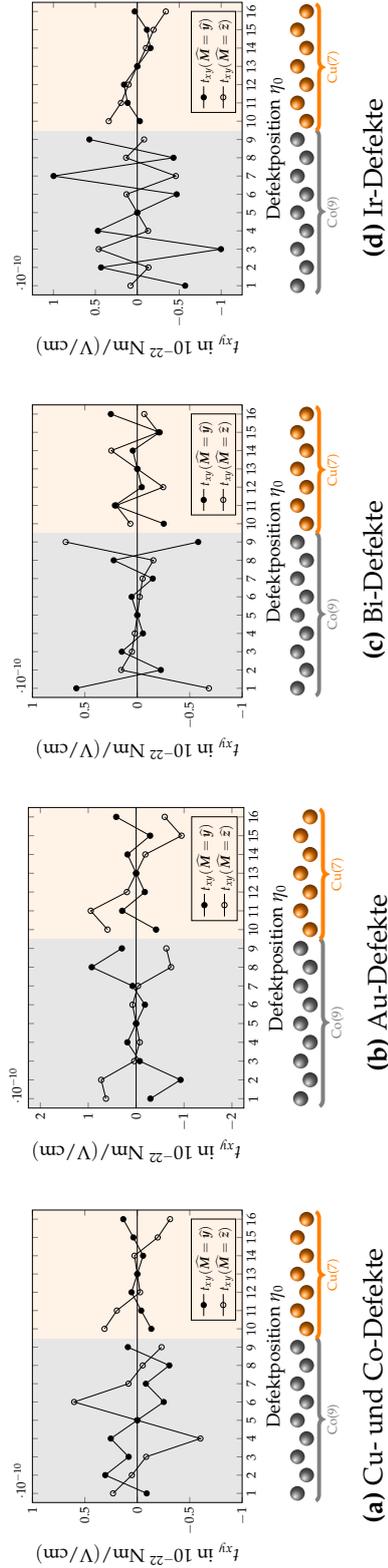


Abbildung 3.2.45.: Transversale Spin-Orbit Torckance t_{xy} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielstschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$) (●) und für Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) (○) für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1 \text{ at.}\%$.

4. Zusammenfassung

Mein Berg sagt: Blicke weiter, blicke höher, blicke voraus und Du wirst einen Weg sehen

Sir Robert Baden-Powell, Lord of Gilwell, Gründer der Weltpfadfinderbewegung

Am Beispiel von Co/Cu-Vielfachschichten wurden Transporteigenschaften insbesondere der anomale Hall-Effekt, der Spin-Hall-Effekt, der Edelstein-Effekt, und der Spin-Orbit-Torque in ferromagnetisch/nichtmagnetischen Vielfachschichten durch Elektron-Defekt-Streuung, im Speziellen durch den *skew scattering*-Mechanismus, untersucht. Es wurden Co/Cu-Vielfachschichten sowohl mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) als auch mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) betrachtet. Hierbei wurde der Einfluss sowohl unterschiedlicher Defekte (Co, Cu, Au, Bi, Ir) als auch unterschiedlicher Positionen der Defekte innerhalb der Co/Cu-Vielfachschichten analysiert.

Anomaler Hall-Effekt und Spin-Hall-Effekt beschreiben das Auftreten einer transversalen elektrischer Stromdichte bzw. einer transversalen Spin-Stromdichte als Antwort auf eine longitudinale elektrische Stromdichte. Durch das Vorhandensein von Grenzflächen innerhalb von Co/Cu-Vielfachschichten sind die anomalen Hall-Winkel und Spin-Hall-Winkel als Maße für die Effizienz des anomalen Hall-Effekts bzw. des Spin-Hall-Effekts von der Position des Defektes relativ zur Co/Cu-Grenzfläche abhängig. Anomaler Hall-Winkel und Spin-Hall-Winkel sind im Allgemeinen maximal in Proben, in denen Defekte an der Co/Cu-Grenzfläche positioniert sind. Zurückzuführen ist dies auf die geringe longitudinale elektrische Leitfähigkeit in diesen Co/Cu-Vielfachschichten. Während in Co/Cu-Vielfachschichten mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche sowohl anomale Hall-Stromdichte als auch Spin-Hall-Stromdichte mit Polarisation senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche auf Ebenen parallel zur Co/Cu-Grenzfläche beschränkt sind, ist in Co/Cu-Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche sowohl eine anomale Hall-Stromdichte als auch eine Spin-Hall-Stromdichte senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche möglich. Es zeigt sich, dass die anomalen Hall-Winkel und Spin-Hall-Winkel für ein äußeres elektrisches Feld parallel zur Co/Cu-Grenzfläche Werte gleicher Größenordnung sowohl für Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche als auch für Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche erreichen. Für eine anomale Hall-Stromdichte und eine Spin-Hall-Stromdichte parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ergeben sich für die anomalen Hall-Winkel bzw. die Spin-Hall-Winkel in Co/Cu-Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) und äußerem elektrischen Feld senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{E} = \widehat{z}$) im Allgemeinen größere Werte als in entsprechenden Vielfachschichten mit Magnetisierung senkrecht

zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) und äußerem elektrischen Feld parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{E} = -\widehat{y}$). Dieses bietet eine einfache experimentelle Möglichkeit die Größe des anomalen Hall-Winkels bzw. des Spin-Hall-Winkels zu manipulieren.

Durch die verringerte Symmetrie in ferromagnetisch/nichtmagnetischen-Vielfachschichten treten aufgrund der Spin-Bahn-Wechselwirkung neue Effekte wie der Edelstein-Effekt und der Spin-Orbit-Torque auf. Der Edelstein-Effekt beschreibt das Auftreten einer Spin-Dichte bzw. einer Magnetisierungsdichte unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes und tritt bereits in nichtmagnetischen Systemen auf. Die vorliegenden Rechnungen an Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten zeigen, dass die induzierte Spin-Dichte am größten ist, falls das äußere elektrische Feld in Richtung der Magnetisierung orientiert ist. Für eine im Experiment übliche Stromstärke von $j = 10^7$ A/cm² sind diese elektrisch induzierten magnetischen Momente ($\mathcal{O}(m^{\uparrow}(j)) \leq 10^{-7} \mu_B$) um drei bis vier Größenordnungen kleiner als die magnetischen Momente im Grundzustand ($\mathcal{O}(m^{\uparrow}) \geq 10^{-4} \mu_B$). In Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) ist für ein äußeres elektrisches Feld parallel zur Co/Cu-Grenzfläche die induzierte Spin-Dichte ebenfalls parallel zur Co/Cu-Grenzfläche und im Allgemeinen senkrecht zum äußeren elektrischen Feld orientiert. In Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) ist die induzierte Spin-Dichte stets in der Ebene senkrecht zur Magnetisierung und mit wenigen Ausnahmen parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ausgerichtet. Während der Edelstein-Effekt bereits in nichtmagnetischen Systemen auftritt, ist der Spin-Orbit-Torque erst in magnetischen Systemen zu beobachten. Hierbei erzeugt ein äußeres elektrisches Feld ein Drehmoment auf die Magnetisierung, den Spin-Orbit-Torque. Der Spin-Orbit-Torque kann lokal als Drehmoment zwischen der durch den Edelstein-Effekt induzierten Spin-Dichte und der Magnetisierung beschrieben werden. Nennenswerte Beiträge zum Spin-Orbit-Torque sind auf die ferromagnetische Schicht begrenzt. Während Edelstein-Effekt und Spin-Orbit-Torque in den zugrundeliegenden Volumensystemen fcc-Cu und fcc-Co aufgrund der vorhandenen Rauminversionssymmetrie nicht zu beobachten sind, treten in fcc-Co sowohl anomaler Hall-Effekt als auch Spin-Hall-Effekt auf, während fcc-Cu als nichtmagnetisches System nur den Spin-Hall-Effekt aufweist. Im Vergleich mit den Werten für die Volumensystemen zeigt sich, dass diese nur bedingt Auskunft über die zu erwartenden Werte in Co/Cu-Vielfachschichten liefern.

A. Quantenmechanische Erwartungswerte in globalen und zellzentrierten Koordinaten

Ausgehend von der Darstellung des quantenmechanischen Erwartungswertes zum Operator $\mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r})$ mit $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \{x, y, z\}$

$$\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) = \int_{\mathfrak{V}} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) \overset{\circ}{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \quad (\text{A.1})$$

gilt mit Gleichung (2.85) sowohl

$$= \sum_n \sum_{\eta} \int_{V^\eta} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{\psi}_{kvs}^\eta(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) \overset{\circ}{\psi}_{kvs}^\eta(\mathbf{r}; E) \quad (\text{A.2})$$

als auch

$$= \sum_n \sum_{\eta} \int_{V^\eta} d\mathbf{r} \left(\frac{1}{\sqrt{\mathfrak{V}}} \sum_Q \overset{\circ}{C}_Q^\eta(\mathbf{k}vs; E) \overset{\circ}{R}_Q^\eta(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \cdot \mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{\sqrt{\mathfrak{V}}} \sum_Q \overset{\circ}{C}_Q^\eta(\mathbf{k}vs; E) \overset{\circ}{R}_Q^\eta(\mathbf{r}; E) \right) \quad (\text{A.3})$$

$$= \frac{1}{\mathfrak{V}} \sum_n \sum_{\eta} \sum_{QQ'} \left(\overset{\circ}{C}_Q^\eta(\mathbf{k}vs; E) \right)^* \overset{\circ}{C}_{Q'}^\eta(\mathbf{k}vs; E) \cdot \int_{V^\eta} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{R}_Q^\eta(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) \overset{\circ}{R}_{Q'}^\eta(\mathbf{r}; E) \quad (\text{A.4})$$

Aufgrund der Translationssymmetrie des Idealkristalls ist der Ausdruck

$$\sum_{\eta} \sum_{QQ'} \left(\overset{\circ}{C}_Q^\eta(\mathbf{k}vs; E) \right)^* \overset{\circ}{C}_{Q'}^\eta(\mathbf{k}vs; E) \int_{V^\eta} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{R}_Q^\eta(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) \overset{\circ}{R}_{Q'}^\eta(\mathbf{r}; E) \quad (\text{A.5})$$

unabhängig von n , sodass eine beliebige Referenzzelle ausgewählt werden kann. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei $n = 0$, und es gilt

$$\begin{aligned} & \sum_n \sum_\eta \sum_{QQ'} \left(\mathring{C}_Q^\eta(\mathbf{k}vs; E) \right)^* \mathring{C}_{Q'}^\eta(\mathbf{k}vs; E) \\ & \quad \cdot \int_{V_\eta^n} d\mathbf{r} \left(\mathring{R}_Q^\eta(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) \mathring{R}_{Q'}^\eta(\mathbf{r}; E) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} & = N \sum_\eta \sum_{QQ'} \left(\mathring{C}_Q^0(\mathbf{k}vs; E) \right)^* \mathring{C}_{Q'}^0(\mathbf{k}vs; E) \\ & \quad \cdot \int_{V_\eta^0} d\mathbf{r} \left(\mathring{R}_Q^0(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(\mathbf{r}) \mathring{R}_{Q'}^0(\mathbf{r}; E). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Somit folgt

$$\begin{aligned} \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) & = \frac{1}{\mathfrak{V}} N \sum_\eta \sum_{QQ'} \left(\mathring{C}_Q^0(\mathbf{k}vs; E) \right)^* \mathring{C}_{Q'}^0(\mathbf{k}vs; E) \\ & \quad \cdot \int_{V_\eta^n} d\mathbf{r} \left(\mathring{R}_Q^0(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{r}) \mathring{R}_{Q'}^0(\mathbf{r}; E) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

unter Verwendung von $\mathfrak{V} = NV_{\text{EZ}}$, wobei N die Anzahl an Einheitszellen darstellt, gilt mit $\frac{1}{\mathfrak{V}} N = \frac{1}{NV_{\text{EZ}}} N = \frac{1}{V_{\text{EZ}}}$ mit $V_{\text{EZ}} = \sum_\eta \int_{V_\eta^n} d\mathbf{r} = \sum_\eta V_\eta^n$

$$\begin{aligned} & = \frac{1}{V_{\text{EZ}}} \sum_\eta \sum_{QQ'} \left(\mathring{C}_Q^0(\mathbf{k}vs; E) \right)^* \mathring{C}_{Q'}^0(\mathbf{k}vs; E) \\ & \quad \cdot \int_{V_\eta^0} d\mathbf{r} \left(\mathring{R}_Q^0(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(\mathbf{r}) \mathring{R}_{Q'}^0(\mathbf{r}; E) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \mathring{A}_{QQ'}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(E) & := \int_{V_\eta^0} d\mathbf{r} \left(\mathring{R}_Q^0(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \mathcal{A}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(\mathbf{r}) \mathring{R}_{Q'}^0(\mathbf{r}; E) \\ & = \frac{1}{V_{\text{EZ}}} \sum_\eta \sum_{QQ'} \left(\mathring{C}_Q^0(\mathbf{k}vs; E) \right)^* \mathring{C}_{Q'}^0(\mathbf{k}vs; E) \mathring{A}_{QQ'}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(E) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$= \sum_\eta \frac{1}{V_{\text{EZ}}} \sum_{QQ'} \left(\mathring{C}_Q^0(\mathbf{k}vs; E) \right)^* \mathring{C}_{Q'}^0(\mathbf{k}vs; E) \mathring{A}_{QQ'}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(E) \quad (\text{A.11})$$

$$= \sum_\eta \mathring{A}_{vs}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(\mathbf{k}; E) \quad (\text{A.12})$$

Der Ausdruck $\mathring{A}_{vs}^0 \alpha_1 \dots \alpha_n(\mathbf{k}; E)$ stellt den Beitrag zum Erwartungswertes $A_{vs}(\mathbf{k}; E)$ durch das Basisatom η dar.

B. Transversale elektrische Leitfähigkeit und transversale Spin-Leitfähigkeit

B.1. Zusammenhang zwischen elektrischer Leitfähigkeit und Spin-Leitfähigkeit

Die Beiträge der Majoritäts- und Minoritätselektronen zur Spin-Leitfähigkeit $\sigma_{\alpha\beta}^{\gamma\pm}$ mit $\alpha, \beta, \gamma \in \{x, y, z\}$

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\gamma\pm} = \zeta_{\hat{\sigma}\gamma} \sum_{\substack{vs \\ S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k}) \gtrless 0}} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k}) v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \quad (\text{B.1})$$

kann über

$$= \pm \zeta_{\hat{\sigma}\gamma} \sum_{\substack{vs \\ S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k}) \gtrless 0}} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} |S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k})| v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \quad (\text{B.2})$$

$$= \pm \left(\zeta_{\hat{\sigma}\gamma} \sum_{\substack{vs \\ S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k}) \gtrless 0}} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \right. \\ \left. + \zeta_{\hat{\sigma}\gamma} \sum_{\substack{vs \\ S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k}) \gtrless 0}} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} (|S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k})| - 1) v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \right) \quad (\text{B.3})$$

$$= \pm \left(\zeta_{\hat{\sigma}\gamma} \sum_{\substack{vs \\ S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k}) \gtrless 0}} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \right. \\ \left. - \zeta_{\hat{\sigma}\gamma} \sum_{\substack{vs \\ S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k}) \gtrless 0}} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} (1 - |S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k})|) v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \right) \quad (\text{B.4})$$

mit $\zeta_{\hat{\sigma}} = \zeta_{\hat{\sigma}\gamma}$ und Gleichung (2.149) auf die Beiträge der Majoritäts- bzw. Minoritätselektronen der elektrischen Leitfähigkeit $\sigma_{\alpha\beta}^{\pm}$ entsprechend

$$= \pm \left(\sigma_{\alpha\beta}^{\pm} - \zeta_{\hat{\sigma}\gamma} \sum_{\substack{vs \\ S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k}) \gtrless 0}} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} (1 - |S_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k})|) v_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \right) \quad (\text{B.5})$$

zurückgeführt werden.

B.2. Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

In Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) gelten

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} \quad \text{und} \quad \sigma_{xy}^z = -\sigma_{yx}^z \quad (\text{B.6})$$

während in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$)

$$\sigma_{xz} = -\sigma_{zx} \quad \text{und} \quad \sigma_{xz}^y = -\sigma_{zx}^y \quad (\text{B.7})$$

gelten. In Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) folgt für die Summen und Differenzen der transversalen elektrischen Leitfähigkeiten $\sigma_{yx}^\pm := \frac{1}{2}(\sigma_{yx} \pm \sigma_{xy})$ und der transversalen Spin-Leitfähigkeiten $\sigma_{yx}^{z\pm} := \frac{1}{2}(\sigma_{yx}^z \pm \sigma_{xy}^z)$ folgen somit

$$\sigma_{yx}^+ = 0 \quad \text{und} \quad \sigma_{yx}^{z+} = 0 \quad (\text{B.8})$$

$$\sigma_{yx}^- = \sigma_{yx} \quad \text{und} \quad \sigma_{yx}^{z-} = \sigma_{yx}^z, \quad (\text{B.9})$$

wobei entsprechendes für die Summen und Differenzen in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) gilt. In Abb. B.2.1 und B.2.5 sind sowohl die transversalen elektrischen Leitfähigkeiten als auch die Summen und Differenzen in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) bzw. in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) dargestellt, während in den Abb. B.2.3 und B.2.7 sowohl die transversalen Spin-Leitfähigkeiten als auch die Summen und Differenzen in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) bzw. in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) dargestellt sind. Abweichungen von der Antisymmetrie aus Gleichung (B.6) zeigen sich z. B. für Cu-Defekte in der Co-Schicht in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$), während sich Abweichungen von der Antisymmetrie aus Gleichung (B.7) für Co-, Au-, und Ir-Defekte in der Cu-Schicht in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) zeigen.

Sowohl für die transversalen elektrischen Leitfähigkeiten als auch für die transversalen Spin-Leitfähigkeiten gelten in anisotroper Relaxationszeitnäherung entsprechend Gleichung (H.1)

$$\sigma_{\alpha\beta}^{(0)} = \sigma_{\beta\alpha}^{(0)} \quad \text{und} \quad \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma(0)} = \sigma_{\beta\alpha}^{\gamma(0)} \quad (\text{B.10})$$

für alle $\alpha, \beta, \gamma \in \{x, y, z\}$ unabhängig von den Symmetrien des Systems. Mit Gleichung (B.10) gelten einerseits in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) mit Gleichung (B.6)

$$\sigma_{xy}^{(0)} = \sigma_{yx}^{(0)} = 0 \quad \text{und} \quad \sigma_{xy}^{z(0)} = \sigma_{yx}^{z(0)} = 0 \quad (\text{B.11})$$

und andererseits in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) mit Gleichung (B.7)

$$\sigma_{xz}^{(0)} = \sigma_{zx}^{(0)} = 0 \quad \text{und} \quad \sigma_{xz}^{y(0)} = \sigma_{zx}^{y(0)} = 0. \quad (\text{B.12})$$

Somit verschwindet in anisotroper Relaxationszeitnäherung die transversalen elektrischen Leitfähigkeiten $\sigma_{yx}^{(0)}$ und $\sigma_{xy}^{(0)}$ und die transversalen Spin-Leitfähigkeiten $\sigma_{yx}^{z(0)}$ und $\sigma_{xy}^{z(0)}$ in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$). Entsprechendes gilt für die transversalen elektrischen Leitfähigkeiten und transversalen Spin-Leitfähigkeiten in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$). Die Abweichungen von der Antisymmetrie aus Gleichungen (B.6) und (B.7) spiegeln sich den Abweichungen der Beziehungen für die transversalen elektrischen Leitfähigkeiten und transversalen Spin-Leitfähigkeiten in anisotroper Relaxationszeitnäherung entsprechend Gleichungen (B.11) und (B.12) wider. Die transversalen elektrischen Leitfähigkeiten σ_{yx} und σ_{xy} bzw. σ_{zx} und σ_{xz} sind zusammen mit den entsprechenden Leitfähigkeiten in anisotroper Relaxationszeitnäherung für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) in Abb. B.2.2 und für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) in Abb. B.2.6 dargestellt. Entsprechendes ist für die transversalen Spin-Leitfähigkeiten in Abb. B.2.4 und B.2.8. Die Abweichungen von der Antisymmetrie der transversalen elektrischen Leitfähigkeiten und der transversalen Spin-Leitfähigkeiten fallen mit den Abweichungen der entsprechenden Größen in anisotroper Relaxationszeitnäherung zusammen. Die Beziehungen in Gleichung (B.10) sind hingegen erfüllt.

Die zustandsabhängige Relaxationszeit bestimmt sich über Gleichung (2.139), wobei ein einzelnes Übergangsmatrixelement $P_{kvs \rightarrow k'v's}$ entsprechend Gleichung (2.128) mit Gleichung (2.126) sowohl die Wellenfunktion als auch die defektinduzierte Potentialänderung berücksichtigt. Sei der Defekt in der nichtmagnetischen Schicht positioniert und sei der Ausgangszustand ein Quantum-Well-Zustand der ferromagnetischen Schicht. Wegen seiner geringen Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der nichtmagnetischen Schicht, sind sämtliche Übergangswahrscheinlichkeiten im Allgemeinen sehr klein und somit die inversen Relaxationszeiten und führt wie nachfolgend skizziert zu numerischen Instabilitäten. Seien k und k' zwei Zustände, die sich durch eine Symmetrietransformation der gestörten Co/Cu-Vielfachschichten ineinander überführen lassen, sodass aufgrund der Symmetrien $v_k^\alpha v_{kvs}^\beta = -v_{k'v's'}^\alpha v_{k'v's'}^\beta$, $S_{kvs}^\gamma = S_{k'v's'}^\gamma$ und $\tau_{k'v's'}^{-1} = \tau_{kvs}^{-1}$ gelten. Die numerischen Unterschiede zwischen den Geschwindigkeiten und den Spin-Erwartungswerten seien zu vernachlässigen. Die numerischen Werte der Relaxationszeiten unterscheiden sich entsprechend $\tau_{k'v's'}^{-1} = \tau_{kvs}^{-1} + \Delta\tau^{-1}$ mit $\Delta\tau^{-1} \ll 1$ geringfügig. Die Relaxationszeiten selbst unterscheiden sich hingegen näherungsweise um $\mathcal{O}(\Delta\tau) \gg 1$, sodass sich die Beiträge in der transversalen elektrischen Leitfähigkeit und in der transversalen Spin-Leitfähigkeit nicht mehr gegenseitig aufheben. Für die anomalen und Spin-Hall-Leitfähigkeiten, die durch $\sigma_{yx}^{\text{AHE}} = \sigma_{yx}^- = \frac{1}{2}(\sigma_{yx} - \sigma_{xy})$ und $\sigma_{yx}^{\text{zSHE}} = \sigma_{yx}^z - \frac{1}{2}(\sigma_{yx}^z - \sigma_{xy}^z)$ für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M}

senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) bzw. durch $\sigma_{zx}^{\text{AHE}} = \sigma_{zx}^- = \frac{1}{2}(\sigma_{zx} - \sigma_{xz})$ und $\sigma_{zx}^{y\text{SHE}} = \sigma_{zx}^{y-} = \frac{1}{2}(\sigma_{zx}^y - \sigma_{xz}^y)$ für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) definiert sind, sind diese numerischen Instabilitäten nicht beeinflusst, da sich durch die Differenzbildung diese fehlerhaften Größen herausheben.

B.2.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche

B.2.1.1. Tensor der elektrischen Leitfähigkeit

B.2.1.1.1 Transversale elektrische Leitfähigkeit

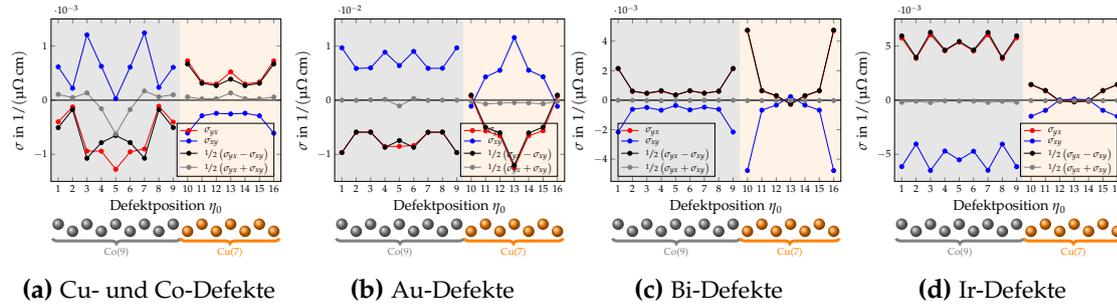
 B.2.1.1.1.1 σ_{xy} und σ_{yx}


Abbildung B.2.1.: Transversale elektrische Leitfähigkeiten σ_{yx} und σ_{xy} für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Zusätzlich sind sowohl die Summe $\frac{1}{2}(\sigma_{yx} + \sigma_{xy})$ als auch die Differenz $\frac{1}{2}(\sigma_{yx} - \sigma_{xy})$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

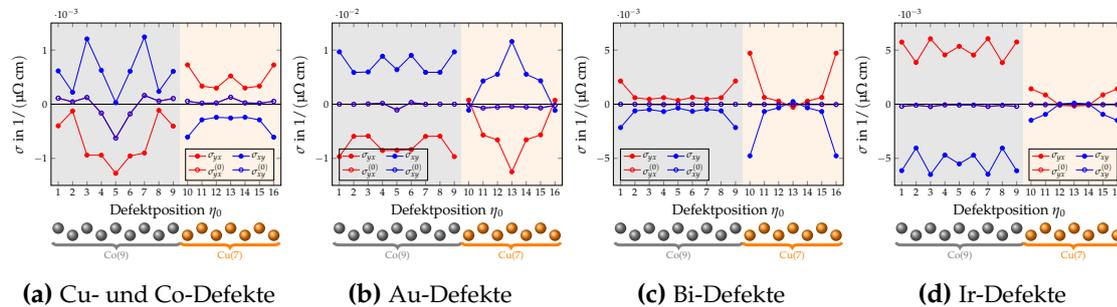


Abbildung B.2.2.: Transversale elektrische Leitfähigkeiten σ_{yx} und σ_{xy} für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Zusätzlich sind die transversalen elektrischen Leitfähigkeiten in anisotroper Relaxationszeitnäherung $\sigma_{yx}^{(0)}$ und $\sigma_{xy}^{(0)}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

B.2.1.2. Tensor der Spin-Leitfähigkeit ($\gamma := z$)

B.2.1.2.1 Transversale Spin-Leitfähigkeiten

B.2.1.2.1.1 σ_{xy}^z und σ_{yx}^z

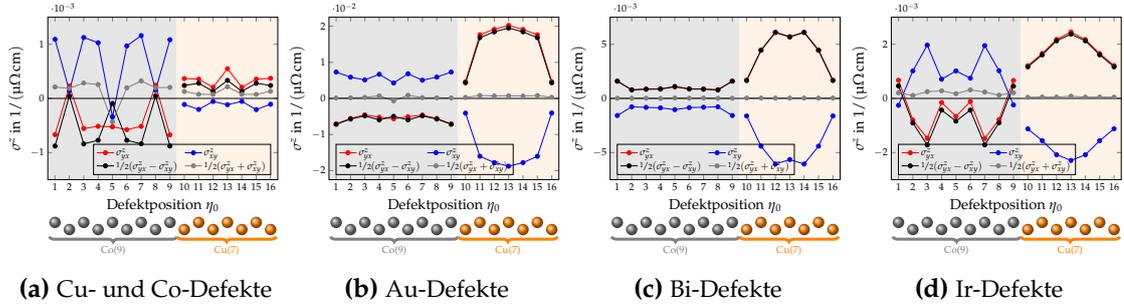


Abbildung B.2.3.: Transversale Spin-Leitfähigkeiten σ_{yx}^z und σ_{xy}^z für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Zusätzlich sind sowohl die Summe $\frac{1}{2}(\sigma_{yx}^z + \sigma_{xy}^z)$ als auch die Differenz $\frac{1}{2}(\sigma_{yx}^z - \sigma_{xy}^z)$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

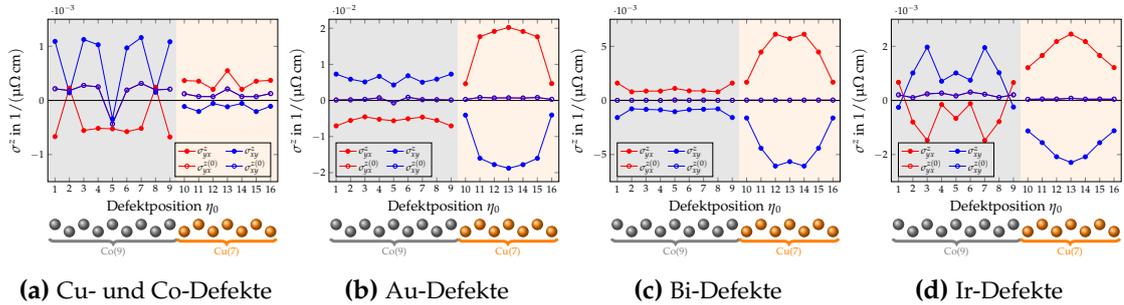
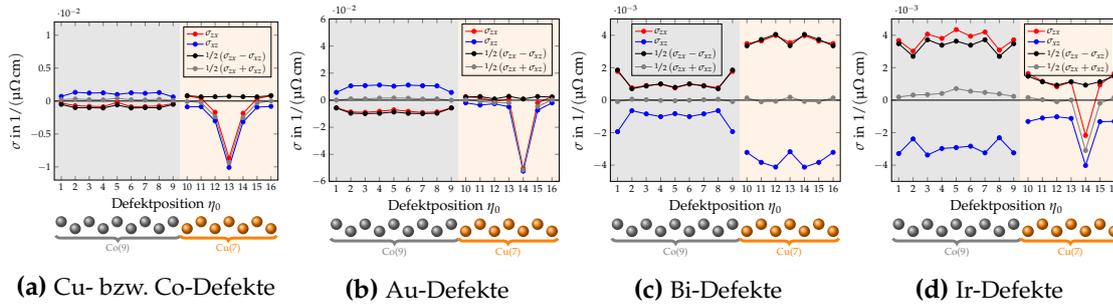


Abbildung B.2.4.: Transversale Spin-Leitfähigkeiten σ_{yx}^z und σ_{xy}^z für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Zusätzlich sind die transversalen Spin-Leitfähigkeiten in anisotroper Relaxationszeitnäherung $\sigma_{yx}^{z(0)}$ und $\sigma_{xy}^{z(0)}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

B.2.2. Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche

B.2.2.1. Tensor der elektrischen Leitfähigkeit

B.2.2.1.1 Transversale elektrische Leitfähigkeiten

 B.2.2.1.1.1 σ_{xz} und σ_{zx}


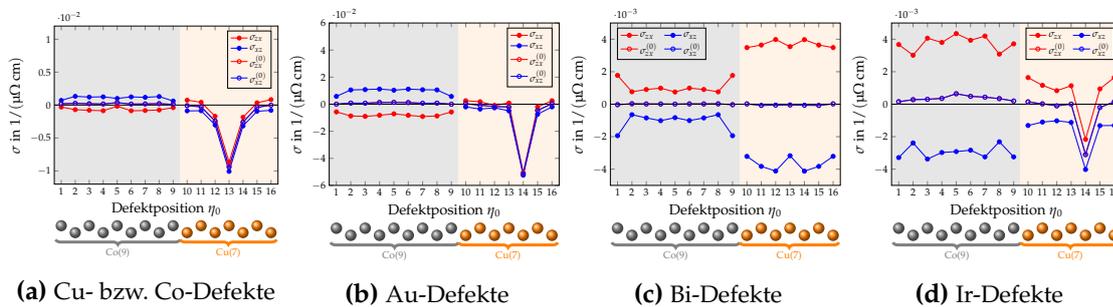
(a) Cu- bzw. Co-Defekte

(b) Au-Defekte

(c) Bi-Defekte

(d) Ir-Defekte

Abbildung B.2.5.: Transversale elektrische Leitfähigkeiten σ_{zx} und σ_{xz} für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche. Zusätzlich sind sowohl die Summe $\frac{1}{2}(\sigma_{zx} + \sigma_{xz})$ als auch die Differenz $\frac{1}{2}(\sigma_{zx} - \sigma_{xz})$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.



(a) Cu- bzw. Co-Defekte

(b) Au-Defekte

(c) Bi-Defekte

(d) Ir-Defekte

Abbildung B.2.6.: Transversale elektrische Leitfähigkeiten σ_{zx} und σ_{xz} für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$). Zusätzlich sind die transversalen elektrischen Leitfähigkeiten in anisotroper Relaxationszeitnäherung $\sigma_{zx}^{(0)}$ und $\sigma_{xz}^{(0)}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

B.2.2.2. Tensor der Spin-Leitfähigkeit ($\gamma := y$)

B.2.2.2.1 Transversale Spin-Leitfähigkeiten

B.2.2.2.1.1 σ_{xz}^y und σ_{zx}^y

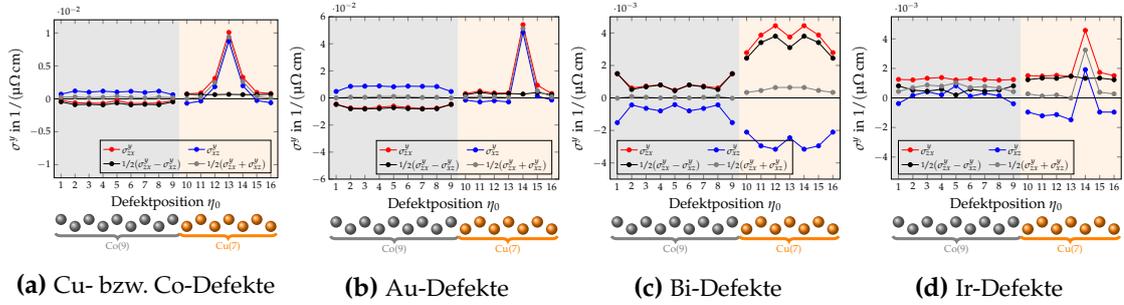


Abbildung B.2.7.: Transversale Spin-Leitfähigkeiten σ_{zx}^y und σ_{xz}^y für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche. Zusätzlich sind die Summe $\frac{1}{2}(\sigma_{zx}^y - \sigma_{xz}^y)$ und die Differenz $\frac{1}{2}(\sigma_{zx}^y + \sigma_{xz}^y)$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

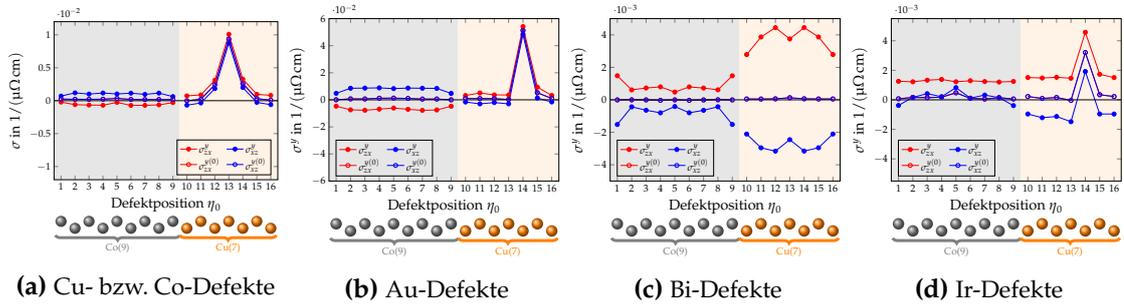


Abbildung B.2.8.: Transversale Spin-Leitfähigkeiten σ_{zx}^y und σ_{xz}^y für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$). Zusätzlich sind die transversalen Spin-Leitfähigkeiten in anisotroper Relaxationszeitnäherung $\sigma_{zx}^{y(0)}$ und $\sigma_{xz}^{y(0)}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

C. Makroskopische Größen im Gleichgewicht

Die betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten ohne Defekt besitzen Rauminversionssymmetrie \mathcal{I} , sodass

$$R(\mathcal{I})A^{0\alpha_1\cdots\alpha_n} = A^{0\alpha_1\cdots\alpha_n}, \quad (\text{C.1})$$

gilt. Wegen $R(\mathcal{I})E_{vs}(\mathbf{k}) = E_{vs}(-\mathbf{k}) = E_{vs}(\mathbf{k})$ ist ferner

$$R(\mathcal{I})f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) = f^0(E_{vs}(-\mathbf{k})) = f^0(E_{vs}(\mathbf{k})). \quad (\text{C.2})$$

Ausgehend von

$$A^{0\alpha_1\cdots\alpha_n} = \sum_{kvs} A_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) \quad (\text{C.3})$$

gilt für das Verhalten unter Rauminversionssymmetrie mit Gleichung (C.2) und

$$R(\mathcal{I})A_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k}) = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k})) A_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(-\mathbf{k}) \quad (\text{C.4})$$

nummehr

$$R(\mathcal{I})A^{0\alpha_1\cdots\alpha_n} = R(\mathcal{I}) \left(\sum_{kvs} A_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) \right) \quad (\text{C.5})$$

$$= \sum_{-kvs} \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k})) A_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(-\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(-\mathbf{k})) \quad (\text{C.6})$$

$$= \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k})) \sum_{-kvs} A_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(-\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(-\mathbf{k})) \quad (\text{C.7})$$

$$= \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k})) A^{0\alpha_1\cdots\alpha_n}. \quad (\text{C.8})$$

Tabelle C.0.1.: Transformationsverhalten verschiedener Größen A unter Rauminversion \mathcal{I} und das zugehörige Signum $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)$, das über $R(\mathcal{I})A = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)A$ definiert ist.

A	r	t	\mathbf{k}	$J_{vs}(\mathbf{k})$	$J_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k})$	$S_{vs}(\mathbf{k})$	$T_{vs}(\mathbf{k})$
$R(\mathcal{I})A$	$-r$	t	$-\mathbf{k}$	$-J_{vs}(-\mathbf{k})$	$-J_{vs}^{\gamma}(-\mathbf{k})$	$S_{vs}(-\mathbf{k})$	$T_{vs}(-\mathbf{k})$
$\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)$	-1	$+1$	-1	-1	-1	$+1$	$+1$

Entsprechend Tabelle C.0.1 gilt $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(J_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k})) = -1$ bzw. $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(J_{vs}^{\gamma\alpha}(\mathbf{k})) = -1$ für alle $\alpha \in \{x, y, z\}$, sodass mit Gleichungen (C.1) und (C.8)

$$j^{0\alpha} = 0 \qquad j^{0\gamma\alpha} = 0 \qquad (\text{C.9})$$

für alle $\alpha \in \{x, y, z\}$ folgt. Wegen $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(S_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k})) = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(T_{vs}^{\alpha}(\mathbf{k})) = +1$ für alle $\alpha \in \{x, y, z\}$ stellt die Rauminversionssymmetrie keinerlei Einschränkungen für $s^{0\alpha}$ bzw. $T^{0\alpha}$ dar. Die Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten, wobei die Magnetisierung entlang einer kartesischen Achse ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\boldsymbol{\zeta}}$ mit $\zeta \in \{x, y, z\}$) orientiert ist, besitzen eine zweizählige Rotationsachse um die ζ -Richtung ($C_{2\zeta}$). Diese zusätzliche Symmetrie nutzt man für die Spin-Dichte s^0 und den Spin-Orbit-Torque T^0 . Da $C_{2\zeta}$ eine Symmetrie ist, gilt $E_{vs}(\mathbf{k}) = E_{vs}(R(C_{2\zeta})\mathbf{k})$ und folglich $f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) = R(C_{2\zeta})f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) = f^0(E_{vs}(R(C_{2\zeta})\mathbf{k}))$.

Tabelle C.0.2.: Transformationsverhalten verschiedener Größen A unter der Symmetrie $C_{2\zeta}$, wobei $\zeta \in \{x, y, z\}$ über $\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\boldsymbol{\zeta}}$ definiert ist. Ferner ist das zugehörige Signum $\text{sgn}_{C_{2\zeta}}(A)$ dargestellt, das über $R(C_{2\zeta})A = \text{sgn}_{C_{2\zeta}}(A)A$ definiert ist. Ferner sei $\mathbf{k}' := R(C_{2\zeta})\mathbf{k}$

(a) $\zeta = x$						
A	$S_{vs}^x(\mathbf{k})$	$S_{vs}^y(\mathbf{k})$	$S_{vs}^z(\mathbf{k})$	$T_{vs}^x(\mathbf{k})$	$T_{vs}^y(\mathbf{k})$	$T_{vs}^z(\mathbf{k})$
$R(C_{2\zeta})A$	$S_{vs}^x(\mathbf{k}')$	$-S_{vs}^y(\mathbf{k}')$	$-S_{vs}^z(\mathbf{k}')$	$T_{vs}^x(\mathbf{k}')$	$-T_{vs}^y(\mathbf{k}')$	$-T_{vs}^z(\mathbf{k}')$
$\text{sgn}_{C_{2\zeta}}(A)$	+1	-1	-1	+1	-1	-1
(b) $\zeta = y$						
A	$S_{vs}^x(\mathbf{k})$	$S_{vs}^y(\mathbf{k})$	$S_{vs}^z(\mathbf{k})$	$T_{vs}^x(\mathbf{k})$	$T_{vs}^y(\mathbf{k})$	$T_{vs}^z(\mathbf{k})$
$R(C_{2\zeta})A$	$-S_{vs}^x(\mathbf{k}')$	$S_{vs}^y(\mathbf{k}')$	$-S_{vs}^z(\mathbf{k}')$	$-T_{vs}^x(\mathbf{k}')$	$T_{vs}^y(\mathbf{k}')$	$-T_{vs}^z(\mathbf{k}')$
$\text{sgn}_{C_{2\zeta}}(A)$	-1	+1	-1	-1	+1	-1
(c) $\zeta = z$						
A	$S_{vs}^x(\mathbf{k})$	$S_{vs}^y(\mathbf{k})$	$S_{vs}^z(\mathbf{k})$	$T_{vs}^x(\mathbf{k})$	$T_{vs}^y(\mathbf{k})$	$T_{vs}^z(\mathbf{k})$
$R(C_{2\zeta})A$	$-S_{vs}^x(\mathbf{k}')$	$-S_{vs}^y(\mathbf{k}')$	$S_{vs}^z(\mathbf{k}')$	$-T_{vs}^x(\mathbf{k}')$	$-T_{vs}^y(\mathbf{k}')$	$T_{vs}^z(\mathbf{k}')$
$\text{sgn}_{C_{2\zeta}}(A)$	-1	-1	+1	-1	-1	+1

Da $C_{2\zeta}$ eine Symmetrie des Systems ist gilt einerseits

$$R(C_{2\zeta})A^{0\alpha_1\cdots\alpha_n} = A^{0\alpha_1\cdots\alpha_n}, \qquad (\text{C.10})$$

während andererseits

$$R(C_{2\bar{\zeta}})A^{0\alpha_1\cdots\alpha_n} \quad (C.11)$$

$$= R(C_{2\bar{\zeta}}) \sum_{kvs} \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) \quad (C.12)$$

$$= \sum_{R(C_{2\bar{\zeta}})kvs} R(C_{2\bar{\zeta}}) \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k}) R(C_{2\bar{\zeta}}) f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) \quad (C.13)$$

$$= \sum_{R(C_{2\bar{\zeta}})kvs} \text{sgn}_{C_{2\bar{\zeta}}}(\mathring{A}_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k})) \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(R(C_{2\bar{\zeta}})\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(R(C_{2\bar{\zeta}})\mathbf{k})) \quad (C.14)$$

$$= \text{sgn}_{C_{2\bar{\zeta}}}(\mathring{A}_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k})) \sum_{R(C_{2\bar{\zeta}})kvs} \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(R(C_{2\bar{\zeta}})\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(R(C_{2\bar{\zeta}})\mathbf{k})) \quad (C.15)$$

$$= \text{sgn}_{C_{2\bar{\zeta}}}(\mathring{A}_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k})) A^{0\alpha_1\cdots\alpha_n}, \quad (C.16)$$

gilt, sodass für $\text{sgn}_{C_{2\bar{\zeta}}}(\mathring{A}_{vs}^{\alpha_1\cdots\alpha_n}(\mathbf{k})) = -1$ unmittelbar

$$A^{0\alpha_1\cdots\alpha_n} = 0 \quad (C.17)$$

folgt. Für $\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$, d.h. $\bar{\zeta} = y$ gelten unter Verwendung der Signum aus Tabelle C.0.3 (b)

$$s^{0x} = 0, \quad s^{0z} = 0, \quad T^{0x} = 0, \quad \text{und} \quad T^{0z} = 0, \quad (C.18)$$

und für $\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$, d.h. $\bar{\zeta} = z$ gelten unter Verwendung der Signum aus Tabelle C.0.3 (c)

$$s^{0x} = 0, \quad s^{0y} = 0, \quad T^{0x} = 0, \quad \text{und} \quad T^{0y} = 0. \quad (C.19)$$

Die Größen $s^{0\bar{\zeta}}$ und $T^{0\bar{\zeta}}$ unterliegen durch die Symmetrie $C_{2\bar{\zeta}}$ keinerlei Einschränkungen. Da jedoch kollinearer Magnetismus betrachtet wird, verschwindet der Erwartungswert des Torques in $\bar{\zeta}$ -Richtung $T_{vs}^{\bar{\zeta}}(\mathbf{k})$ für alle Zustände kvs identisch. Somit verschwindet auch die Größe $T^{0\bar{\zeta}}$. Nur $s^{0\bar{\zeta}}$ stellt bis auf Vorfaktoren das magnetische Moment dar und hat somit eine direkte physikalische Bedeutung. Ausgehend von Gleichung (2.46)

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = -\frac{\mu_B}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Sp} \left(\beta \Sigma \text{Im} \left(\mathring{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) \right) \right) f^0(E, T) \quad (C.20)$$

gilt mit $-\frac{1}{\pi} \text{Im} \left(\mathring{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; E) \right) = \sum_{kvs} \mathring{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \mathring{\psi}_{kvs}^\dagger(\mathbf{r}; E) \delta(E - E_{vs}(\mathbf{k}))$

$$= \mu_B \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Sp} \left(\beta \Sigma \sum_{kvs} \mathring{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \mathring{\psi}_{kvs}^\dagger(\mathbf{r}; E) \delta(E - E_{vs}(\mathbf{k})) \right) f^0(E, T) \quad (C.21)$$

zyklisches Vertauschen unter der Spur liefert

$$= \mu_B \sum_{kvs} \int_{-\infty}^{\infty} dE \text{Sp} \left(\mathring{\psi}_{kvs}^\dagger(\mathbf{r}; E) \beta \Sigma \mathring{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \right) \delta(E - E_{vs}(\mathbf{k})) f^0(E, T) \quad (C.22)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \mathbf{S}_{kvs}(\mathbf{r}; E) &:= \dot{\psi}_{kvs}^\dagger(\mathbf{r}; E) \beta \Sigma \dot{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \\ &= \mu_B \sum_{kvs} \int_{-\infty}^{\infty} dE \mathbf{S}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \delta(E - E_{vs}(\mathbf{k})) f^0(E, T) \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

$$= \mu_B \sum_{kvs} \mathbf{S}_{kvs}(\mathbf{r}; E_{vs}(\mathbf{k})) f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) \quad (\text{C.24})$$

und somit für das integrierte magnetische Moment

$$\mathbf{m} = \int_{\mathfrak{V}} d\mathbf{r} \mathbf{m}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.25})$$

$$= \mu_B \sum_{kvs} \int_{\mathfrak{V}} d\mathbf{r} \mathbf{S}_{kvs}(\mathbf{r}; E_{vs}(\mathbf{k})) f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) \quad (\text{C.26})$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \mathbf{S}_{vs}(\mathbf{k}) &:= \mathbf{S}_{kvs}(E_{vs}(\mathbf{k})) := \int_{\mathfrak{V}} d\mathbf{r} \mathbf{S}_{kvs}(\mathbf{r}; E_{vs}(\mathbf{k})) \\ &= \mu_B \sum_{kvs} \mathbf{S}_{vs}(\mathbf{k}) f^0(E_{vs}(\mathbf{k})) \end{aligned} \quad (\text{C.27})$$

mit Gleichung (C.3) schließlich

$$= \mu_B \mathbf{s}^0. \quad (\text{C.28})$$

D. Transformationsverhalten der mittleren freien Weglänge

D.1. Transformationsverhalten der mittleren freien Weglänge unter Rauminversion

Die betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten besitzen als ungestörtes System Rauminversionssymmetrie \mathcal{I} , d.h. es gilt

$$R(\mathcal{I})\mathring{\mathcal{U}}(\mathbf{r}) = \mathring{\mathcal{U}}(-\mathbf{r}) = \mathring{\mathcal{U}}(\mathbf{r}), \quad (\text{D.1})$$

sodass

$$R(\mathcal{I})\mathring{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) = \mathring{\psi}_{-kvs}(-\mathbf{r}; E) = \mathring{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \quad (\text{D.2})$$

gilt. Der Defekt ist am Ort eines Basisatoms positioniert. Da das ungestörte System Rauminversionssymmetrie besitzt, bleibt das gestörte Potential unverändert, sofern Ortsvektor zum Potential \mathbf{r} und Ortsvektor des Defekts \mathbf{r}_0 durch ihr inversionssymmetrisches ausgetauscht werden. Es gilt somit

$$R(\mathcal{I})\mathcal{U}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) = \mathcal{U}(-\mathbf{r}; -\mathbf{r}_0) = \mathcal{U}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) \quad (\text{D.3})$$

Die Lippmann-Schwinger-Gleichung aus Gleichung (2.101) ist in globalen Koordinaten durch

$$\begin{aligned} \psi_{kvs}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) &= \mathring{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \\ &+ \int_{\mathfrak{R}^3} d\mathbf{r}' \mathring{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \left[U(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) - \mathring{U}(\mathbf{r}) \right] \psi_{kvs}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

gegeben, die sich für $n > 0$ durch

$$\begin{aligned} \psi_{kvs}^{(n+1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) &= \mathring{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \\ &+ \int_{\mathfrak{R}^3} d\mathbf{r}' \mathring{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \left[U(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0) - \mathring{U}(\mathbf{r}') \right] \psi_{kvs}^{(n)}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0; E) \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

iterativ lösen lässt. Hierbei wird

$$\psi_{kvs}^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) := \mathring{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \quad (\text{D.6})$$

gewählt, wobei

$$R(\mathcal{I})\psi_{kvs}^{(n)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) = \psi_{-kvs}^{(n)}(-\mathbf{r}; -\mathbf{r}_0; E) \quad (\text{D.7})$$

für alle $n \in \mathbb{N}_0$ gilt. Mit Gleichung (D.6) folgt zunächst aus Gleichung (D.2)

$$R(\mathcal{I})\psi_{kvs}^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) = R(\mathcal{I})\overset{\circ}{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) = \overset{\circ}{\psi}_{-kvs}(-\mathbf{r}; E) = \psi_{-kvs}^{(0)}(-\mathbf{r}; -\mathbf{r}_0; E) \quad (\text{D.8})$$

Für $n > 0$ gilt somit mit der Induktionsvoraussetzung

$$R(\mathcal{I})\psi_{kvs}^{(n)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) = \psi_{-kvs}^{(n)}(-\mathbf{r}; -\mathbf{r}_0; E) = \psi_{kvs}^{(n)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) \quad (\text{D.9})$$

nunmehr

$$\begin{aligned} R(\mathcal{I})\psi_{kvs}^{(n+1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) &= R(\mathcal{I}) \left(\overset{\circ}{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \right. \\ &\quad \left. + \int_{\mathfrak{R}} d\mathbf{r}' \overset{\circ}{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \left[U(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0) - \overset{\circ}{U}(\mathbf{r}') \right] \psi_{kvs}^{(n)}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0; E) \right) \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

mit Gleichungen (D.1) bis (D.3) und (D.9) und mit $R(\mathcal{I})\overset{\circ}{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \overset{\circ}{G}(-\mathbf{r}, -\mathbf{r}'; E) = \overset{\circ}{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ unter Verwendung der Spektraldarstellung von $\overset{\circ}{G}$ folgt

$$\begin{aligned} &= \overset{\circ}{\psi}_{kvs}(\mathbf{r}; E) \\ &+ \int_{\mathfrak{R}} d\mathbf{r}' \overset{\circ}{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \left[U(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0) - \overset{\circ}{U}(-\mathbf{r}') \right] \psi_{kvs}^{(n)}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0; E) \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

$$= \psi_{kvs}^{(n+1)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E). \quad (\text{D.12})$$

Andererseits gilt mit Gleichung (D.7) schließlich

$$R(\mathcal{I})\psi_{kvs}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) = \psi_{-kvs}(-\mathbf{r}; -\mathbf{r}_0; E)\psi_{kvs}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E). \quad (\text{D.13})$$

Für das Verhalten der anisotropen Relaxationszeit und der mittleren freien Weglänge wird zunächst das Verhalten des Übergangsmatrixelementes aus Gleichung (2.126) betrachtet. Hierbei gilt zunächst

$$R(\mathcal{I})T_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0) = T_{-k'v's' \rightarrow -kvs}(-\mathbf{r}_0) \quad (\text{D.14})$$

und andererseits

$$R(\mathcal{I})T_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0) \quad (\text{D.15})$$

$$= R(\mathcal{I}) \left(\int_{\mathfrak{R}} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{\psi}_{k'v's'}(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \left[\mathfrak{L}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) - \overset{\circ}{\mathfrak{L}}(\mathbf{r}) \right] \psi_{kvs}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) \right) \quad (\text{D.16})$$

mit Gleichungen (D.1) bis (D.3) und (D.13)

$$= \int_{\mathfrak{R}^3} d\mathbf{r} \left(\overset{\circ}{\psi}_{k'v's'}(\mathbf{r}; E) \right)^\dagger \left[\mathfrak{L}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) - \overset{\circ}{\mathfrak{L}}(\mathbf{r}) \right] \psi_{kvs}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; E) \quad (\text{D.17})$$

$$= T_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0), \quad (\text{D.18})$$

sodass

$$R(\mathcal{I})T_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0) = T_{-k'v's' \rightarrow -kvs}(-\mathbf{r}_0)T_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0) \quad (\text{D.19})$$

gilt. Entsprechend folgt für das Übergangsmatrixelement aus Gleichung (2.128) unmittelbar

$$R(\mathcal{I})P_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0) = P_{-k'v's' \rightarrow -kvs}(-\mathbf{r}_0) = P_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0). \quad (\text{D.20})$$

Für die anisotrope Relaxationszeit definiert in Gleichung (2.139) gilt einerseits

$$R(\mathcal{I})\tau_{vs}^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) = \tau_{vs}^{-1}(-\mathbf{k}; -\mathbf{r}_0) \quad (\text{D.21})$$

und andererseits

$$R(\mathcal{I})\tau_{vs}^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) = R(\mathcal{I}) \left(\sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0) \right) \quad (\text{D.22})$$

$$= \sum_{-k'v's'} P_{-k'v's' \rightarrow -kvs}(-\mathbf{r}_0) \quad (\text{D.23})$$

und mit Gleichung (D.20) und mit $\sum_k A_k = \sum_{-k} A_{-k}$ für beliebige Größen A_k

$$= \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0) \quad (\text{D.24})$$

$$= \tau_{vs}^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0), \quad (\text{D.25})$$

sodass

$$R(\mathcal{I})\tau_{vs}^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) = \tau_{vs}^{-1}(-\mathbf{k}; -\mathbf{r}_0) = \tau_{vs}^{-1}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) \quad (\text{D.26})$$

gilt. Unter Verwendung der Iterationsvorschrift für die mittlere freie Weglänge in Gleichung (2.140) kann ihr Verhalten unter Rauminversion bestimmt werden. Für die Geschwindigkeit gilt zunächst

$$R(\mathcal{I})v_{vs}(\mathbf{k}) = -v_{vs}(-\mathbf{k}) = v_{vs}(\mathbf{k}) \quad (\text{D.27})$$

wegen der vorliegenden Rauminversionssymmetrie. Die Beziehung für die mittlere freie Weglänge

$$R(\mathcal{I})\Lambda_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) = -\Lambda_{vs}(-\mathbf{k}; -\mathbf{r}_0) = \Lambda_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) \quad (\text{D.28})$$

bzw.

$$R(\mathcal{I})\Lambda_{vs}^{(n)}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) = -\Lambda_{vs}^{(n)}(-\mathbf{k}; -\mathbf{r}_0) = \Lambda_{vs}^{(n)}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) \quad (\text{D.29})$$

wird mittels vollständiger Induktion nach n bewiesen. Für $n = 0$ gilt für die mittlere freie Weglänge

$$R(\mathcal{I})\Lambda_{vs}^{(0)}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) = R(\mathcal{I})(\tau_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0)\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k})) \quad (\text{D.30})$$

mit Gleichungen (D.26) und (D.27)

$$= \tau_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0)\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) \quad (\text{D.31})$$

$$= \Lambda_{vs}^{(0)}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) \quad (\text{D.32})$$

und somit ist Gleichung (D.29) für $n = 0$ bewiesen, und stellt somit den Induktionsanfang dar. Gelte nun Gleichung (D.29) für alle $n \leq n_0$, so gilt nun

$$R(\mathcal{I})\Lambda_{vs}^{(n+1)}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) \quad (\text{D.33})$$

$$= R(\mathcal{I})\left(\tau_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0)\left[\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) + \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}(\mathbf{r}_0)\Lambda_{vs}^{(n)}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0)\right]\right) \quad (\text{D.34})$$

mit Gleichungen (D.26), (D.27) und (D.29)

$$= \tau(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0)\left[\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) + \sum_{k'} P_{k'v's' \rightarrow -kvs}(\mathbf{r}_0)\left(\Lambda_{vs}^{(n)}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0)\right)\right] \quad (\text{D.35})$$

$$= \Lambda_{vs}^{(n+1)}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) \quad (\text{D.36})$$

Die Gleichung (D.29) gilt für alle $n \in \mathbb{N}_0$ und somit gilt im Allgemeinen

$$R(\mathcal{I})\Lambda_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0) = -\Lambda_{vs}(-\mathbf{k}; -\mathbf{r}_0) = \Lambda_{vs}(\mathbf{k}; \mathbf{r}_0). \quad (\text{D.37})$$

D.2. Transformationsverhalten der mittleren freien Weglänge unter Zeitumkehr

Die Übergangswahrscheinlichkeit wird entsprechend

$$P_{kvs \rightarrow k'v's'} = P_{kvs \rightarrow k'v's'}^+ + P_{kvs \rightarrow k'v's'}^- \quad (\text{D.38})$$

in einen symmetrischen und in einen antisymmetrischen Anteil zerlegt, wobei

$$P_{kvs \rightarrow k'v's'}^\pm = \frac{1}{2}(P_{kvs \rightarrow k'v's'} \pm P_{k'v's' \rightarrow kvs}) \quad (\text{D.39})$$

ist und somit

$$P_{kvs \rightarrow k'v's'}^\pm = \pm P_{k'v's' \rightarrow kvs}^\pm \quad (\text{D.40})$$

gilt. Die anisotrope Relaxationszeit in Gleichung (2.139) zerfällt mit Gleichung (D.38) in

$$\tau_{vs}^{-1}(\mathbf{k}) = (\tau_{vs}^+(\mathbf{k}))^{-1} + (\tau_{vs}^-(\mathbf{k}))^{-1} \quad (\text{D.41})$$

mit

$$(\tau_{vs}^\pm(\mathbf{k}))^{-1} := \sum_{k'v's'} P_{kvs \rightarrow k'v's'}^\pm. \quad (\text{D.42})$$

In niedrigster Ordnung, d.h. in Bornscher Näherung gilt

$$P_{kvs \rightarrow k'v's'}^+ = P_{kvs \rightarrow k'v's'} \quad \text{bzw.} \quad P_{kvs \rightarrow k'v's'}^- = 0, \quad (\text{D.43})$$

d.h. das der antisymmetrische Anteil der Übergangswahrscheinlichkeit für alle Übergänge verschwindet. Berücksichtigt man alle höheren Ordnungen so gilt zwar im Allgemeinen $P_{kvs \rightarrow k'v's'}^- \neq 0$, jedoch ist die Annahme

$$\sum_{k'v's'} |P_{kvs \rightarrow k'v's'}^+| \gg \sum_{k'v's'} |P_{kvs \rightarrow k'v's'}^-|, \quad (\text{D.44})$$

im Allgemeinen gerechtfertigt. Für die Größen $(\tau_{vs}^\pm(\mathbf{k}))^{-1}$ bzw. $\tau_{vs}^\pm(\mathbf{k})$ gilt somit

$$\left| (\tau_{vs}^-(\mathbf{k}))^{-1} \right| \ll \left| (\tau_{vs}^+(\mathbf{k}))^{-1} \right| \quad \text{bzw.} \quad |\tau_{vs}^-(\mathbf{k})| \gg |\tau_{vs}^+(\mathbf{k})| \Leftrightarrow 1 \gg \left| \frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})} \right|. \quad (\text{D.45})$$

Die anisotrope Relaxationszeit lässt sich entsprechend durch

$$\tau_{vs}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(\tau_{vs}^+(\mathbf{k}))^{-1} + (\tau_{vs}^-(\mathbf{k}))^{-1}} \quad (\text{D.46})$$

$$= \frac{1}{(\tau_{vs}^+(\mathbf{k}))^{-1}} \frac{1}{1 + \frac{(\tau_{vs}^-(\mathbf{k}))^{-1}}{(\tau_{vs}^+(\mathbf{k}))^{-1}}} \quad (\text{D.47})$$

$$= \tau_{vs}^+(\mathbf{k}) \frac{1}{1 + \frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})}} \quad (\text{D.48})$$

mit Gleichung (D.45) gilt wegen $\frac{1}{1+q} = \sum_{n=0}^{\infty} (-q)^n$ für $|q| < 1$

$$= \tau_{vs}^+(\mathbf{k}) \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})} \right)^n \quad (\text{D.49})$$

$$= \tau_{vs}^+(\mathbf{k}) \left[\sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})} \right)^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})} \right)^{2n+1} \right] \quad (\text{D.50})$$

mit $F_{vs}(\mathbf{k}) := \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})} \right)^{2n}$

$$= \tau_{vs}^+(\mathbf{k}) \left[F_{vs}(\mathbf{k}) - \frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})} F_{vs}(\mathbf{k}) \right] \quad (\text{D.51})$$

$$= \tau_{vs}^+(\mathbf{k}) F_{vs}(\mathbf{k}) - \tau_{vs}^+(\mathbf{k}) \frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})} F_{vs}(\mathbf{k}) \quad (\text{D.52})$$

darstellen. Unter Zeitumkehr gilt

$$R(\mathcal{T}) P_{kvs \rightarrow k'v's'} = P_{-k'v'-s' \rightarrow -kv-s}, \quad (\text{D.53})$$

und somit

$$R(\mathcal{T}) P_{kvs \rightarrow k'v's'}^{\pm} = P_{-k'v'-s' \rightarrow -kv-s}^{\pm} = \pm P_{-kv-s \rightarrow -k'v'-s'}^{\pm} \quad (\text{D.54})$$

sodass

$$R(\mathcal{T}) \tau_{vs}^{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \tau_{v-s}^{\pm}(-\mathbf{k}) \quad \text{und somit} \quad R(\mathcal{T}) F_{vs}(\mathbf{k}) = F_{v-s}(-\mathbf{k}) \quad (\text{D.55})$$

gilt. Für die anisotrope Relaxationszeit $\tau_{vs}(\mathbf{k})$ folgt

$$R(\mathcal{T}) \tau_{vs}(\mathbf{k}) = R(\mathcal{T}) \left(\tau_{vs}^+(\mathbf{k}) F_{vs}(\mathbf{k}) - \tau_{vs}^+(\mathbf{k}) \frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})} F_{vs}(\mathbf{k}) \right) \quad (\text{D.56})$$

$$= \tau_{v-s}^+(-\mathbf{k}) F_{v-s}(-\mathbf{k}) + \tau_{v-s}^+(-\mathbf{k}) \frac{\tau_{v-s}^+(-\mathbf{k})}{\tau_{v-s}^-(-\mathbf{k})} F_{v-s}(-\mathbf{k}), \quad (\text{D.57})$$

wobei wegen

$$R(\mathcal{T}) (\tau_{vs}^+(\mathbf{k}) F_{vs}(\mathbf{k})) = \tau_{v-s}^+(-\mathbf{k}) F_{v-s}(-\mathbf{k}) \quad (\text{D.58})$$

und

$$R(\mathcal{T}) \left(-\tau_{vs}^+(\mathbf{k}) \frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})} F_{vs}(\mathbf{k}) \right) = \tau_{v-s}^+(-\mathbf{k}) \frac{\tau_{v-s}^+(-\mathbf{k})}{\tau_{v-s}^-(-\mathbf{k})} F_{v-s}(-\mathbf{k}) \quad (\text{D.59})$$

die Größen

$$\tau_{vs}^G(\mathbf{k}) := \tau_{vs}^+(\mathbf{k}) F_{vs}(\mathbf{k}) \quad \text{und} \quad \tau_{vs}^U(\mathbf{k}) := -\tau_{vs}^+(\mathbf{k}) \frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})} F_{vs}(\mathbf{k}) \quad (\text{D.60})$$

den unter Zeitumkehr geraden Anteil der Relaxationszeit bzw. den unter Zeitumkehr ungeraden Anteil der Relaxationszeit bezeichnen. Die mittlere freie Weglänge in nullter Näherung, d.h. in der Näherung anisotroper Relaxationszeit, ist durch

$$\Lambda_{vs}^{(0)}(\mathbf{k}) = \tau_{vs}(\mathbf{k}) v_{vs}(\mathbf{k}) = \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) v_{vs}(\mathbf{k}) + \tau_{vs}^U(\mathbf{k}) v_{vs}(\mathbf{k}) \quad (\text{D.61})$$

gegeben. Diese transformiert sich unter Zeitumkehr zu

$$R(\mathcal{T})\Lambda_{vs}^{(0)}(\mathbf{k}) = R(\mathcal{T}) \left(\tau_{vs}^G(\mathbf{k})\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) + \tau_{vs}^U(\mathbf{k})\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) \right) \quad (\text{D.62})$$

$$= \tau_{v-s}^G(-\mathbf{k})(-\mathbf{v}_{v-s}(-\mathbf{k})) - \tau_{v-s}^U(-\mathbf{k})(-\mathbf{v}_{v-s}(-\mathbf{k})) \quad (\text{D.63})$$

sodass die Größen

$$\Lambda_{vs}^{(0)G}(\mathbf{k}) := \tau_{vs}^U(\mathbf{k})\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) \quad \text{und} \quad \Lambda_{vs}^{(0)U}(\mathbf{k}) := \tau_{vs}^G(\mathbf{k})\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) \quad (\text{D.64})$$

als den unter Zeitumkehr geraden Anteil bzw. den unter Zeitumkehr ungeraden Anteil der mittleren freien Weglänge bezeichnet werden.

Für die erste Näherung der mittleren freien Weglänge

$$\Lambda_{vs}^{(1)}(\mathbf{k}) = \tau_{vs}(\mathbf{k}) \left[\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) + \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs} \Lambda_{vs}^{(0)}(\mathbf{k}') \right] \quad (\text{D.65})$$

lassen sich in gleicher Weise den unter Zeitumkehr geraden und ungeraden Anteil der mittleren freien Weglänge bestimmen. Dies ist aufwendig und länglich. Stattdessen wird die anisotrope Relaxationszeit in der Näherung $1 + \mathcal{O}\left(\frac{\tau_{vs}^+(\mathbf{k})}{\tau_{vs}^-(\mathbf{k})}\right) \approx 1$ wegen Gleichung (D.45) betrachtet, sodass

$$\tau_{vs}(\mathbf{k}) \approx \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \quad \text{und} \quad \Lambda_{vs}^{(0)}(\mathbf{k}) \approx \Lambda_{vs}^{(0)U}(\mathbf{k}) =: \tilde{\Lambda}_{vs}^{(0)U}(\mathbf{k}) \quad (\text{D.66})$$

gilt. Für die Übergangswahrscheinlichkeit gilt weiterhin Gleichung (D.38). Für Gleichung (D.65) gilt

$$\Lambda_{vs}^{(1)}(\mathbf{k}) \quad (\text{D.67})$$

$$\approx \tilde{\Lambda}_{vs}^{(1)}(\mathbf{k}) \quad (\text{D.68})$$

$$= \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \left[\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) + \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}^+ \tau_{v's'}^G(\mathbf{k}')\mathbf{v}_{v's'}(\mathbf{k}') + \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}^- \tau_{v's'}^G(\mathbf{k}')\mathbf{v}_{v's'}(\mathbf{k}') \right] \quad (\text{D.69})$$

$$= \Lambda_{vs}^{(0)U}(\mathbf{k}) + \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}^+ \Lambda_{v's'}^{(0)U}(\mathbf{k}') + \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}^- \Lambda_{v's'}^{(0)U}(\mathbf{k}') \quad (\text{D.70})$$

Wegen

$$R(\mathcal{T}) \left(\Lambda_{vs}^{(0)U}(\mathbf{k}) + \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}^+ \Lambda_{v's'}^{(0)U}(\mathbf{k}') \right) \quad (D.71)$$

$$= -\Lambda_{v-s}^{(0)U}(-\mathbf{k}) + \tau_{v-s}^G(-\mathbf{k}) \sum_{-k'v'-s'} P_{-k'v'-s' \rightarrow -k'v'-s'}^+ (-\Lambda_{v'-s'}^{(0)U}(-\mathbf{k}')) \quad (D.72)$$

$$= - \left(\Lambda_{v-s}^{(0)U}(-\mathbf{k}) + \tau_{v-s}^G(-\mathbf{k}) \sum_{-k'v'-s'} P_{-k'v'-s' \rightarrow -k'v'-s'}^+ \Lambda_{v'-s'}^{(0)U}(-\mathbf{k}') \right) \quad (D.73)$$

und

$$R(\mathcal{T}) \left(\tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}^- \Lambda_{v's'}^{(0)U}(\mathbf{k}') \right) \quad (D.74)$$

$$= \tau_{v-s}^G(-\mathbf{k}) \sum_{-k'v'-s'} P_{-k'v'-s' \rightarrow -k'v'-s'}^- (-\Lambda_{v'-s'}^{(0)U}(-\mathbf{k}')) \quad (D.75)$$

$$= \tau_{v-s}^G(-\mathbf{k}) \sum_{-k'v'-s'} P_{-k'v'-s' \rightarrow -k'v'-s'}^- \Lambda_{v'-s'}^{(0)U}(-\mathbf{k}') \quad (D.76)$$

werden

$$\tilde{\Lambda}_{vs}^{(1)G}(\mathbf{k}) := \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}^- \Lambda_{v's'}^{(0)U}(\mathbf{k}') \quad (D.77)$$

$$\tilde{\Lambda}_{vs}^{(1)U}(\mathbf{k}) := \Lambda_{vs}^{(0)U}(\mathbf{k}) + \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}^+ \Lambda_{v's'}^{(0)U}(\mathbf{k}') \quad (D.78)$$

als der unter Zeitumkehr gerade Anteil bzw. als der unter Zeitumkehr ungerade Anteil der mittleren freien Weglänge bezeichnet. Allgemein kann man zeigen, dass der gerade Anteil der mittleren freien Weglänge verschwindet, falls der antisymmetrische Anteil identisch Null ist. Sei $P_{kvs \rightarrow k'v's'}^- = 0$ für alle Übergänge. Dann gilt nach Gleichung (D.42) $(\tau_{vs}^-(\mathbf{k}))^{-1} = 0$ für alle Zustände, und mit Gleichung (D.52) folgt $\tau_{vs}(\mathbf{k}) = \tau_{vs}^+(\mathbf{k})$ wegen $F_{vs}(\mathbf{k}) = 1$. Mit Gleichung (D.60) und Gleichung (D.64) ist nun

$$\Lambda_{vs}^{(0)}(\mathbf{k}) = \Lambda_{vs}^{(0)U}(\mathbf{k}). \quad (D.79)$$

Gelte nun für alle $m \leq n$

$$R(\mathcal{T})\Lambda_{vs}^{(m)}(\mathbf{k}) = -\Lambda_{v-s}^{(m)}(-\mathbf{k}) \quad \text{bzw.} \quad \Lambda_{vs}^{(m)}(\mathbf{k}) = \Lambda_{vs}^{(m)U}(\mathbf{k}), \quad (D.80)$$

dann transformiert sich für $n+1$ die mittlere freie Weglänge

$$\Lambda_{vs}^{(n+1)}(\mathbf{k}) = \tau_{vs}(\mathbf{k}) \left[v_{vs}(\mathbf{k}) + \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs} \Lambda_{vs}^{(n)}(\mathbf{k}) \right] \quad (D.81)$$

$$= \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \left[v_{vs}(\mathbf{k}) + \sum_{k'v's'} P_{k'v's' \rightarrow kvs}^+ \Lambda_{vs}^{(n)U}(\mathbf{k}) \right] \quad (D.82)$$

unter Zeitumkehr zu

$$R(\mathcal{T})\Lambda_{vs}^{(n+1)}(\mathbf{k}) \quad (D.83)$$

$$= R(\mathcal{T}) \left(\tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \left[\mathbf{v}_{vs}(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'v's'} P_{\mathbf{k}'v's' \rightarrow \mathbf{k}vs}^+ \Lambda_{vs}^{(n)U}(\mathbf{k}') \right] \right) \quad (D.84)$$

$$= \tau_{v-s}^G(-\mathbf{k}) \left[-\mathbf{v}_{v-s}(-\mathbf{k}) + \sum_{-\mathbf{k}'v'-s'} P_{-\mathbf{k}'v'-s' \rightarrow \mathbf{k}'v'-s'}^+ (-\Lambda_{v-s}^{(n)U}(-\mathbf{k}')) \right] \quad (D.85)$$

$$= - \left(\tau_{v-s}^G(-\mathbf{k}) \left[\mathbf{v}_{v-s}(-\mathbf{k}) + \sum_{-\mathbf{k}'v'-s'} P_{-\mathbf{k}'v'-s' \rightarrow -\mathbf{k}v-s}^+ \Lambda_{v-s}^{(n)U}(-\mathbf{k}') \right] \right) \quad (D.86)$$

$$= -\Lambda_{v-s}^{(n+1)}(-\mathbf{k}) \quad (D.87)$$

sodass

$$\Lambda_{vs}^{(n+1)}(\mathbf{k}) = \Lambda_{vs}^{(n+1)U}(\mathbf{k}) \quad (D.88)$$

gilt. Somit gilt

$$R(\mathcal{T})\Lambda_{vs}(\mathbf{k}) = -\Lambda_{v-s}(-\mathbf{k}) \quad \text{bzw.} \quad \Lambda_{vs}(\mathbf{k}) = \Lambda_{vs}^U(\mathbf{k}) \quad \text{bzw.} \quad \Lambda_{vs}^G(\mathbf{k}) = 0. \quad (D.89)$$

Naherungsweise Darstellung der anomalen Hall-Leitfahigkeit

Die anomale Hall-Leitfahigkeit $\sigma_{\alpha\beta}^{\text{AHE}}$, ist unter Verwendung von Gleichungen (2.149) und (3.9) durch

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{AHE}} = \zeta_{\hat{\sigma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \frac{v_{vs}^\alpha(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{G\beta}(\mathbf{k}) - v_{vs}^\beta(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{G\alpha}(\mathbf{k})}{2} \quad (D.90)$$

gegeben. Die anomale Hall-Leitfahigkeit in Gleichung (D.90) kann mit der Naherung $\Lambda_{vs}^G(\mathbf{k}) \approx \tilde{\Lambda}_{vs}^G(\mathbf{k})$ zu

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\text{AHE}} \approx \zeta_{\hat{\sigma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \frac{v_{vs}^\alpha(\mathbf{k}) \tilde{\Lambda}_{vs}^{(1)G\beta}(\mathbf{k}) - v_{vs}^\beta(\mathbf{k}) \tilde{\Lambda}_{vs}^{(1)G\alpha}(\mathbf{k})}{2} \quad (D.91)$$

bestimmt werden, die mit Gleichung (D.77) zu

$$= \zeta_{\hat{\sigma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \left[\frac{v_{vs}^\alpha(\mathbf{k}) \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}'v's'} P_{\mathbf{k}'v's' \rightarrow \mathbf{k}vs}^- \Lambda_{v's'}^{(0)U\beta}(\mathbf{k}')}{2} - \frac{v_{vs}^\beta(\mathbf{k}) \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}'v's'} P_{\mathbf{k}'v's' \rightarrow \mathbf{k}vs}^- \Lambda_{v's'}^{(0)U\alpha}(\mathbf{k}')}{2} \right] \quad (D.92)$$

vereinfacht werden kann. Mit Gleichung (D.40) folgt

$$= \zeta_{\hat{\sigma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} v_{vs}^\alpha(\mathbf{k}) \tau_{vs}^G(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}'v's'} P_{\mathbf{k}'v's' \rightarrow \mathbf{k}vs}^- \Lambda_{v's'}^{(0)U\beta}(\mathbf{k}') \quad (D.93)$$

und schließlich gilt mit Gleichung (D.66)

$$= \tilde{\zeta}_{\hat{\sigma}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \sum_{\mathbf{k}'v's'} P_{\mathbf{k}'v's' \rightarrow \mathbf{k}vs}^- \tau_{vs}(\mathbf{k}) \tau_{v's'}(\mathbf{k}') v_{vs}^\alpha(\mathbf{k}) v_{v's'}^\beta(\mathbf{k}'). \quad (\text{D.94})$$

E. Transformationsverhalten von Tensoren

E.1. Transformationsverhalten von Tensoren unter Rauminversion

Ausgehend von

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta}(\eta_0) = -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \mathring{A}_{vs}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) \quad (\text{E.1})$$

gilt

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta}(-\eta_0) \quad (\text{E.2})$$

$$= -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \mathring{A}_{vs}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; -\eta_0) \quad (\text{E.3})$$

mit Gleichung (D.37) und $\mathring{A}_{vs}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\mathbf{k}) = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(\mathring{A}_{vs}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\mathbf{k})) \mathring{A}_{vs}^{-\eta \alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(-\mathbf{k})$

$$= -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(-\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(-\mathbf{k})} \text{sgn}_{\mathcal{I}}(\mathring{A}_{vs}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\mathbf{k})) \mathring{A}_{vs}^{-\eta \alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(-\mathbf{k}) \cdot (-\Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0)) \quad (\text{E.4})$$

$$= -\text{sgn}_{\mathcal{I}}(\mathring{A}_{vs}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\mathbf{k})) \cdot \left(-e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(-\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(-\mathbf{k})} \mathring{A}_{vs}^{-\eta \alpha_1 \dots \alpha_n}(-\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0) \right) \quad (\text{E.5})$$

$$= -\text{sgn}_{\mathcal{I}}(\mathring{A}_{vs}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\mathbf{k})) a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{-\eta}(\eta_0) \quad (\text{E.6})$$

$$= \begin{cases} -a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{-\eta}(\eta_0) & \text{für } \text{sgn}_{\mathcal{I}}(\mathring{A}_{vs}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\mathbf{k})) = +1 \\ a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{-\eta}(\eta_0) & \text{für } \text{sgn}_{\mathcal{I}}(\mathring{A}_{vs}^{\eta \alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\mathbf{k})) = -1 \end{cases} \quad (\text{E.7})$$

sodass wegen $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(J_{vs}^{\eta \alpha}(\mathbf{k})) = -1$ und $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(J_{vs}^{\eta \gamma \alpha}(\mathbf{k})) = -1$

$$\sigma_{\alpha\beta}^{\eta}(-\eta_0) = \sigma_{\alpha\beta}^{-\eta}(\eta_0) \quad \text{bzw.} \quad \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma \eta}(-\eta_0) = \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma -\eta}(\eta_0) \quad (\text{E.8})$$

gilt, und wegen $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(S_{vs}^{\eta \alpha}(\mathbf{k})) = +1$ und $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(T_{vs}^{\eta \gamma \alpha}(\mathbf{k})) = +1$

$$\chi_{\alpha\beta}^{\eta}(-\eta_0) = -\chi_{\alpha\beta}^{-\eta}(\eta_0) \quad \text{bzw.} \quad t_{\alpha\beta}^{\eta}(-\eta_0) = -t_{\alpha\beta}^{-\eta}(\eta_0) \quad (\text{E.9})$$

gilt. Für die integrierte Größe $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) = \sum_{\eta} a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta}(\eta_0)$ gilt

$$\sigma_{\alpha\beta}(-\eta_0) = \sigma_{\alpha\beta}(\eta_0) \qquad \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma}(-\eta_0) = \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma}(\eta_0) \qquad (\text{E.10})$$

$$\chi_{\alpha\beta}(-\eta_0) = -\chi_{\alpha\beta}(\eta_0) \qquad t_{\alpha\beta}(-\eta_0) = -t_{\alpha\beta}(\eta_0), \qquad (\text{E.11})$$

sodass die Graphen $(\eta_0, \sigma_{\alpha\beta}(\eta_0))$ und $(\eta_0, \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma}(\eta_0))$ für alle $\alpha, \beta, \gamma \in \{x, y, z\}$ sowohl achsensymmetrisch zur zentralen Lage der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 = 5$) als auch achsensymmetrisch zur zentralen Lage der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 = 13$) sind, während die Graphen $(\eta_0, \chi_{\alpha\beta}(\eta_0))$ und $(\eta_0, t_{\alpha\beta}(\eta_0))$ für alle $\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$ sowohl punktsymmetrisch zur zentralen Lage der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 = 5$) als auch punktsymmetrisch zur zentralen Lage der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 = 13$) sind.

E.2. Transformationsverhalten von Tensoren unter Zeitumkehr

Der Vektor der mittleren freien Weglänge $\Lambda_{vs}(\mathbf{k})$ lässt sich entsprechend

$$\Lambda_{vs}(\mathbf{k}) = \Lambda_{vs}^G(\mathbf{k}) + \Lambda_{vs}^U(\mathbf{k}) \qquad (\text{E.12})$$

in einen Anteil $\Lambda_{vs}^G(\mathbf{k})$, der **gerade** unter Zeitumkehr ist, und in einen Anteil $\Lambda_{vs}^U(\mathbf{k})$, der **ungerade** unter Zeitumkehr ist, zerlegen. Hierbei gelten

$$R(\mathcal{T})\Lambda_{vs}^G(\mathbf{k}) = \Lambda_{v-s}^G(-\mathbf{k}) \qquad \text{und} \qquad R(\mathcal{T})\Lambda_{vs}^U(\mathbf{k}) = -\Lambda_{v-s}^U(-\mathbf{k}). \qquad (\text{E.13})$$

Tabelle E.2.1.: Transformationsverhalten verschiedener Größen A unter Zeitumkehr \mathcal{T} und das zugehörige Signum $\text{sgn}_{\mathcal{T}}(A)$, das über $R(\mathcal{T})A = \text{sgn}_{\mathcal{T}}(A)A$ definiert ist.

A	r	t	\mathbf{k}	$J_{vs}(\mathbf{k})$	$J_{vs}^{\gamma}(\mathbf{k})$	$S_{vs}(\mathbf{k})$	$T_{vs}(\mathbf{k})$
$R(\mathcal{T})A$	r	$-t$	$-\mathbf{k}$	$-J_{v-s}(-\mathbf{k})$	$J_{v-s}^{\gamma}(-\mathbf{k})$	$-S_{v-s}(-\mathbf{k})$	$T_{v-s}(-\mathbf{k})$
$\text{sgn}_{\mathcal{T}}(A)$	+1	-1	-1	-1	+1	-1	+1

Zum Transformationsverhalten des Spins betrachte man die Definition des klassischen Bahndrehimpulses \mathbf{L} durch $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Wegen $R(\mathcal{T})\mathbf{r} = \mathbf{r}$ und $R(\mathcal{T})\mathbf{p} = -\mathbf{p}$, gilt $R(\mathcal{T})\mathbf{L} = -\mathbf{L}$. Entsprechend transformiert sich der Spin-Erwartungswert $R(\mathcal{T})S_{vs}(\mathbf{k}) = -S_{v-s}(-\mathbf{k})$. Für das Transformationsverhalten des Torque-Erwartungswertes betrachte man nun ein mechanisches Drehmoment $\mathbf{D} = \frac{d\mathbf{L}}{dt}$. Mit $R(\mathcal{T})\mathbf{L} = -\mathbf{L}$ und $\mathcal{T}t = -t$ gilt $R(\mathcal{T})\mathbf{D} = \mathbf{D}$. Entsprechend gilt $R(\mathcal{T})T_{vs}(\mathbf{k}) = T_{v-s}(-\mathbf{k})$.

Ausgehend von Gleichung (2.147) sind mit Gleichung (E.12) die Größen

$$a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\Lambda^G) := -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{G\beta}(\mathbf{k}) \qquad (\text{E.14})$$

$$a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\Lambda^U) := -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{U\beta}(\mathbf{k}) \qquad (\text{E.15})$$

definiert, wobei

$$a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} = a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(\Lambda^G) + a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(\Lambda^U) \quad (E.16)$$

gilt. Für $P \in \{G, U\}$ transformiert sich $a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(\Lambda^P)$ entsprechend

$$R(\mathcal{T})a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(\Lambda^P) \quad (E.17)$$

$$= R(\mathcal{T}) \left(-e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{v_s} \int_{S_{v_s}^F} \frac{dS_{v_s}(\mathbf{k})}{\hbar v_{v_s}(\mathbf{k})} \overset{\circ}{A}_{v_s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{v_s}^{P\beta}(\mathbf{k}) \right) \quad (E.18)$$

$$= -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{v-s} \int_{S_{v-s}^F} \frac{dS_{v-s}(-\mathbf{k})}{\hbar v_{v-s}(-\mathbf{k})} R(\mathcal{T}) \overset{\circ}{A}_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{k}) R(\mathcal{T}) \Lambda_{v-s}^{P\beta}(\mathbf{k}) \quad (E.19)$$

mit Gleichung (E.13) und $R(\mathcal{T})A_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{k}) = \text{sgn}_{\mathcal{T}}(A_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{k}))A_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(-\mathbf{k})$

$$= -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{v-s} \int_{S_{v-s}^F} \frac{dS_{v-s}(-\mathbf{k})}{\hbar v_{v-s}(-\mathbf{k})} \cdot \text{sgn}_{\mathcal{T}}(A_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{k}))A_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(-\mathbf{k}) \text{sgn}_{\mathcal{T}}(\Lambda_{v-s}^{P\beta}(\mathbf{k}))\Lambda_{v-s}^{P\beta}(\mathbf{k}) \quad (E.20)$$

$$= \text{sgn}_{\mathcal{T}}(A_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{k})) \text{sgn}_{\mathcal{T}}(\Lambda_{v-s}^{P\beta}(\mathbf{k})) \cdot \left(-e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{v-s} \int_{S_{v-s}^F} \frac{dS_{v-s}(-\mathbf{k})}{\hbar v_{v-s}(-\mathbf{k})} A_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(-\mathbf{k}) \Lambda_{v-s}^{G\beta}(\mathbf{k}) \right) \quad (E.21)$$

mit Gleichungen (E.14) und (E.15)

$$= \text{sgn}_{\mathcal{T}}(A_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{k})) \text{sgn}_{\mathcal{T}}(\Lambda_{v-s}^{P\beta}(\mathbf{k})) a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(\Lambda^P) \quad (E.22)$$

Ausgehend von $a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} = a_G^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} + a_U^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}$ sind die geraden und ungeraden Anteile des Tensorelementes $a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}$ über

$$R(\mathcal{T})a_G^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} = a_G^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} \quad \text{bzw.} \quad R(\mathcal{T})a_U^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} = -a_U^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} \quad (E.23)$$

definiert. Mit

$$\text{sgn}_{\mathcal{T}}(\Lambda_{v-s}^{P\beta}(\mathbf{k})) = \begin{cases} +1 & \text{für } P = G \\ -1 & \text{für } P = U \end{cases} \quad (E.24)$$

gilt durch Vergleich von Gleichungen (E.22) und (E.23) einerseits

$$\left. \begin{aligned} a_G^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} &= a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(\Lambda_G) \\ a_U^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} &= a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(\Lambda_U) \end{aligned} \right\} \text{ falls } \text{sgn}_{\mathcal{T}}(\overset{\circ}{A}_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{k})) = +1 \quad (E.25)$$

und andererseits

$$\left. \begin{aligned} a_G^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} &= a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(\Lambda_U) \\ a_U^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} &= a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta}(\Lambda_G) \end{aligned} \right\} \text{ falls } \text{sgn}_{\mathcal{T}}(\overset{\circ}{A}_{v-s}^{\alpha_1 \cdots \alpha_n}(\mathbf{k})) = -1. \quad (E.26)$$

Neben der Rauminversionssymmetrie besitzen Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten sowohl mit Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) als auch mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) die Symmetrie $\mathcal{T}m_x$, sodass für alle Tensoren $\widehat{a} \in \{\widehat{\sigma}, \widehat{\sigma}^x, \widehat{\sigma}^y, \widehat{\sigma}^z, \widehat{\chi}, \widehat{t}\}$

$$R(\mathcal{T}m_x)\widehat{a} = \widehat{a} \quad \text{bzw.} \quad R(\mathcal{T}m_x)a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} = a^{\alpha_1 \cdots \alpha_n \beta} \quad (\text{E.27})$$

gilt.

Tabelle E.2.2.: Transformationsverhalten des geraden Anteils und des ungeraden Anteils der mittleren freien Weglänge $\Lambda_{vs}^G(\mathbf{k})$ bzw. $\Lambda_{vs}^U(\mathbf{k})$ unter Spiegelung an der yz -Ebene m_x und unter der Kombination aus Zeitumkehr \mathcal{T} und m_x . Für $\mathcal{T}m_x$ ist zudem das zugehörige Signum $\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)$ angegeben, das über $R(\mathcal{T})A = \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)A$ definiert ist. Ferner seien $\mathbf{k}' := R(m_x)\mathbf{k} = (-k_x, k_y, k_z)$ und $\mathbf{k}'' := R(\mathcal{T}m_x)\mathbf{k} = (k_x, -k_y, -k_z)$.

A	$\Lambda_{vs}^{Gx}(\mathbf{k})$	$\Lambda_{vs}^{Gy}(\mathbf{k})$	$\Lambda_{vs}^{Gz}(\mathbf{k})$	$\Lambda_{vs}^{Ux}(\mathbf{k})$	$\Lambda_{vs}^{Uy}(\mathbf{k})$	$\Lambda_{vs}^{Uz}(\mathbf{k})$
$R(m_x)A$	$-\Lambda_{vs}^{Gx}(\mathbf{k}')$	$\Lambda_{vs}^{Gy}(\mathbf{k}')$	$\Lambda_{vs}^{Gz}(\mathbf{k}')$	$-\Lambda_{vs}^{Ux}(\mathbf{k}')$	$\Lambda_{vs}^{Uy}(\mathbf{k}')$	$\Lambda_{vs}^{Uz}(\mathbf{k}')$
$R(\mathcal{T}m_x)A$	$-\Lambda_{vs}^{Gx}(\mathbf{k}'')$	$\Lambda_{vs}^{Gy}(\mathbf{k}'')$	$\Lambda_{vs}^{Gz}(\mathbf{k}'')$	$\Lambda_{vs}^{Ux}(\mathbf{k}'')$	$-\Lambda_{vs}^{Uy}(\mathbf{k}'')$	$-\Lambda_{vs}^{Uz}(\mathbf{k}'')$
$\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)$	-1	+1	+1	+1	-1	-1

Tabelle E.2.3.: Transformationsverhalten verschiedener Größen A unter Spiegelung an der yz -Ebene m_x und unter der Kombination aus Zeitumkehr \mathcal{T} und m_x . Für $\mathcal{T}m_x$ ist zudem das zugehörige Signum $\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)$ angegeben, das über $R(\mathcal{T})A = \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)A$ definiert ist. Ferner seien $\mathbf{k}' := R(m_x)\mathbf{k} = (-k_x, k_y, k_z)$ und $\mathbf{k}'' := R(\mathcal{T}m_x)\mathbf{k} = (k_x, -k_y, -k_z)$. Das Transformationsverhalten von $T_{vs}(\mathbf{k})$ lässt sich durch die Analogie zum mechanischen Drehmoment $\mathbf{D} = \frac{d\mathbf{L}}{dt}$ und der Transformation von \mathbf{L} unter m_x bestimmen.

(a) $J_{vs}^x(\mathbf{k})$			
A	$J_{vs}^x(\mathbf{k})$	$J_{vs}^y(\mathbf{k})$	$J_{vs}^z(\mathbf{k})$
$R(m_x)A$	$-J_{vs}^x(\mathbf{k}')$	$J_{vs}^y(\mathbf{k}')$	$J_{vs}^z(\mathbf{k}')$
$R(\mathcal{T}m_x)A$	$J_{vs}^x(\mathbf{k}'')$	$-J_{vs}^y(\mathbf{k}'')$	$-J_{vs}^z(\mathbf{k}'')$
$\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)$	+1	-1	-1

(b) $J_{vs}^y(\mathbf{k})$			
A	$J_{vs}^{xx}(\mathbf{k})$	$J_{vs}^{yx}(\mathbf{k})$	$J_{vs}^{zx}(\mathbf{k})$
$R(m_x)A$	$-J_{vs}^{xx}(\mathbf{k}')$	$J_{vs}^{xy}(\mathbf{k}')$	$J_{vs}^{xz}(\mathbf{k}')$
$R(\mathcal{T}m_x)A$	$-J_{vs}^{xx}(\mathbf{k}'')$	$J_{vs}^{xy}(\mathbf{k}'')$	$J_{vs}^{xz}(\mathbf{k}'')$
$\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)$	-1	+1	+1

(c) $J_{vs}^y(\mathbf{k})$			
A	$J_{vs}^{yx}(\mathbf{k})$	$J_{vs}^{yy}(\mathbf{k})$	$J_{vs}^{yz}(\mathbf{k})$
$R(m_x)A$	$J_{vs}^{yx}(\mathbf{k}')$	$-J_{vs}^{yy}(\mathbf{k}')$	$-J_{vs}^{yz}(\mathbf{k}')$
$R(\mathcal{T}m_x)A$	$J_{vs}^{yx}(\mathbf{k}'')$	$-J_{vs}^{yy}(\mathbf{k}'')$	$-J_{vs}^{yz}(\mathbf{k}'')$
$\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)$	+1	-1	-1

(d) $J_{vs}^z(\mathbf{k})$			
A	$J_{vs}^{zx}(\mathbf{k})$	$J_{vs}^{zy}(\mathbf{k})$	$J_{vs}^{zz}(\mathbf{k})$
$R(m_x)A$	$J_{vs}^{zx}(\mathbf{k}')$	$-J_{vs}^{zy}(\mathbf{k}')$	$-J_{vs}^{zz}(\mathbf{k}')$
$R(\mathcal{T}m_x)A$	$J_{vs}^{zx}(\mathbf{k}'')$	$-J_{vs}^{zy}(\mathbf{k}'')$	$-J_{vs}^{zz}(\mathbf{k}'')$
$\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)$	+1	-1	-1

(e) $S_{vs}(\mathbf{k})$			
A	$S_{vs}^x(\mathbf{k})$	$S_{vs}^y(\mathbf{k})$	$S_{vs}^z(\mathbf{k})$
$R(m_x)A$	$S_{vs}^x(\mathbf{k}')$	$-S_{vs}^y(\mathbf{k}')$	$-S_{vs}^z(\mathbf{k}')$
$R(\mathcal{T}m_x)A$	$-S_{vs}^x(\mathbf{k}'')$	$S_{vs}^y(\mathbf{k}'')$	$S_{vs}^z(\mathbf{k}'')$
$\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)$	-1	+1	+1

(f) $T_{vs}(\mathbf{k})$			
A	$T_{vs}^x(\mathbf{k})$	$T_{vs}^y(\mathbf{k})$	$T_{vs}^z(\mathbf{k})$
$R(m_x)A$	$T_{vs}^x(\mathbf{k}')$	$-T_{vs}^y(\mathbf{k}')$	$-T_{vs}^z(\mathbf{k}')$
$R(\mathcal{T}m_x)A$	$T_{vs}^x(\mathbf{k}'')$	$-T_{vs}^y(\mathbf{k}'')$	$-T_{vs}^z(\mathbf{k}'')$
$\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(A)$	+1	-1	-1

Einerseits gilt Gleichung (E.27) und andererseits gilt für $P \in \{G, U\}$

$$R(\mathcal{T}m_x) a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\Lambda_P) \quad (E.28)$$

$$= R(\mathcal{T}m_x) \left(-e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{P\beta}(\mathbf{k}) \right) \quad (E.29)$$

$$= -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k}'')}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k}'')} R(\mathcal{T}m_x) \overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}'') R(\mathcal{T}m_x) \Lambda_{vs}^{P\beta}(\mathbf{k}) \quad (E.30)$$

$$= \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \right) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\Lambda_{vs}^{P\beta}(\mathbf{k}) \right) \left(-e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k}'')}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k}'')} \overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}'') \Lambda_{vs}^{P\beta}(\mathbf{k}'') \right) \quad (E.31)$$

$$= \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \right) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\Lambda_{vs}^{P\beta}(\mathbf{k}) \right) a^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\Lambda_P) \quad (E.32)$$

Für $\text{sgn}_{\mathcal{T}}(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})) = +1$ gilt Gleichung (E.25) und es gelten

$$R(\mathcal{T}m_x) a_G^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \right) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\Lambda_{vs}^{G\beta}(\mathbf{k}) \right) a_G^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} \quad (E.33)$$

$$\text{und } R(\mathcal{T}m_x) a_U^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = -\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \right) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\Lambda_{vs}^{U\beta}(\mathbf{k}) \right) a_U^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}. \quad (E.34)$$

Wegen Gleichung (E.27) gelten

$$a_G^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = 0 \quad \text{falls } \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \right) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\Lambda_{vs}^{G\beta}(\mathbf{k}) \right) = -1 \quad (E.35)$$

$$a_U^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = 0 \quad \text{falls } \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \right) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\Lambda_{vs}^{U\beta}(\mathbf{k}) \right) = +1. \quad (E.36)$$

Gilt hingegen $\text{sgn}_{\mathcal{T}}(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})) = -1$ und somit Gleichung (E.26), so folgen

$$R(\mathcal{T}m_x) a_G^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = -\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \right) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\Lambda_{vs}^{U\beta}(\mathbf{k}) \right) a_G^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} \quad (E.37)$$

$$\text{und } R(\mathcal{T}m_x) a_U^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \right) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\Lambda_{vs}^{G\beta}(\mathbf{k}) \right) a_U^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}. \quad (E.38)$$

Wegen Gleichung (E.27) gelten

$$a_G^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = 0 \quad \text{falls } \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \right) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\Lambda_{vs}^{U\beta}(\mathbf{k}) \right) = +1 \quad (E.39)$$

$$a_U^{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = 0 \quad \text{falls } \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\overset{\circ}{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \right) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x} \left(\Lambda_{vs}^{G\beta}(\mathbf{k}) \right) = -1 \quad (E.40)$$

ist. Betrachtet man z. B. σ_{zy} . Zunächst gilt $\text{sgn}_{\mathcal{T}}(J_{vs}^z(\mathbf{k})) = -1$, sodass Gleichung (E.26) gilt. Ferner sind $\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(J_{vs}^z(\mathbf{k})) = -1$, und $\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(\Lambda_{vs}^{Gy}(\mathbf{k})) = +1$ bzw. $\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(\Lambda_{vs}^{Uy}(\mathbf{k})) = -1$, sodass $\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(J_{vs}^z(\mathbf{k})) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(\Lambda_{vs}^{Gy}(\mathbf{k})) = -1$ und $\text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(J_{vs}^z(\mathbf{k})) \text{sgn}_{\mathcal{T}m_x}(\Lambda_{vs}^{Uy}(\mathbf{k})) = +1$ ist. Somit folgt $\sigma_{zy}^U = 0$, sodass $\sigma_{zy} = \sigma_{zy}^G$ ist. Auf diese Weise können für die betrachteten Tensoren unter Berücksichtigung der Tabellen E.2.1 bis E.2.3 die geraden und

ungeraden Anteile bestimmt werden. Diese sind in Tabelle E.2.5 zusammengefasst. Die betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten besitzen neben der $\mathcal{T}m_x$ -Symmetrie weitere Symmetrien. Die Darstellungen der Tensoren sowie die Darstellungen der geraden und ungeraden Anteile sind für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) in Tabelle E.2.7 (a) und für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{y}}$) in Tabelle E.2.7 (b) dargestellt.

Tabelle E.2.5.: Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\widehat{\sigma}$, Tensoren der Spin-Leitfähigkeit $\widehat{\sigma}^x, \widehat{\sigma}^y, \widehat{\sigma}^z$, Edelstein-Tensor $\widehat{\chi}$, und Spin-Orbit-Torkance \widehat{t} in Systemen mit $\mathcal{T}m_x$ -Symmetrie. Zusätzlich sind für jeden Tensor \widehat{a} sowohl der unter Zeitumkehr gerade Anteil \widehat{a}_G und der unter Zeitumkehr ungerade Anteil \widehat{a}_U angegeben. Bei Vernachlässigung des antisymmetrischen Anteils der Übergangswahrscheinlichkeit verschwindet für $\text{sgn}_{\mathcal{T}}(A) = +1$ der gerade Anteil $\widehat{a}_G = \widehat{a}(\Lambda_G)$, während für $\text{sgn}_{\mathcal{T}}(A) = -1$ der ungerade Anteil $\widehat{a}_U = \widehat{a}(\Lambda_G)$ verschwindet.

\widehat{a}	A	$\text{sgn}_{\mathcal{T}}(A)$	\widehat{a}	\widehat{a}_G	\widehat{a}_U
$\widehat{\sigma}$	\mathbf{j}	-1	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ 0 & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & 0 & 0 \\ \sigma_{zx} & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\widehat{\sigma}^x$	\mathbf{j}^x	+1	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^x & \sigma_{xy}^x & \sigma_{xz}^x \\ \sigma_{yx}^x & \sigma_{yy}^x & \sigma_{yz}^x \\ \sigma_{zx}^x & \sigma_{zy}^x & \sigma_{zz}^x \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^x & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy}^x & \sigma_{yz}^x \\ 0 & \sigma_{zy}^x & \sigma_{zz}^x \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_{xy}^x & \sigma_{xz}^x \\ \sigma_{yx}^x & 0 & 0 \\ \sigma_{zx}^x & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\widehat{\sigma}^y$	\mathbf{j}^y	+1	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^y & \sigma_{xy}^y & \sigma_{xz}^y \\ \sigma_{yx}^y & \sigma_{yy}^y & \sigma_{yz}^y \\ \sigma_{zx}^y & \sigma_{zy}^y & \sigma_{zz}^y \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_{xy}^y & \sigma_{xz}^y \\ \sigma_{yx}^y & 0 & 0 \\ \sigma_{zx}^y & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^y & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy}^y & \sigma_{yz}^y \\ 0 & \sigma_{zy}^y & \sigma_{zz}^y \end{pmatrix}$
$\widehat{\sigma}^z$	\mathbf{j}^z	+1	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^z & \sigma_{xy}^z & \sigma_{xz}^z \\ \sigma_{yx}^z & \sigma_{yy}^z & \sigma_{yz}^z \\ \sigma_{zx}^z & \sigma_{zy}^z & \sigma_{zz}^z \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_{xy}^z & \sigma_{xz}^z \\ \sigma_{yx}^z & 0 & 0 \\ \sigma_{zx}^z & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^z & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy}^z & \sigma_{yz}^z \\ 0 & \sigma_{zy}^z & \sigma_{zz}^z \end{pmatrix}$
$\widehat{\chi}$	\mathbf{s}	-1	$\begin{pmatrix} \chi_{xx} & \chi_{xy} & \chi_{xz} \\ \chi_{yx} & \chi_{yy} & \chi_{yz} \\ \chi_{zx} & \chi_{zy} & \chi_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \chi_{xy} & \chi_{xz} \\ \chi_{yx} & 0 & 0 \\ \chi_{zx} & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \chi_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{yy} & \chi_{yz} \\ 0 & \chi_{zy} & \chi_{zz} \end{pmatrix}$
\widehat{t}	\mathbf{T}	+1	$\begin{pmatrix} t_{xx} & t_{xy} & t_{xz} \\ t_{yx} & t_{yy} & t_{yz} \\ t_{zx} & t_{zy} & t_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & t_{xy} & t_{xz} \\ t_{yx} & 0 & 0 \\ t_{zx} & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} t_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & t_{yy} & t_{yz} \\ 0 & t_{zy} & t_{zz} \end{pmatrix}$

Tabelle E.2.6.: Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$, Tensoren der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^x$, $\hat{\sigma}^y$, $\hat{\sigma}^z$, Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$, und Spin-Orbit-Torkance \hat{t} in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit **(a)** Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{z}$) und **(b)** Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$). Zusätzlich sind für jeden Tensor \hat{a} sowohl der unter Zeitumkehr gerade Anteil \hat{a}_G und der unter Zeitumkehr ungerade Anteil \hat{a}_U angegeben. Bei Vernachlässigung des antisymmetrischen Anteils der Übergangswahrscheinlichkeit verschwindet für $\text{sgn}_{\mathcal{T}}(A) = +1$ der gerade Anteil \hat{a}_G , während für $\text{sgn}_{\mathcal{T}}(A) = -1$ der ungerade Anteil \hat{a}_U verschwindet.

(a) $\hat{M} = \hat{z}$						
\hat{a}	A	$\text{sgn}_{\mathcal{T}}(A)$	\hat{a}	\hat{a}_G	\hat{a}_U	
$\hat{\sigma}$	\mathbf{j}	-1	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{yx} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -\sigma_{yx} & 0 \\ \sigma_{yx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	
$\hat{\sigma}^x$	\mathbf{j}^x	+1	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{xz}^x \\ 0 & 0 & \sigma_{yz}^x \\ \sigma_{zx}^x & \sigma_{zy}^x & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{yz}^x \\ 0 & \sigma_{zy}^x & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{xz}^x \\ 0 & 0 & 0 \\ \sigma_{zx}^x & 0 & 0 \end{pmatrix}$	
$\hat{\sigma}^y$	\mathbf{j}^y	+1	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{xz}^y \\ 0 & 0 & \sigma_{yz}^y \\ \sigma_{zx}^y & \sigma_{zy}^y & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \sigma_{xz}^y \\ 0 & 0 & 0 \\ \sigma_{zx}^y & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{yz}^y \\ 0 & \sigma_{zy}^y & 0 \end{pmatrix}$	
$\hat{\sigma}^z$	\mathbf{j}^z	+1	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^z & -\sigma_{yx}^z & 0 \\ \sigma_{yx}^z & \sigma_{xx}^z & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz}^z \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -\sigma_{yx}^z & 0 \\ \sigma_{yx}^z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^z & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{xx}^z & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz}^z \end{pmatrix}$	
$\hat{\chi}$	\mathbf{s}	-1	$\begin{pmatrix} \chi_{xx} & -\chi_{yx} & 0 \\ \chi_{yx} & \chi_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -\chi_{yx} & 0 \\ \chi_{yx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \chi_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{zz} \end{pmatrix}$	
\hat{t}	\mathbf{T}	+1	$\begin{pmatrix} t_{xx} & -t_{yx} & 0 \\ t_{yx} & t_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & t_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -t_{yx} & 0 \\ t_{yx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} t_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & t_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & t_{zz} \end{pmatrix}$	

(b) $\widehat{M} = \widehat{y}$

\widehat{a}	A	$\text{sgn}_{\mathcal{T}}(A)$	\widehat{a}	\widehat{a}_G	\widehat{a}_U
$\widehat{\sigma}$	j	-1	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & -\sigma_{zx} \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ \sigma_{zx} & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -\sigma_{zx} \\ 0 & 0 & 0 \\ \sigma_{zx} & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\widehat{\sigma}^x$	j^x	+1	$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_{xy}^x & 0 \\ \sigma_{yx}^y & 0 & \sigma_{yz}^x \\ 0 & \sigma_{zy}^x & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{yz}^x \\ 0 & \sigma_{zy}^x & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_{xy}^x & 0 \\ \sigma_{yx}^x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
$\widehat{\sigma}^y$	j^y	+1	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^y & 0 & -\sigma_{zx}^y \\ 0 & \sigma_{yy}^y & 0 \\ \sigma_{zx}^y & 0 & \sigma_{zz}^y \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -\sigma_{zx}^y \\ 0 & 0 & 0 \\ \sigma_{zx}^y & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}^y & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy}^y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz}^y \end{pmatrix}$
$\widehat{\sigma}^z$	j^z	+1	$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_{xy}^z & 0 \\ \sigma_{yx}^z & 0 & \sigma_{yz}^z \\ 0 & \sigma_{zy}^z & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \sigma_{xy}^z & 0 \\ \sigma_{yx}^z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{yz}^z \\ 0 & \sigma_{zy}^z & 0 \end{pmatrix}$
$\widehat{\chi}$	s	-1	$\begin{pmatrix} 0 & \chi_{xy} & 0 \\ \chi_{yx} & 0 & \chi_{yz} \\ 0 & \chi_{zy} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \chi_{xy} & 0 \\ \chi_{yx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{yz} \\ 0 & \chi_{zy} & 0 \end{pmatrix}$
\widehat{t}	T	+1	$\begin{pmatrix} 0 & t_{xy} & 0 \\ t_{yx} & 0 & t_{yz} \\ 0 & t_{zy} & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & t_{xy} & 0 \\ t_{yx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{yz} \\ 0 & t_{zy} & 0 \end{pmatrix}$

F. Grundzustandseigenschaften von fcc-Cu, fcc-Co, und Co/Cu-Vielfachschichten

F.1. Lokale Zustandsdichten

F.1.1. fcc-Cu und fcc-Co

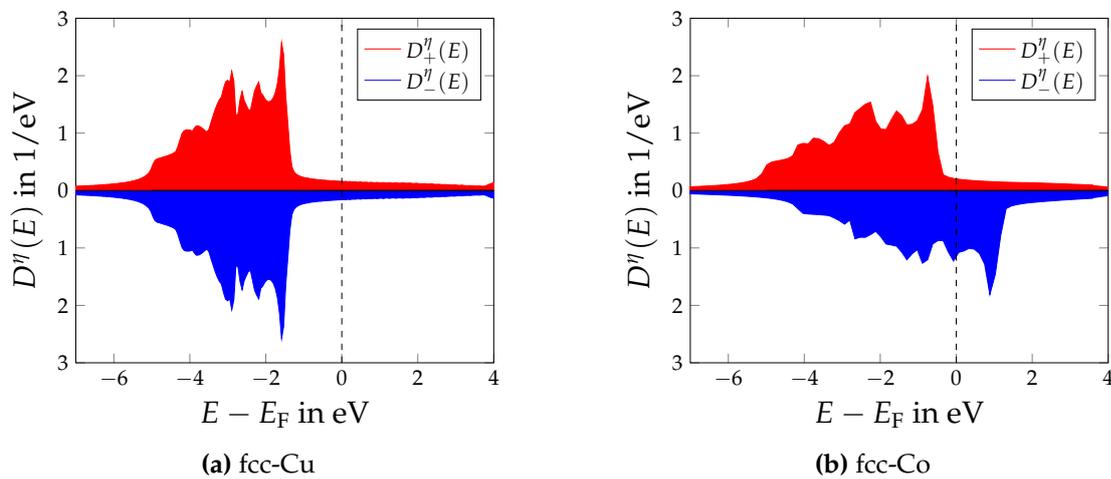


Abbildung F.1.1.: Lokale Zustandsdichte von (a) fcc-Cu mit Spin-Quantisierungsachse in z-Richtung und (b) fcc-Co mit Magnetisierung in z-Richtung

F.1.2. Co(9)/Cu(7)(001)-Vielwandschichten

F.1.2.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche

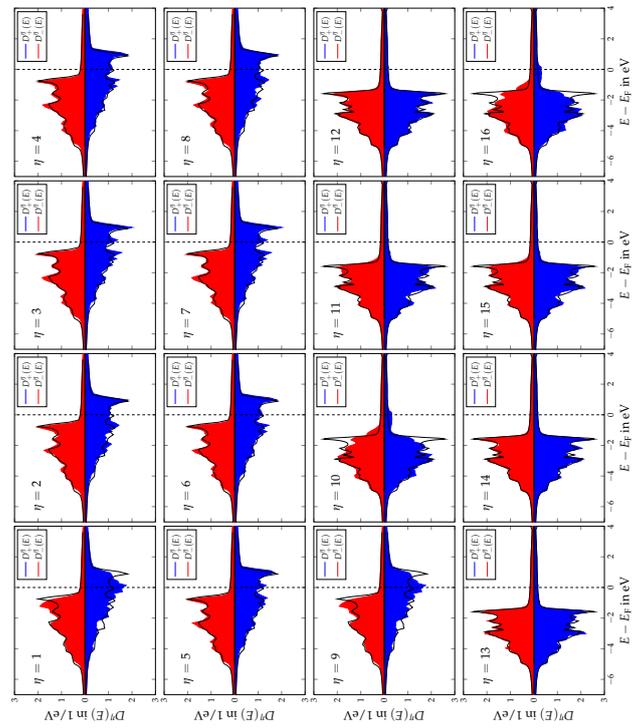


Abbildung F.1.2.: Lokale Zustandsdichte von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielwandschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$)

F.1.2.2. Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche

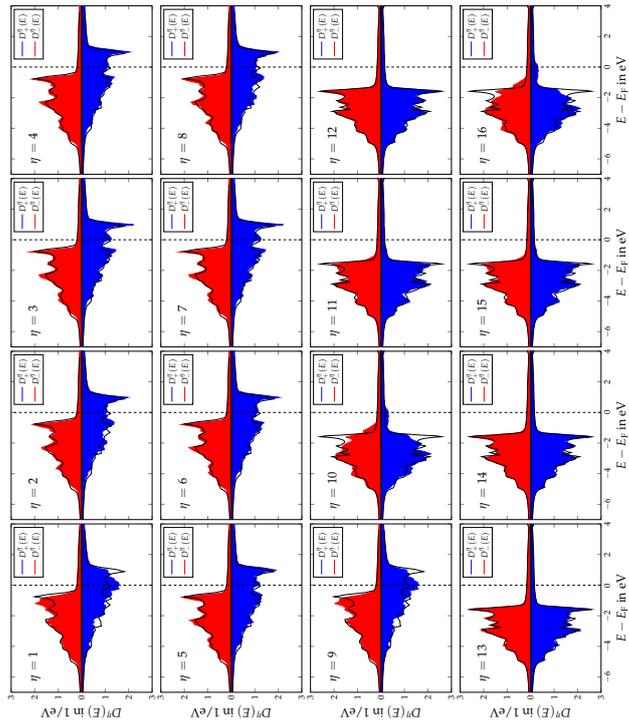


Abbildung F.1.3.: Lokale Zustandsdichte von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielwandschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$)

F.2. Magnetische Momente

F.2.1. Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

F.2.1.1. Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche

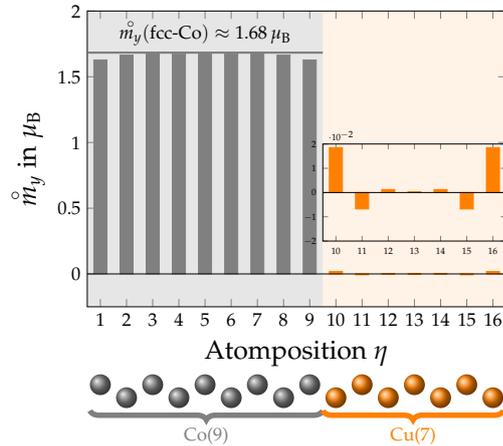


Abbildung F.2.1.: Magnetische Momente der Co- und Cu-Atome in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$). Zum Vergleich ist das atomare magnetische Moment der Co-Atome in fcc-Co eingezeichnet.

F.3. Fermi-Flächen

F.3.1. fcc-Cu und fcc-Co

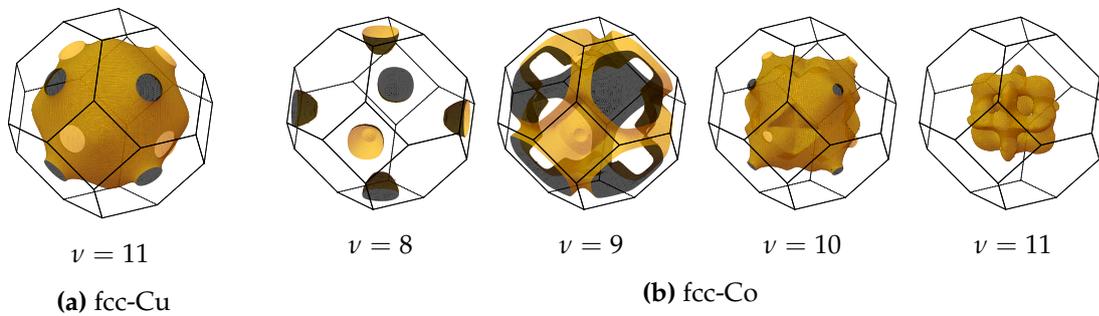


Abbildung F.3.1.: Fermi-Fläche von (a) fcc-Cu ($\nu = 11$) und (b) fcc-Co ($\nu \in \{8, 9, 10, 11\}$).

F.3.2. Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

F.3.2.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche

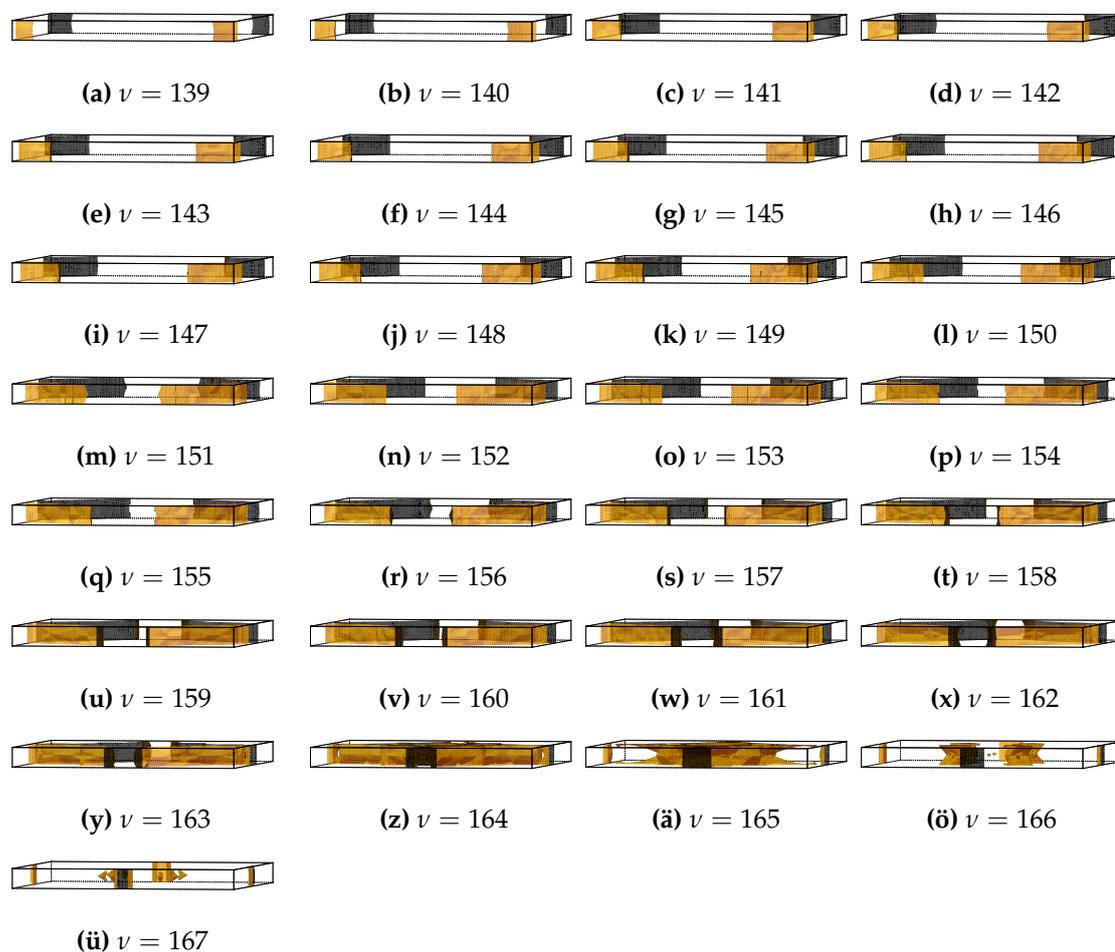


Abbildung F.3.2.: Fermi-Fläche von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) mit (a) $\nu = 139$ bis (ö) $\nu = 167$.

F.3.2.2. Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche

Die Fermi-Fläche von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$) und Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) unterscheiden sich nur geringfügig, sodass die Fermi-Fläche von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$) hier nicht explizit dargestellt sind.

F.4. Fermi-Geschwindigkeiten

F.4.1. Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

F.4.1.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche

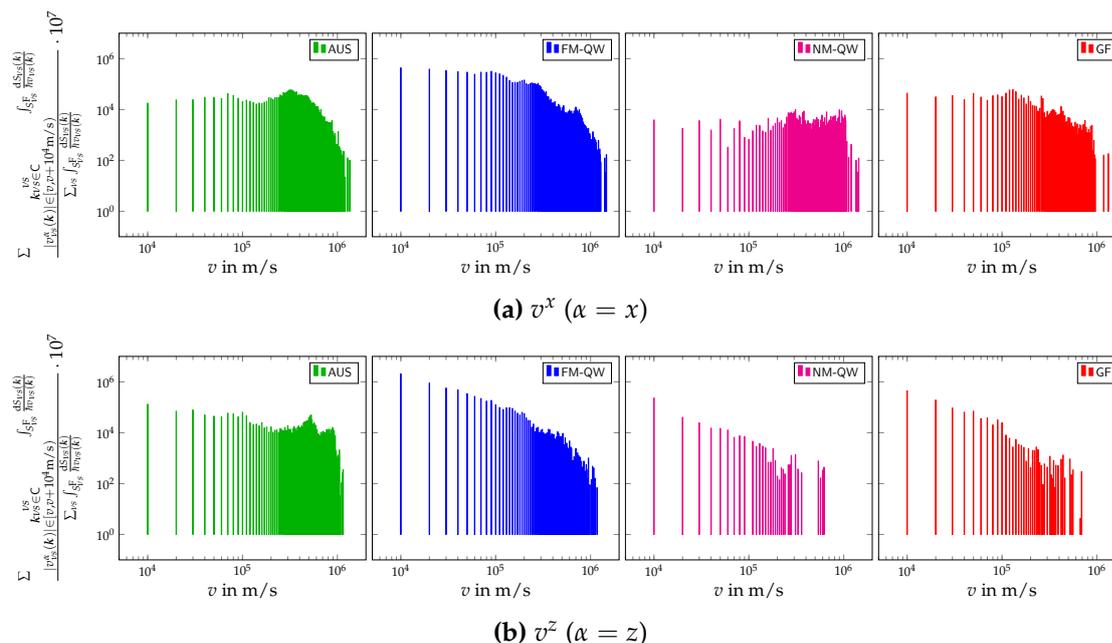


Abbildung F.4.1.: Häufigkeitsverteilung der Geschwindigkeitskomponenten in (a) x -Richtung und (b) in z -Richtung in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) für die verschiedenen Klassen an Zuständen. Aufgrund der C_{4z} -Symmetrie stimmen die Häufigkeitsverteilungen für v^x und v^y überein. Man beachte ferner die doppellogarithmische Darstellung.

F.4.1.2. Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche

Die Fermi-Fläche von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) und Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$) unterscheiden sich nur geringfügig, sodass sich auch die Fermi-Geschwindigkeiten nur geringfügig unterscheiden. Aus diesem Grund sind die Häufigkeitsverteilungen für die Fermi-Geschwindigkeiten von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$) hier nicht explizit dargestellt.

F.5. Spin-Erwartungswert

F.5.1. Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

F.5.1.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche

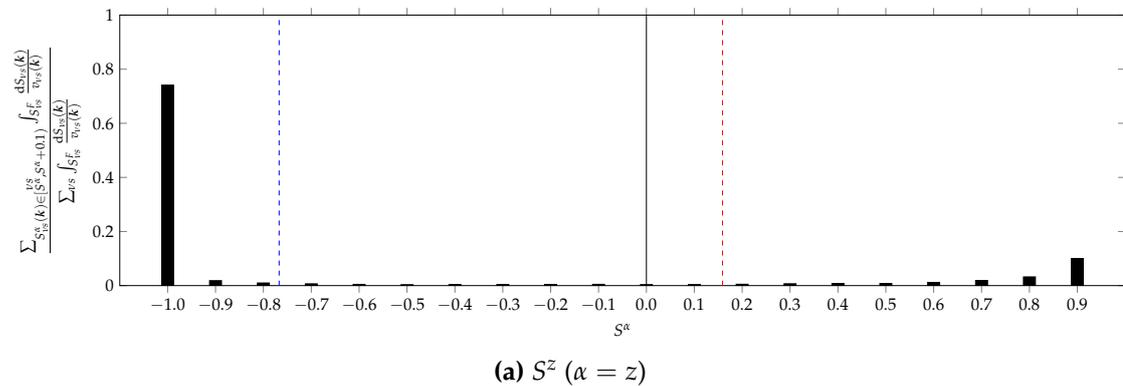


Abbildung F.5.1.: Häufigkeitsverteilung der Komponenten des Spin-Erwartungswertes in (a) z-Richtung in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$). Die mittleren Spin-Erwartungswerte der Majoritäts- und Minoritätselektronen sind gestrichelt (- -) eingezeichnet.

G. Transporteigenschaften für beliebiges äußeres elektrisches Feld

Zwischen dem äußeren elektrischen Feld $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ mit

$$\hat{\mathbf{E}} = \begin{pmatrix} \cos \varphi \sin \vartheta \\ \sin \varphi \sin \vartheta \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} \quad (\text{G.1})$$

und der Antwort $\mathbf{A} \in \{\mathbf{j}, \mathbf{j}^\gamma, \mathbf{s}, \mathbf{T}\}$ besteht über

$$\mathbf{A}(\mathbf{E}) = \hat{\mathbf{a}}\mathbf{E} \quad (\text{G.2})$$

ein linearer Zusammenhang, der über den Tensor

$$\hat{\mathbf{a}} = \begin{pmatrix} a_{xx} & a_{xy} & a_{xz} \\ a_{yx} & a_{yy} & a_{yz} \\ a_{zx} & a_{zy} & a_{zz} \end{pmatrix} \quad (\text{G.3})$$

vermittelt wird. Diese sind der Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$, die Tensoren der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^\gamma$ mit $\gamma \in \{x, y, z\}$, der Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$, und die Spin-Orbit-Torque \hat{t} und stellen im Allgemeinen Tensoren 2. Stufe dar, die entsprechend Gleichung (G.3) durch 3×3 -Matrizen beschrieben werden können. Für ein beliebiges äußeres elektrisches Feld $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{E}}$ mit Gleichung (G.1) besitzt die elektrische Stromdichte \mathbf{j} , die Spin-Stromdichten \mathbf{j}^γ , die Spin-Dichte \mathbf{s} , und der Spin-Orbit-Torque \mathbf{T} im Allgemeinen sowohl Komponenten parallel als auch senkrecht zum äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} . Für eine beliebige Antwort \mathbf{A} mit $\mathbf{A} \in \{\mathbf{j}, \mathbf{j}^\gamma, \mathbf{s}, \mathbf{T}\}$ und zugehörigem Tensor $\hat{\mathbf{a}}$, die über Gleichung (G.2) verknüpft sind, stellt

$$a^{\perp}(\hat{\mathbf{E}}) := \frac{\mathbf{A}(\mathbf{E}) \cdot \hat{\mathbf{E}}}{E} \quad (\text{G.4})$$

die longitudinale Tensorelement des Tensors $\hat{\mathbf{a}}$ dar. Für $\mathbf{A} := \mathbf{j}$ bezeichnet $a^{\perp} = \sigma^{\perp}$ die longitudinale elektrische Leitfähigkeit. Zum äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} gibt es zwei jeweils zueinander und zum äußeren elektrischen Feld senkrechte Richtungen. Die zugehörigen Einheitsvektoren dieser Richtungen seien mit $\hat{\mathbf{T}}_1$ und $\hat{\mathbf{T}}_2$ bezeichnet. Die

Wahl der beiden Richtungen ist nicht eindeutig. Unter Zuhilfenahme einer beliebigen Richtung \hat{P} sind \hat{T}_1 und \hat{T}_2 über

$$\hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P}) := \frac{\hat{P} \times \hat{E}}{|\hat{P} \times \hat{E}|} \quad \text{bzw.} \quad \hat{T}_2(\hat{E}, \hat{P}) := \hat{E} \times \hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P}) = \hat{E} \times \frac{\hat{P} \times \hat{E}}{|\hat{P} \times \hat{E}|} \quad (\text{G.5})$$

definiert. In diesem Fall bilden \hat{E} , \hat{T}_1 , und \hat{T}_2 in der Reihenfolge ein Rechtssystem. Die Größen

$$a^{T_1}(\hat{E}) := \frac{A(\mathbf{E}) \cdot \hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P})}{E} \quad \text{bzw.} \quad a^{T_2}(\hat{E}) := \frac{A(\mathbf{E}) \cdot \hat{T}_2(\hat{E}, \hat{P})}{E} \quad (\text{G.6})$$

bezeichnet man als transversale Tensorelemente des Tensors \hat{a} . Für $A := j$ werden $a^{T_1} = \sigma^{T_1}$ und $a^{T_2} = \sigma^{T_2}$ als transversale elektrische Leitfähigkeiten bezeichnet. Der Einheitsvektor \hat{P} kann im Prinzip beliebig gewählt werden. Es empfiehlt sich jedoch, \hat{P} entsprechend

$$\hat{P} = \begin{cases} \hat{M} & \text{für } A \in \{j, s, T\} \\ \hat{S}^\gamma & \text{für } A \in \{j^\gamma\} \text{ mit } \gamma \in \{x, y, z\} \end{cases} \quad (\text{G.7})$$

zu wählen. In diesem Fall sind die transversale elektrische Stromdichte $j^{T_1}(\mathbf{E}) = \sigma^{T_1} E \hat{T}_1(\hat{E}, \hat{M})$ und die transversale Spin-Stromdichte $j^{\gamma T_1}(\mathbf{E}) = \sigma^{\gamma T_1} E \hat{T}_1(\hat{E}, \hat{S}^\gamma)$ sowohl senkrecht zum äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} als auch senkrecht zur Magnetisierung \mathbf{M} bzw. zur Spin-Richtung \mathbf{S}^γ . Die explizite Abhängigkeit des longitudinalen Tensorelement a^L und der transversalen Tensorelemente a^{T_1} und a^{T_2} vom äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} hängen wesentlich von der Struktur der Tensoren \hat{a} ab und sind für einen beliebigen Tensor \hat{a} im Folgenden gegeben.

Sei $\hat{N} \in \{\hat{E}, \hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P}), \hat{T}_2(\hat{E}, \hat{P})\}$ eine beliebige Richtung, dann gilt mit $N \in \{L, T_1, T_2\}$

$$a^N(\hat{E}) = \frac{A(\mathbf{E}) \cdot \hat{N}}{E} \quad (\text{G.8})$$

mit Gleichung (G.2)

$$= \frac{(\hat{a}\mathbf{E}) \cdot \hat{N}}{E} \quad (\text{G.9})$$

$$= (\hat{a}\hat{E}) \cdot \hat{N} \quad (\text{G.10})$$

mit Gleichungen (G.1) und (G.3) und $\hat{N} = (\hat{N}_x, \hat{N}_y, \hat{N}_z)$

$$\begin{aligned} &= (a_{xx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{xy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{xz} \cos \vartheta) \hat{N}_x \\ &\quad + (a_{yx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{yy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{yz} \cos \vartheta) \hat{N}_y \\ &\quad + (a_{zx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{zy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{zz} \cos \vartheta) \hat{N}_z \end{aligned} \quad (\text{G.11})$$

G.1. Longitudinale Transporteigenschaften

Für das longitudinale Tensorelement a^L gilt mit Gleichung (G.11) und $\hat{N} := \hat{E} \Leftrightarrow (\hat{N}_x, \hat{N}_y, \hat{N}_z) := (\cos \varphi \sin \vartheta, \sin \varphi \sin \vartheta, \cos \vartheta)^T$

$$\begin{aligned} a^L(\hat{E}) &= (a_{xx} \cos^2 \varphi + a_{yy} \sin^2 \varphi) \sin^2 \vartheta + a_{zz} \cos^2 \vartheta \\ &\quad + (a_{xy} + a_{yx}) \cos \varphi \sin \varphi \sin^2 \vartheta \\ &\quad + [(a_{xz} + a_{zx}) \cos \varphi + (a_{yz} + a_{zy}) \sin \varphi] \sin \vartheta \cos \vartheta \end{aligned} \quad (\text{G.12})$$

G.2. Transversale Transporteigenschaften

G.2.1. Transversales Tensorelement T_1

Für

$$\hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P}) = \frac{\hat{P} \times \hat{E}}{|\hat{P} \times \hat{E}|} \quad (\text{G.13})$$

gilt mit $\hat{P} = (\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z)^T$

$$\hat{P} \times \hat{E} = \begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \cos \varphi \sin \vartheta \\ \sin \varphi \sin \vartheta \\ \cos \vartheta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_y \cos \vartheta - P_z \sin \varphi \sin \vartheta \\ P_z \cos \varphi \sin \vartheta - P_x \cos \vartheta \\ P_x \sin \varphi \sin \vartheta - P_y \cos \varphi \sin \vartheta \end{pmatrix} \quad (\text{G.14})$$

und somit

$$\begin{aligned} |\hat{P} \times \hat{E}|^2 &= (P_y \cos \vartheta - P_z \sin \varphi \sin \vartheta)^2 \\ &\quad + (P_z \cos \varphi \sin \vartheta - P_x \cos \vartheta)^2 \\ &\quad + (P_x \sin \varphi \sin \vartheta - P_y \cos \varphi \sin \vartheta)^2 \end{aligned} \quad (\text{G.15})$$

$$\begin{aligned} &= (P_x^2 + P_y^2) \cos^2 \vartheta + ((P_x \sin \varphi - P_y \cos \varphi)^2 + P_z^2) \sin^2 \vartheta \\ &\quad - 2(P_y \sin \varphi - P_x \cos \varphi) P_z \cos \vartheta \sin \vartheta. \end{aligned} \quad (\text{G.16})$$

G.2.1.1. $(\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z) = (1, 0, 0)$

Mit Gleichung (G.16) gilt für $\hat{P} = \hat{x}$

$$\hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P}) = \frac{\hat{P} \times \hat{E}}{|\hat{P} \times \hat{E}|} = \frac{1}{\sqrt{\cos^2 \vartheta + \sin^2 \varphi \sin^2 \vartheta}} \begin{pmatrix} 0 \\ -\cos \vartheta \\ \sin \varphi \sin \vartheta \end{pmatrix} \quad (\text{G.17})$$

und so folgt ausgehend von Gleichung (G.11) und $\hat{N} := \hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P})$ entsprechend Gleichung (G.17) somit

$$a^{\text{T}_1}(\hat{E}) = -\frac{1}{\sqrt{\cos^2 \vartheta + \cos^2 \varphi \sin^2 \vartheta}} \left(\begin{aligned} &(a_{yy} - a_{zz}) \sin \varphi \sin \vartheta \cos \vartheta \\ &+ a_{yx} \cos \varphi \sin \vartheta \cos \vartheta + a_{yz} \cos^2 \vartheta \\ &- a_{zx} \cos \varphi \sin \vartheta \sin^2 \vartheta - a_{zy} \sin^2 \varphi \sin^2 \vartheta \end{aligned} \right) \quad (\text{G.18})$$

G.2.1.2. $(\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z) = (0, 1, 0)$

Mit Gleichung (G.16) gilt für $\hat{P} = \hat{y}$

$$\hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P}) = \frac{\hat{P} \times \hat{E}}{|\hat{P} \times \hat{E}|} = \frac{1}{\sqrt{\cos^2 \vartheta + \sin^2 \varphi \sin^2 \vartheta}} \begin{pmatrix} \cos \vartheta \\ 0 \\ -\cos \varphi \sin \vartheta \end{pmatrix} \quad (\text{G.19})$$

und so folgt ausgehend von Gleichung (G.11) und $\hat{N} := \hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P})$ mit $\hat{P} = \hat{y}$ entsprechend Gleichung (G.19) somit

$$a^{\text{T}_1}(\hat{E}) = \frac{1}{\sqrt{\cos^2 \vartheta + \cos^2 \varphi \sin^2 \vartheta}} \left(\begin{aligned} &(a_{xx} - a_{zz}) \cos \varphi \sin \vartheta \cos \vartheta \\ &+ a_{xy} \sin \varphi \sin \vartheta \cos \vartheta + a_{xz} \cos^2 \vartheta \\ &- a_{zx} \cos^2 \varphi \sin^2 \vartheta - a_{zy} \sin \varphi \cos \varphi \sin^2 \vartheta \end{aligned} \right) \quad (\text{G.20})$$

G.2.1.3. $(\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z) = (0, 0, 1)$

Mit Gleichung (G.16) gilt für $\hat{P} = \hat{z}$

$$\hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P}) = \frac{\hat{P} \times \hat{E}}{|\hat{P} \times \hat{E}|} = \begin{pmatrix} -\sin \varphi \\ \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{G.21})$$

und so folgt ausgehend von Gleichung (G.11) und $\hat{N} := \hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P})$ mit $\hat{P} = \hat{z}$ entsprechend Gleichung (G.21) somit

$$\begin{aligned} a^{\text{T}_1}(\hat{E}) &= -(a_{xx} - a_{yy}) \cos \varphi \sin \varphi \sin \vartheta \\ &\quad + (a_{yx} \cos^2 \varphi - a_{xy} \sin^2 \varphi) \sin \vartheta \\ &\quad - (a_{xz} \sin \varphi - a_{yz} \cos \varphi) \cos \vartheta \end{aligned} \quad (\text{G.22})$$

G.2.2. Transversales Tensorelement T_2

Der Einheitsvektor \hat{T}_2 kann über

$$\hat{T}_2(\hat{E}, \hat{P}) = \hat{E} \times \hat{T}_1(\hat{E}, \hat{P}) \quad (\text{G.23})$$

$$= \hat{E} \times \frac{\hat{P} \times \hat{E}}{|\hat{P} \times \hat{E}|} \quad (\text{G.24})$$

mit $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c}$

$$= \frac{1}{|\hat{P} \times \hat{E}|} \left((\hat{E} \cdot \hat{E})\hat{P} - (\hat{E} \cdot \hat{P})\hat{E} \right) \quad (\text{G.25})$$

zu

$$= \frac{1}{|\hat{P} \times \hat{E}|} \left(\hat{P} - (\hat{E} \cdot \hat{P})\hat{E} \right) \quad (\text{G.26})$$

umgeschrieben werden kann. Für das entsprechende Tensorelement a^{T_2} gilt somit

$$a^{\text{T}_2}(\hat{E}) = \frac{\mathbf{A}(\mathbf{E}) \cdot \hat{T}_2(\hat{E}, \hat{P})}{E} \quad (\text{G.27})$$

$$= \frac{1}{|\hat{P} \times \hat{E}|} \left(\frac{\mathbf{A}(\mathbf{E}) \cdot \hat{P}}{E} - (\hat{E} \cdot \hat{P}) \frac{\mathbf{A}(\mathbf{E}) \cdot \hat{E}}{E} \right) \quad (\text{G.28})$$

und mit Gleichung (G.12) folgt

$$= \frac{1}{|\hat{P} \times \hat{E}|} \left(\frac{\mathbf{A}(\mathbf{E}) \cdot \hat{P}}{E} - \hat{E}_\gamma a^{\text{L}}(\hat{E}) \right). \quad (\text{G.29})$$

Für die ebenfalls zuvor betrachteten Spezialfälle $\hat{P} \in \hat{\gamma}$ und $\gamma \in \{x, y, z\}$ gilt unter Verwendung von Gleichung (G.2) somit

$$a^{\text{T}_2}(\hat{E}) = \frac{1}{|\hat{P} \times \hat{E}|} \left((\hat{a}\hat{E})_\gamma - \hat{E}_\gamma a^{\text{L}}(\hat{E}) \right). \quad (\text{G.30})$$

Auf explizite Darstellungen für a^{T_2} wird verzichtet.

G.3. Effizienz einer Größe

Der anomale Hall-Effekt wird im Allgemeinen nicht direkt durch die anomale Hall-Leitfähigkeit σ^{AHE} , sondern durch den anomalen Hall-Winkel α^{AHE} quantifiziert. Der anomale Hall-Winkel definiert über

$$\alpha^{\text{AHE}}(\hat{\mathbf{E}}) = \frac{j^{\text{AHE}}(\mathbf{E}) \cdot \hat{\mathbf{T}}_1(\hat{\mathbf{E}}, \hat{\mathbf{P}})}{j(\mathbf{E}) \cdot \hat{\mathbf{E}}} \quad (\text{G.31})$$

beschreibt die Effizienz der Konversion einer elektrischen Stromdichte in Richtung des äußeren elektrischen Feldes in die anomale Hall-Stromdichte senkrecht zum äußeren elektrischen Feld \mathbf{E} und senkrecht zur Magnetisierung \mathbf{M} . Der anomale Hall-Winkel kann auf beliebige Größen A verallgemeinert werden. Sei hierzu $\hat{\mathbf{N}} \in \{\hat{\mathbf{E}}, \hat{\mathbf{T}}_1, \hat{\mathbf{T}}_2\}$, dann gilt mit $\mathbf{N} \in \{\mathbf{L}, \mathbf{T}_1, \mathbf{T}_2\}$

$$\alpha^{\mathbf{N}}(\hat{\mathbf{E}}) := \frac{A(\mathbf{E}) \cdot \hat{\mathbf{N}}}{j(\mathbf{E}) \cdot \hat{\mathbf{E}}} \quad (\text{G.32})$$

$$= \frac{\frac{A(\mathbf{E}) \cdot \hat{\mathbf{N}}}{E}}{\frac{j(\mathbf{E}) \cdot \hat{\mathbf{E}}}{E}} \quad (\text{G.33})$$

$$= \frac{a^{\mathbf{N}}(\hat{\mathbf{E}})}{\sigma^{\mathbf{L}}(\hat{\mathbf{E}})} \quad (\text{G.34})$$

mit Gleichungen (G.11) und (G.12)

$$= \left[\begin{aligned} &(a_{xx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{xy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{xz} \cos \vartheta) \hat{\mathbf{N}}_x \\ &+ (a_{yx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{yy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{yz} \cos \vartheta) \hat{\mathbf{N}}_y \\ &+ (a_{zx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{zy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{zz} \cos \vartheta) \hat{\mathbf{N}}_z \end{aligned} \right] / \left[\begin{aligned} &(\sigma_{xx} \cos^2 \varphi + \sigma_{yy} \sin^2 \varphi) \sin^2 \vartheta + \sigma_{zz} \cos^2 \vartheta \\ &+ (\sigma_{xy} + \sigma_{yx}) \cos \varphi \sin \varphi \sin^2 \vartheta \\ &+ [(\sigma_{xz} + \sigma_{zx}) \cos \varphi + (\sigma_{yz} + \sigma_{zy}) \sin \varphi] \sin \vartheta \cos \vartheta \end{aligned} \right] \quad (\text{G.35})$$

Von besonderem Interesse sind die Größen $\alpha^{\mathbf{N}}$, falls A die anomale Hall-Stromdichte j^{AHE} bzw. falls A die Spin-Hall-Stromdichte $j^{\gamma\text{SHE}}$ darstellt. In diesen Fällen, d.h. für $A := j^{\text{AHE}}$ und $A := j^{\gamma\text{SHE}}$ beschreibt $\alpha^{\mathbf{N}}$ mit $\mathbf{N} := \mathbf{T}_1$ ($\hat{\mathbf{N}} := \hat{\mathbf{T}}_1$) den anomalen Hall-Winkel α^{AHE} mit $\hat{\mathbf{P}} := \hat{\mathbf{M}}$ bzw. den Spin-Hall-Winkel $\alpha^{\gamma\text{SHE}}$ mit $\hat{\mathbf{P}} := \hat{\mathbf{S}}^\gamma$.

G.4. Winkel zwischen einer vektoriellen Größe und einer beliebigen Richtung

Die Orientierung einer Größe A im dreidimensionalen Raum kann über den Winkel zwischen der Größe A und einer beliebigen Richtung \hat{R} beschrieben werden. Somit kann z. B. die relative Orientierung der durch den Edelstein-Effekt induzierten Spin-Dichte bzgl. der Magnetisierung betrachtet werden.

Für eine beliebige makroskopische Größe $A \in \{j, j^\gamma, s, T\}$ und eine beliebige Richtung \hat{R} mit $\hat{R} = 1$ gilt für den zwischen A und \hat{R} eingeschlossenen Winkel

$$\sphericalangle(A(E), \hat{R}) = \arccos\left(\frac{A(E) \cdot \hat{R}}{A(E)\hat{R}}\right) \quad (G.36)$$

$$= \arccos\left(\frac{\frac{A(E) \cdot \hat{R}}{E}}{\frac{A(E)\hat{R}}{E}}\right) \quad (G.37)$$

bzw. mit $\hat{R} = 1$ und Gleichung (G.2) folgt

$$= \arccos\left(\frac{a^R(\hat{E})}{|\hat{a}\hat{E}|}\right) \quad (G.38)$$

während abschließend mit Gleichung (G.11) und mit Gleichungen (G.1) und (G.3)

$$\begin{aligned} &= \arccos\left(\left(\left(\begin{aligned} &(a_{xx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{xy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{xz} \cos \vartheta) \hat{R}_x \\ &+ (a_{yx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{yy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{yz} \cos \vartheta) \hat{R}_y \\ &+ (a_{zx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{zy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{zz} \cos \vartheta) \hat{R}_z \end{aligned}\right) \right) / \right. \\ &\left. \left(\begin{aligned} &(a_{xx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{xy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{xz} \cos \vartheta)^2 \\ &+ (a_{yx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{yy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{yz} \cos \vartheta)^2 \\ &+ (a_{zx} \cos \varphi \sin \vartheta + a_{zy} \sin \varphi \sin \vartheta + a_{zz} \cos \vartheta)^2 \end{aligned}\right)^{1/2}\right) \quad (G.39) \end{aligned}$$

gilt.

H. Transportkoeffizienten in anisotroper Relaxationszeitsnäherung

Ausgehend von Gleichung (2.147) und der Darstellung der mittleren freien Weglänge in anisotroper Relaxationszeitsnäherung in Gleichung (3.6) sind die Tensorelemente in anisotroper Relaxationszeitsnäherung durch

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{(0)} = \xi_{\hat{a}} \sum_{v_s} \int_{S_{v_s}^F} \frac{dS_{v_s}(\mathbf{k})}{\hbar v_{v_s}(\mathbf{k})} A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \tau_{v_s}(\mathbf{k}) v_{v_s}^{\beta}(\mathbf{k}) \quad (\text{H.1})$$

gegeben.

H.1. Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

H.1.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche

H.1.1.1. Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$

H.1.1.1.1 Longitudinale elektrische Leitfähigkeit

H.1.1.1.1.1 σ_{xx}

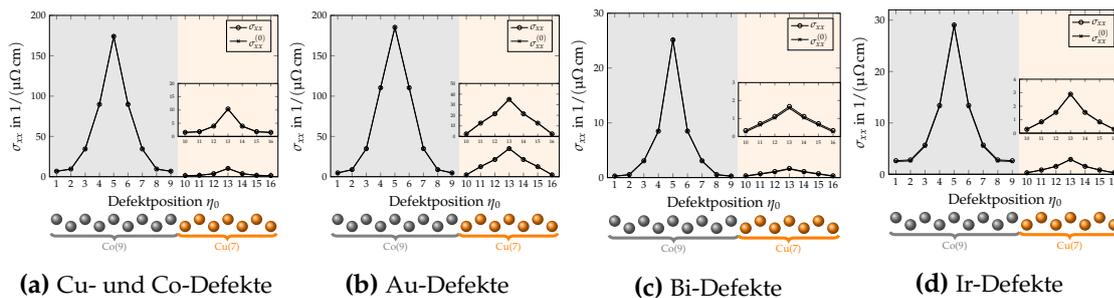


Abbildung H.1.1.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{xx} (o) und longitudinale elektrische Leitfähigkeiten in anisotroper Relaxationszeitsnäherung $\sigma_{xx}^{(0)}$ (x) für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

H.1.1.1.1.2 σ_{zz}

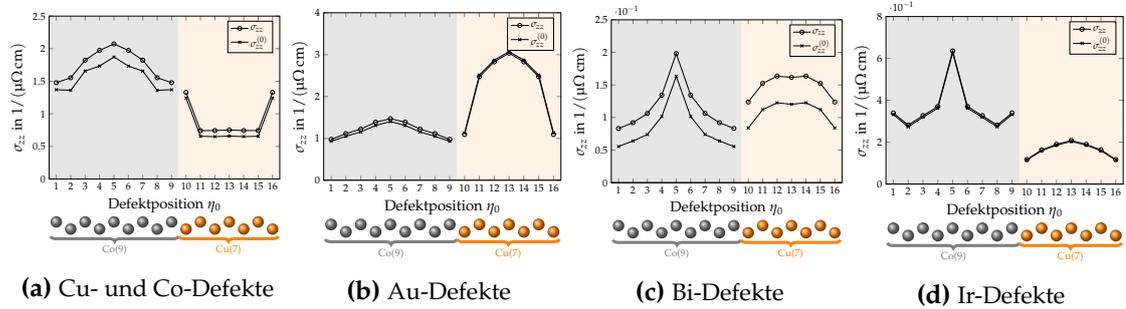


Abbildung H.1.2.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{zz} (\circ) und longitudinale elektrische Leitfähigkeiten in anisotroper Relaxationszeitnäherung $\sigma_{zz}^{(0)}$ (\times) für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

H.1.1.2. Edelstein-Tensor $\widehat{\chi}$

H.1.1.2.1 Longitudinale Edelstein-Tensorelemente

H.1.1.2.1.1 χ_{xx}

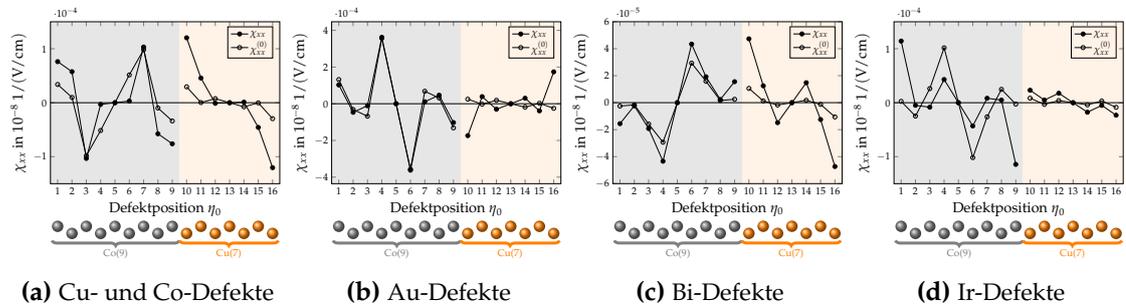


Abbildung H.1.3.: Longitudinale Edelstein-Tensorelemente χ_{xx} (\bullet) und longitudinale Edelstein-Tensorelemente in anisotroper Relaxationszeitnäherung $\chi_{xx}^{(0)}$ (\circ) für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{z}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

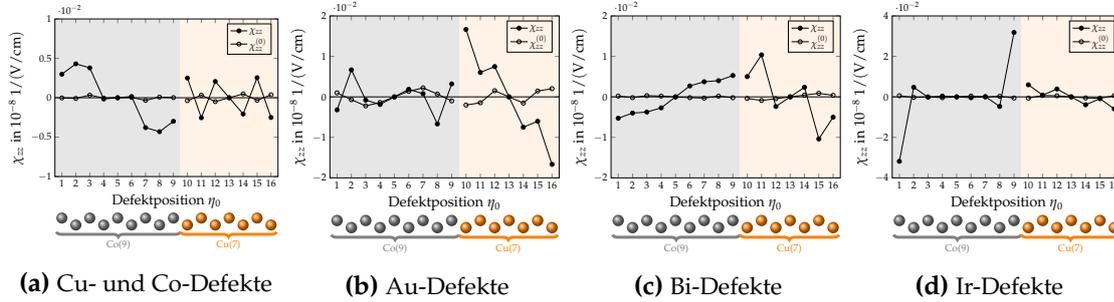
H.1.1.2.1.2 χ_{zz}


Abbildung H.1.4.: Longitudinale Edelstein-Tensorelemente χ_{zz} (●) und longitudinale Edelstein-Tensorelemente in anisotroper Relaxationszeitnäherung $\chi_{zz}^{(0)}$ (○) für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

H.1.1.2.2 Transversale Edelstein-Tensorelemente

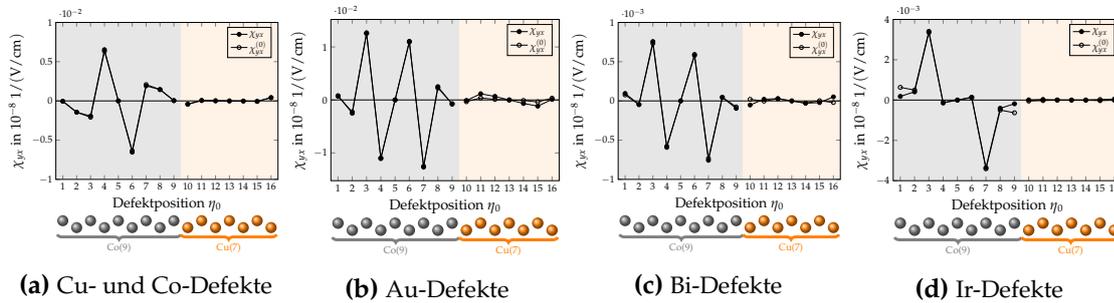
 H.1.1.2.2.1 χ_{yx}


Abbildung H.1.5.: Longitudinale Edelstein-Tensorelemente χ_{yx} (●) und longitudinale Edelstein-Tensorelemente in anisotroper Relaxationszeitnäherung $\chi_{yx}^{(0)}$ (○) für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

H.1.1.3. Spin-Orbit-Torkance \hat{t}

H.1.1.3.1 Longitudinale Spin-Orbit-Torkance

H.1.1.3.1.1 t_{xx}

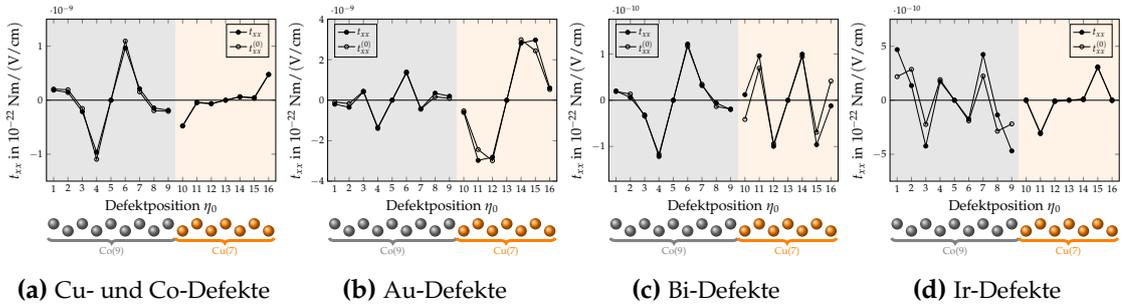


Abbildung H.1.6.: Longitudinale Spin-Orbit-Torkance t_{xx} (●) und longitudinale Spin-Orbit-Torkance in anisotroper Relaxationszeitnäherung $t_{xx}^{(0)}$ (○) für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

H.1.1.3.2 Transversale Spin-Orbit-Torkance

H.1.1.3.2.1 t_{yx}

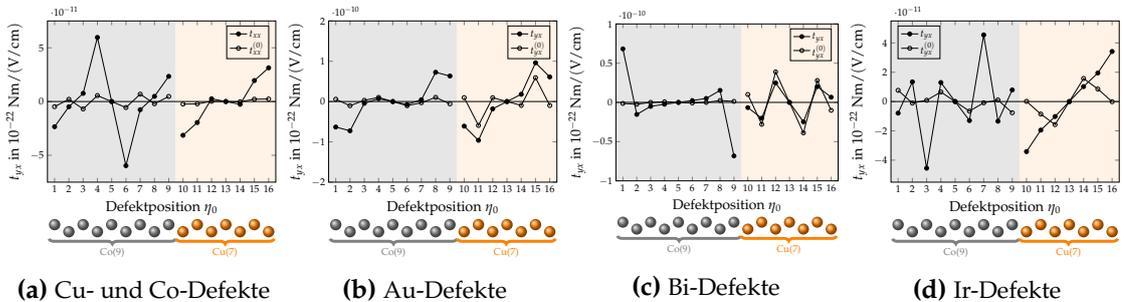


Abbildung H.1.7.: Transversale Spin-Orbit-Torkance t_{yx} (●) und transversale Spin-Orbit-Torkance in anisotroper Relaxationszeitnäherung $t_{yx}^{(0)}$ (○) für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

I. Güte des Edelstein-Tensors und der Spin-Orbit-Torkance

I.1. Problembeschreibung

Wie in Anhang D.1 dargestellt, gilt in den gestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

$$\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) = -\Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; -\eta_0), \quad (\text{I.1})$$

sodass für die Tensorelemente

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) = -\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(-\eta_0) \quad (\text{I.2})$$

gilt. Hierbei ist $A_{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{E}) = \sum_{\beta} a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} E_{\beta}$ und $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)$ ist durch $R(\mathcal{I})A = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)A$ bestimmt. Wegen $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(J) = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(J^{\gamma}) = -1$ folgt somit für die Elemente des Tensors der elektrischen Leitfähigkeit $\sigma_{\alpha\beta}$ und für die Elemente des Tensors der Spin-Leitfähigkeit $\sigma_{\alpha\beta}^{\gamma}$

$$\sigma_{\alpha\beta}(\eta_0) = \sigma_{\alpha\beta}(-\eta_0) \quad \text{bzw.} \quad \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma}(\eta_0) = \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma}(-\eta_0) \quad (\text{I.3})$$

während für die Elemente des Edelstein-Tensors $\chi_{\alpha\beta}$ und für die Elemente der Spin-Orbit-Torkance $t_{\alpha\beta}$ wegen $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(S) = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(T) = +1$

$$\chi_{\alpha\beta}(\eta_0) = -\chi_{\alpha\beta}(-\eta_0) \quad \text{bzw.} \quad t_{\alpha\beta}(\eta_0) = -t_{\alpha\beta}(-\eta_0) \quad (\text{I.4})$$

gilt. Entsprechend sind die Graphen $(\eta_0, \sigma_{\alpha\beta}(\eta_0))$ bzw. $(\eta_0, \sigma_{\alpha\beta}^{\gamma}(\eta_0))$ achsensymmetrisch zur Defektposition $\eta_0 = 5$ innerhalb der ferromagnetischen Schicht bzw. achsensymmetrisch zur Defektposition $\eta_0 = 13$ innerhalb der nichtmagnetischen Schicht. In gleicher Weise ist zu erwarten, dass die Graphen $(\eta_0, \chi_{\alpha\beta}(\eta_0))$ bzw. $(\eta_0, t_{\alpha\beta}(\eta_0))$ punktsymmetrisch zu $\eta_0 = 5$ bzw. punktsymmetrisch bzgl. $\eta_0 = 13$ innerhalb der ferromagnetischen Schicht bzw. innerhalb der nichtmagnetischen Schicht sind. Für Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$) mit Au-Defekten sind die Graphen (η_0, σ_{yx}) , $(\eta_0, \sigma_{yx}^z(\eta_0))$, $(\eta_0, \chi_{zz}(\eta_0))$, und $(\eta_0, t_{yx}(\eta_0))$ in Abb. I.1.1 dargestellt. Anhand Abb. I.1.1 (a) und I.1.1 (b) erkennt man, dass die Graphen der transversalen elektrischen Leitfähigkeit und die Graphen der transversalen Spin-Leitfähigkeit die Symmetrie aufweisen. Für die Graphen des longitudinalen Edelstein-Tensorelement und für die Graphen der transversalen Spin-Orbit-Torkance in Abb. I.1.1 (c) und I.1.1 (d) zeigen sich Abweichungen von der zu erwartenden Punktsymmetrie. In der Arbeit wurden als Gründe für die Abweichung von der Symmetrie

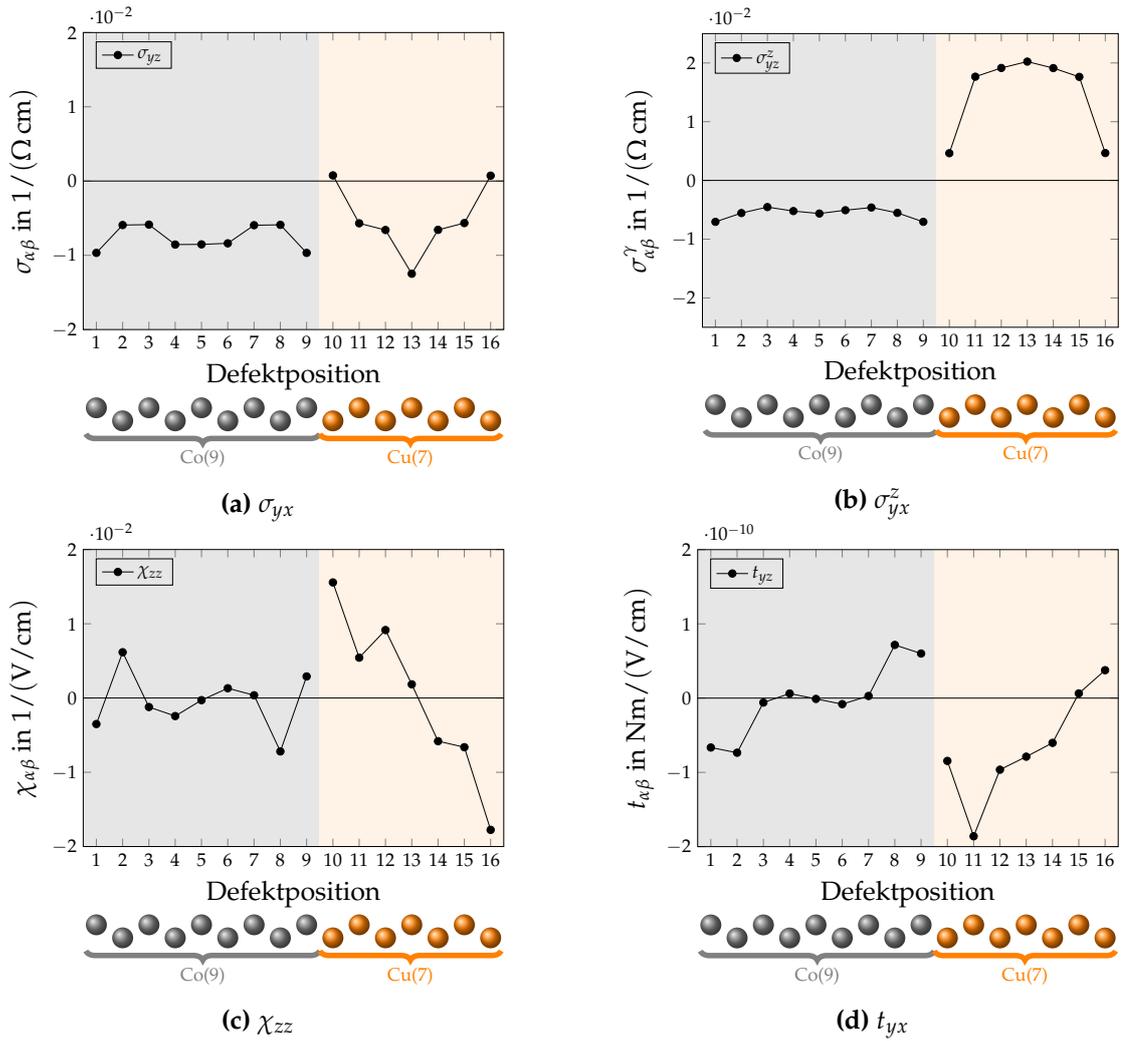


Abbildung I.1.1.: (a) Transversale elektrische Leitfähigkeit σ_{yx} , (b) transversale Spin-Leitfähigkeit σ_{yx}^z , (c) longitudinales Edelstein-Tensorelement χ_{zz} , und (d) transversale Spin-Orbit-Torkance in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) mit Au-Defekten. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1 \text{ at.}\%$.

im Falle des Edelstein-Tensors und der Spin-Orbit-Torkance numerische Instabilitäten angegeben. Diese numerischen Instabilitäten sollen im folgenden diskutiert werden, insbesondere die Bedeutung des numerischen Fehlers bei der Bestimmung der mittleren freien Weglänge.

1.2. Äquivalente Darstellung des Tensor \hat{a}

Für einen beliebigen Tensor \hat{a} sind die Elemente $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$ für eine beliebige Defektposition η_0 durch

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) = \zeta_{\hat{a}} \sum_{v_s} \int_{S_{v_s}^F} \frac{dS_{v_s}(\mathbf{k})}{\hbar v_{v_s}(\mathbf{k})} A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{v_s}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) \quad (\text{I.5})$$

gegeben. Nun besitzen die ungestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten Raumversionssymmetrie. Somit ist $-\mathbf{k} \in S_{v_s}^F = \{\mathbf{k} \in \text{BZ} : E_{v_s}(\mathbf{k}) = E_F\}$ genau dann wenn $\mathbf{k} \in S_{v_s}^F = \{\mathbf{k} \in \text{BZ} : E_{v_s}(\mathbf{k}) = E_F\}$ ist. Entsprechend kann $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$ auch über

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) = \zeta_{\hat{a}} \sum_{v_s} \int_{S_{v_s}^F} \frac{dS_{v_s}(-\mathbf{k})}{\hbar v_{v_s}(-\mathbf{k})} A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(-\mathbf{k}) \Lambda_{v_s}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0) \quad (\text{I.6})$$

bestimmt werden und es gilt

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) = \frac{1}{2} \left(\zeta_{\hat{a}} \sum_{v_s} \int_{S_{v_s}^F} \frac{dS_{v_s}(\mathbf{k})}{\hbar v_{v_s}(\mathbf{k})} A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{v_s}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) + \zeta_{\hat{a}} \sum_{v_s} \int_{S_{v_s}^F} \frac{dS_{v_s}(-\mathbf{k})}{\hbar v_{v_s}(-\mathbf{k})} A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(-\mathbf{k}) \Lambda_{v_s}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0) \right) \quad (\text{I.7})$$

wobei mit $dS_{v_s}(-\mathbf{k}) = dS_{v_s}(\mathbf{k})$, $v_{v_s}(-\mathbf{k}) = v_{v_s}(\mathbf{k})$, und $A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(-\mathbf{k}) = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})$

$$= \frac{1}{2} \left(\zeta_{\hat{a}} \sum_{v_s} \int_{S_{v_s}^F} \frac{dS_{v_s}(\mathbf{k})}{\hbar v_{v_s}(\mathbf{k})} A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{v_s}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) + \zeta_{\hat{a}} \sum_{v_s} \int_{S_{v_s}^F} \frac{dS_{v_s}(\mathbf{k})}{\hbar v_{v_s}(\mathbf{k})} \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{v_s}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0) \right) \quad (\text{I.8})$$

$$= \zeta_{\hat{a}} \sum_{v_s} \int_{S_{v_s}^F} \frac{dS_{v_s}(\mathbf{k})}{\hbar v_{v_s}(\mathbf{k})} A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Lambda_{v_s}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) + \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \Lambda_{v_s}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \quad (\text{I.9})$$

folgt.

1.3. Numerische Fehler bei der Bestimmung von \hat{a}

Ein Element eines beliebigen Tensors \hat{a} wird über Gleichung (I.9) bestimmt, wobei in den Integranden neben der mittleren freien Weglänge ferner die Zustandsdichte $\frac{dS_{v_s}(\mathbf{k})}{\hbar v_{v_s}(\mathbf{k})}$ und der entsprechende Erwartungswert $A_{v_s}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k})$ eingehen. Der numerische Fehler der Zustandsdichten und der Erwartungswerte seien gegenüber dem numerischen Fehler der mittleren freien Weglänge zu vernachlässigen und werden in der Diskussion nicht berücksichtigt. Insbesondere sind die Zustandsdichte und Erwartungswerte

Eigenschaften der ungestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten und somit für alle Defektpositionen gleich. Insbesondere werden diese über die Eigenschaften eines einzelnen Zustandes bestimmt. Die mittlere freie Weglänge berücksichtigt einerseits durch den *scattering in*-Beitrag die Eigenschaften aller anderen Zustände und andererseits durch die Relaxationszeit entsprechend Gleichung (2.139). Wegen letzterem berücksichtigt insbesondere auch die nullte Näherung in Gleichung (2.142) bereits alle anderen Zustände der Fermi-Fläche. Sei nun $\tilde{\Lambda}_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0)$ mit

$$\tilde{\Lambda}_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) = \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) + \Delta\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0), \quad (\text{I.10})$$

die durch Iteration der linearisierten Boltzmann-Gleichung bestimmte mittlere freie Weglänge, während $\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0)$, die im Allgemeinen unbekannte exakte Wert der mittleren freien Weglänge ist. Für letzteren gelte die Beziehung

$$\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) = -\Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0). \quad (\text{I.11})$$

$\Delta\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0)$ bezeichne den numerischen Fehler, wobei im Allgemeinen $\left| \frac{\Delta\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0)}{\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0)} \right| \ll 1$ anzunehmen ist. Ferner lässt sich $\Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0)$ entsprechend

$$\Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0) = -\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) + (\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0))) \quad (\text{I.12})$$

auf $\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0)$ zurückführen. Die Tatsache, dass $\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0)) \neq 0$ ist, ist ausschließlich durch die Aufhebung der Rauminversionssymmetrie durch den Defekt gegeben. Für $\eta_0 \in \{5, 13\}$ gilt insbesondere $\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0)) = 0$ für alle $k = (kvs)$. Im Allgemeinen gilt $\left| \frac{\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0))}{\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0)} \right| \ll 1$.

I.4. Ursachen des numerischen Fehlers der mittleren freien Weglänge

Die mittlere freie Weglänge wird entsprechend Gleichungen (2.140) bis (2.142) iterativ bestimmt. Eingehende Größen sind hier im Wesentlichen die Geschwindigkeiten sowie die Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{kvs \rightarrow k'v's'}(\eta_0)$ einerseits direkt über den *scattering-in*-Beitrag und andererseits indirekt über die Relaxationszeit entsprechend Gleichung (2.139). Da der numerische Fehler der Geschwindigkeiten zu vernachlässigen ist, bestimmen im Wesentlichen die Übergangswahrscheinlichkeiten und deren numerische Fehler die numerischen Fehler der mittleren freien Weglänge. Am deutlichsten zeigt sich der Einfluss des numerischen Fehler der mittleren freien Weglänge dadurch, dass in Abb. I.1.1 (c) und I.1.1 (d) die zu erwartende Symmetrie zwischen Defektpositionen η_0 und $-\eta_0$ nicht gegeben ist. Ein detaillierterer Blick auf die zugrundeliegenden numerischen Rechnungen ausgehend von der ungestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten hin zur mittleren freien Weglänge kann Aufschluss über deren numerische Fehler

geben. So können sich die Defektpotentiale $U^n(\mathbf{r}; \eta_0)$ für η_0 und $-\eta_0$ unterscheiden. Folglich können sich die Wellenfunktionen des gestörten Systems $\psi_{kvs}^n(\mathbf{r}; \eta_0)$ entsprechend Gleichung (2.101) unterscheiden bzw. die Entwicklungskoeffizienten der gestörten Wellenfunktion $C_Q^n(kvs; \eta_0)$. Letztere werden über Gleichung (2.102) bestimmt. Die Übergangsmatrixelemente $T_{kvs \rightarrow k'v's'}(\eta_0)$ für Übergänge zwischen beliebigen Zuständen kvs und $k'v's'$ und somit die Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{kvs \rightarrow k'v's'}(\eta_0)$ werden über Gleichungen (2.126) und (2.128) mittels der Wellenfunktionen des ungestörten System, des gestörten Systems und der Potentialänderung bestimmt. Die Übergangswahrscheinlichkeiten schließlich gehen einerseits über den *scattering in*-Beitrag der linearisierten Boltzmann-Gleichung direkt in die Berechnung der mittleren freien Weglänge ein und andererseits indirekt über die anisotrope Relaxationszeit über Gleichung (2.139). Die Überlegungen für die Relaxationszeit aus Anhang B.2 lassen sich entsprechend übertragen.

1.5. Größenordnung des numerischen Fehlers der mittleren freien Weglänge

Für beliebige Defektpositionen η_0 ist der Unterschied zwischen $\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)$ und $-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)$ durch die Aufhebung der Rauminversionssymmetrie gegeben. Am Beispiel von Au-Defekten sind sowohl $\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)$ als auch $\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))$ als Mittelwert über die Fermi-Fläche in Abb. I.5.1 für $\beta \in \{x, z\}$ dargestellt. Der numerische Fehler der mittleren freien Weglänge $\Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)$ ist im Allgemeinen unbekannt. Eine mögliche Abschätzung des numerischen Fehlers ist über die mittlere freie Weglänge für Defektpositionen $\eta_0 \in \{5, 13\}$ möglich. Für den Mittelwert der Größe $\left| \frac{\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right|$ über die Fermi-Fläche¹ gilt

$$\left\langle \left| \frac{\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F} \quad (\text{I.13})$$

mit Gleichung (I.10)

$$= \left\langle \left| \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) + \Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0) + \Delta\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F} \quad (\text{I.14})$$

$$= \left\langle \left| \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)) + \Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) + \Delta\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \right| \right\rangle_{S_F} \quad (\text{I.15})$$

¹Sei $A_{vs}(\mathbf{k})$ eine beliebige Größe. Der Mittelwert dieser Größe über die Fermi-Fläche ist über $A :=$

$$\langle A_{vs}(\mathbf{k}) \rangle_{S_F} := \frac{\sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}(\mathbf{k})}{\sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})}} \text{ bestimmt.}$$

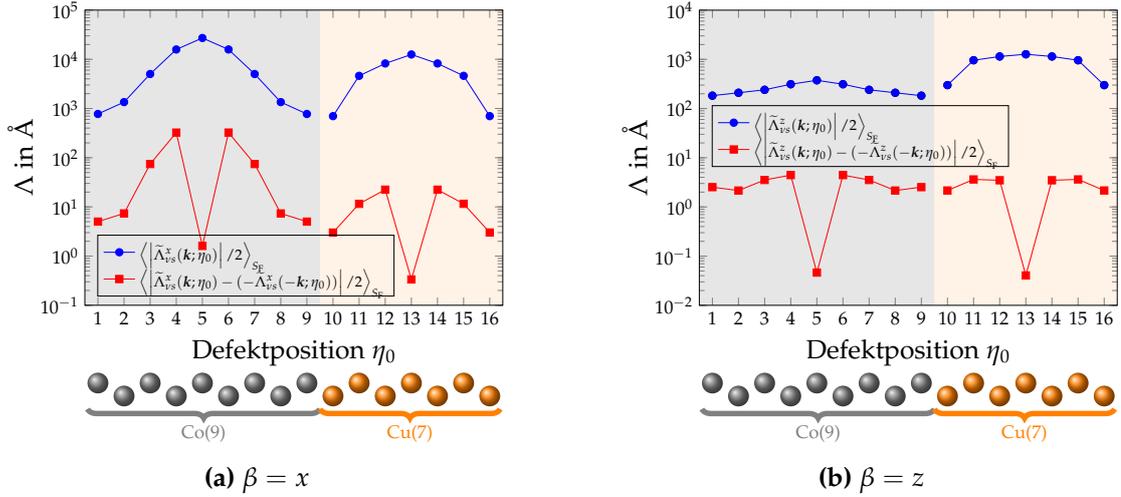


Abbildung I.5.1.: Mittlere Größen von $|\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)|$ und von $|\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))|$ für (a) $\beta = x$ und für (b) $\beta = z$ in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für Au-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \mathbf{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{z}}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

mit $|a + b| \leq |a| + |b|$ für alle $a, b \in \mathbb{R}$

$$\leq \left\langle \left| \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| + \left| \frac{\Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) + \Delta\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \right| \right\rangle_{S_F} \quad (\text{I.16})$$

$$= \left\langle \left| \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F} + \left\langle \left| \frac{\Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) + \Delta\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \right| \right\rangle_{S_F} \quad (\text{I.17})$$

mit $|a + b| \leq |a| + |b|$ für alle $a, b \in \mathbb{R}$

$$\leq \left\langle \left| \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F} + \left\langle \left| \frac{\Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \right| + \left| \frac{\Delta\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \right| \right\rangle_{S_F} \quad (\text{I.18})$$

$$= \left\langle \left| \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F} + \left\langle \left| \frac{\Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \right| \right\rangle_{S_F} + \left\langle \left| \frac{\Delta\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \right| \right\rangle_{S_F} \quad (\text{I.19})$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \left\langle \left| \frac{\Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \right| \right\rangle_{S_F} &= \left\langle \left| \frac{\Delta\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \right| \right\rangle_{S_F} \\ &= \left\langle \left| \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F} + \left\langle \left| \Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right| \right\rangle_{S_F} \end{aligned} \quad (\text{I.20})$$

Für $\eta_0 \in \{5, 13\}$ gilt

$$\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) = -\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0) \quad (\text{I.21})$$

für alle Zustände kvs , sodass insbesondere auch

$$\left\langle \left| \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F} = 0 \quad (\text{I.22})$$

gilt. Somit reduziert sich Gleichung (I.20) zu

$$\left\langle \left| \frac{\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F} \leq \left\langle \left| \Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right| \right\rangle_{S_F}, \quad (\text{I.23})$$

sodass $\left\langle \left| \frac{\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F}$ für $\eta_0 \in \{5, 13\}$ eine untere Schranke für den mittleren Fehler der mittleren freien Weglänge darstellt. Entsprechend Abb. I.5.1 ist $\left\langle \left| \frac{\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F}$ für $\eta_0 = 5$ von der Größenordnung 10^0 \AA und für $\eta_0 = 13$ von der Größenordnung 10^{-1} \AA . Für eine grobe Näherung kann somit der mittlere numerische Fehler der mittleren freien Weglänge für Defekte innerhalb der ferromagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{1, \dots, 9\}$) mit 10^0 \AA und für Defekte innerhalb der nichtmagnetischen Schicht ($\eta_0 \in \{10, \dots, 16\}$) mit 10^{-1} \AA angenommen werden. Für den Mittelwert der mittleren freien Weglänge $\left\langle \left| \tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right| \right\rangle_{S_F}$ gilt $\mathcal{O} \left(\left\langle \left| \tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right| \right\rangle_{S_F} \right) = 10^3 \dots 10^4 \text{ \AA}$. Entsprechend gilt

$$\mathcal{O} \left(\left| \frac{\Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)}{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)} \right| \right) \quad (\text{I.24})$$

$$\approx \mathcal{O} \left(\frac{\left\langle \Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right\rangle_{S_F}}{\left\langle \tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right\rangle_{S_F}} \right) \quad (\text{I.25})$$

$$= \frac{\left\langle \Delta\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right\rangle_{S_F}}{\left\langle \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right\rangle_{S_F}} \mathcal{O} \left(\left\langle \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right\rangle_{S_F} \right) \quad (\text{I.26})$$

$$= 10^{-5} \dots 10^{-3} \quad (\text{I.27})$$

Für $\left\langle \left| \frac{\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F}$ für $\eta_0 \notin \{5, 13\}$ gilt im Mittel
 $\mathcal{O} \left(\left\langle \left| \frac{\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \right| \right\rangle_{S_F} \right) = 10^0 \dots 10^2 \text{ \AA}$, sodass

$$\mathcal{O} \left(\left| \frac{\Delta \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)}{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)} \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)) \right| \right) \quad (\text{I.28})$$

$$\approx \mathcal{O} \left(\frac{\langle \Delta \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \rangle_{S_F}}{\langle \tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)) \rangle_{S_F}} \right) \quad (\text{I.29})$$

$$= \frac{\mathcal{O} \left(\langle \Delta \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \rangle_{S_F} \right)}{\mathcal{O} \left(\langle \tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)) \rangle_{S_F} \right)} \quad (\text{I.30})$$

$$= 10^{-3} \dots 10^0 \quad (\text{I.31})$$

ist.

I.6. Einfluss des numerischen Fehler der mittleren freien Weglänge auf die Tensorelemente

Ausgehend von Gleichung (I.9) mit Gleichung (I.10) überträgt sich der numerische Fehler der mittleren freien Weglänge auf das Tensorelement $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$ und es gilt

$$\tilde{a}_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) \quad (\text{I.32})$$

$$= \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) + \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \tilde{\Lambda}_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \quad (\text{I.33})$$

mit Gleichung (I.10)

$$= \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) + \Delta \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) + \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) (\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0) + \Delta \Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \quad (\text{I.34})$$

und mit Gleichung (I.12) folgt

$$\begin{aligned}
 &= \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \\
 &\quad \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) + \Delta \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \\
 &\quad + \frac{\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) (-\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) + (\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)))}{2} \\
 &\quad + \Delta \Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \tag{I.35}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1 - \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)}{2} \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \\
 &\quad + \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \\
 &\quad + \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Delta \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) + \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \Delta \Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \tag{I.36}
 \end{aligned}$$

Der Ausdruck $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2}$ kann zu

$$\begin{aligned}
 &\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \\
 &= \frac{1}{2} \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \left(\zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right. \\
 &\quad \left. - \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)) \right) \tag{I.37}
 \end{aligned}$$

mit $dS_{vs}(\mathbf{k}) = dS_{vs}(-\mathbf{k})$, $v_{vs}(\mathbf{k}) = v_{vs}(-\mathbf{k})$ und $A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) = \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(-\mathbf{k})$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \left(\zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \right. \\
 &\quad \left. + \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(-\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(-\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(-\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0) \right) \tag{I.38}
 \end{aligned}$$

mit Gleichungen (I.5) und (I.6) zu

$$= \frac{1}{2} \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \left(a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) + \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) \right) \tag{I.39}$$

$$= \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \frac{1 + \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)}{2} a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) \tag{I.40}$$

umgeformt werden. Für die Diskussion hingegen wird weiterhin der Ausdruck in Gleichung (I.36) verwendet, während Gleichung (I.40) eine einfache Auswertung in Abhängigkeit von $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)$ zulässt. Ausgehend von Gleichung (I.36) lassen sich nun die einzelnen Fälle, d.h. $\eta_0 \in \{5, 13\}$ bzw. $\eta_0 \notin \{5, 13\}$ und $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = +1$ bzw. $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = -1$ diskutieren.

I.6.1. $\eta_0 \in \{5, 13\}$

Gilt $\eta_0 \in \{5, 13\}$ so besitzen die gestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten weiterhin Raum inversionssymmetrie. In diesen Fällen gilt

$$\frac{\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} = 0 \quad (\text{I.41})$$

für alle Zustände $k = (kvs)$, und Gleichung (I.36) reduziert sich zu

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) &= \frac{1 - \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A)}{2} \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) \\ &+ \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Delta \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) + \text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) \Delta \Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2}. \end{aligned} \quad (\text{I.42})$$

I.6.1.1. $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = -1$

Für $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = -1$, d.h. $A \in \{J, J^{\gamma}\}$ gilt ferner

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) &= \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) \\ &+ \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Delta \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) - \Delta \Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2}, \end{aligned} \quad (\text{I.43})$$

sodass wegen $\left| \frac{\Delta \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0)}{\Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0)} \right| \ll 1$ der numerische Fehler der mittleren freien Weglänge kaum ins Gewicht fällt. Somit sind die Tensoren der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$ und die Tensoren der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^{\gamma}$ im Allgemeinen gering vom numerischen Fehler beeinflusst.

I.6.1.2. $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = +1$

Sei nun $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = +1$, d.h. $A \in \{S, T\}$, so gilt

$$\tilde{a}_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) = \zeta_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Delta \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}; \eta_0) + \Delta \Lambda_{vs}^{\beta}(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2}. \quad (\text{I.44})$$

Aufgrund der weiterhin vorhandenen Raum inversionssymmetrie verschwinden sowohl der Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ als auch die Spin-Orbit-Torkance \hat{t} . Die Abweichung von $\chi_{\alpha\beta} = 0$ bzw. $t_{\alpha\beta} = 0$ ist ausschließlich durch den numerischen Fehler der mittleren freien Weglänge bestimmt.

1.6.2. $\eta_0 \notin \{5, 13\}$

Gilt nun andererseits $\eta_0 \notin \{5, 13\}$ so wird die Rauminversionssymmetrie durch den Defekt in den Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten aufgehoben. In diesen Fällen gilt im Allgemeinen

$$\frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \neq 0 \quad (\text{I.45})$$

und der numerische Wert für das Tensorelement $\tilde{a}_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$ ist durch Gleichung (I.36) gegeben.

1.6.2.1. $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = -1$

Für $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = -1$, d.h. $A \in \{J, J^\gamma\}$ gilt ferner

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) &= \tilde{\zeta}_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \\ &+ \tilde{\zeta}_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \\ &+ \tilde{\zeta}_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Delta \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - \Delta \Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \end{aligned} \quad (\text{I.46})$$

mit Gleichung (I.40)

$$\begin{aligned} &= \tilde{\zeta}_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) \\ &+ \tilde{\zeta}_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Delta \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - \Delta \Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \end{aligned} \quad (\text{I.47})$$

Wie im Fall $\eta_0 \in \{5, 13\}$ fällt wegen $\left| \frac{\Delta \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)}{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0)} \right| \ll 1$ auch in diesem Fall der numerische Fehler der mittleren freien Weglänge für den Tensor \hat{a} kaum ins Gewicht. Somit sind die Tensoren der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$ und die Tensoren der Spin-Leitfähigkeit $\hat{\sigma}^\gamma$ auch für diese Defektpositionen im Allgemeinen gering vom numerischen Fehler der mittleren freien Weglänge beeinflusst.

1.6.2.2. $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = +1$

Sei nun $\text{sgn}_{\mathcal{I}}(A) = +1$, d.h. $A \in \{S, T\}$, so gilt

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) &= \tilde{\zeta}_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2} \\ &+ \tilde{\zeta}_{\hat{a}} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \frac{\Delta \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - \Delta \Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0)}{2} \end{aligned} \quad (\text{I.48})$$

Der physikalische Wert $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0)$ wird durch die Differenz $\frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2}$ bestimmt, während der numerische Fehler für $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$ durch die numerischen Fehler der mittleren freien Weglänge bestimmt werden. Entsprechend der Abschätzung kann der numerische Fehler bisweilen in der gleichen Größenordnung wie die $\frac{\Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}; \eta_0) - (-\Lambda_{vs}^\beta(-\mathbf{k}; \eta_0))}{2}$ liegen. Nun sind die numerischen Fehler sowohl für unterschiedliche Zustände kvs als auch für unterschiedliche Defektpositionen η_0 , und somit insbesondere für η_0 und $-\eta_0$ unabhängig und unkorreliert sind. Entsprechend sind auch die numerischen Fehler für die Tensoren \hat{a} für η_0 und $-\eta_0$ unabhängig und unkorreliert. Somit kann der numerische Fehler der mittleren freien Weglänge beim Edelstein-Tensor und bei der Spin-Orbit-Torkance bedeutenden Einfluss haben und somit z. B. die zu erwartende Symmetrie der Graphen fälschlicherweise aufheben.

I.7. Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

I.7.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche

I.7.1.1. Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$

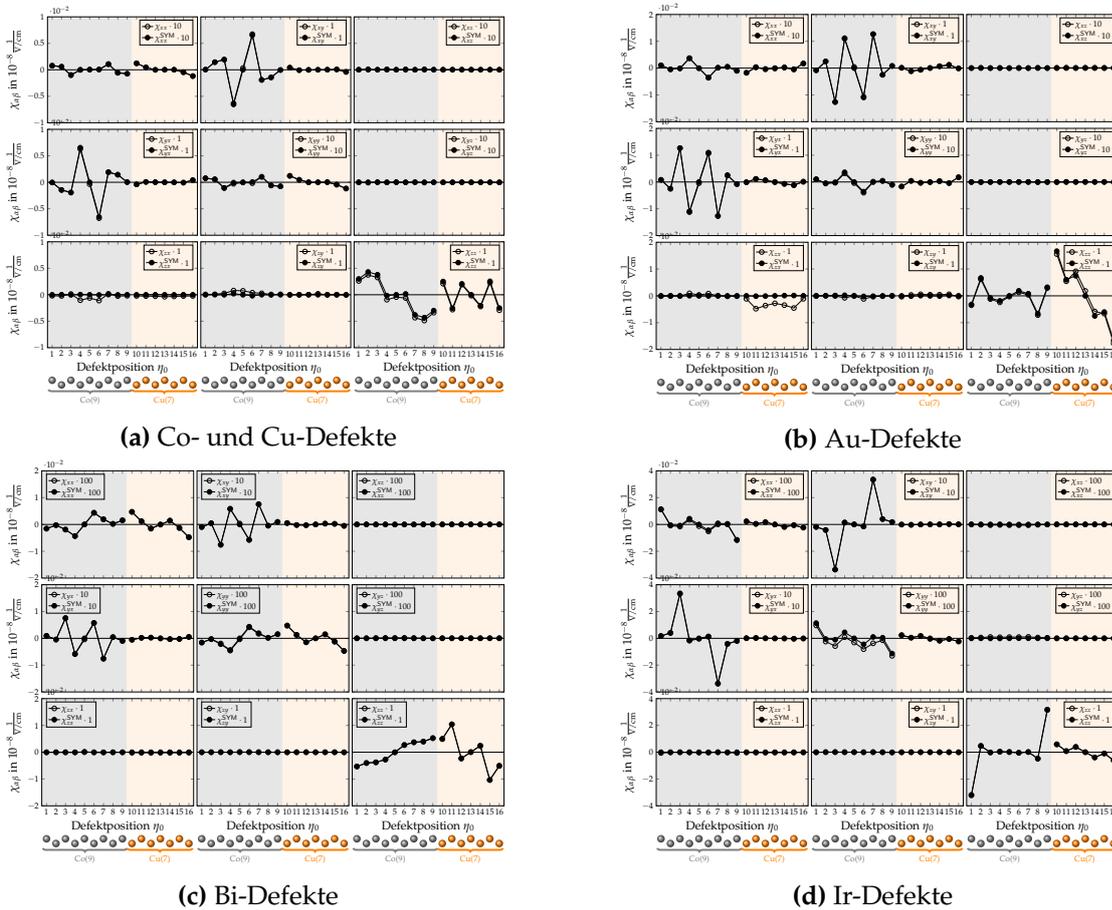


Abbildung I.7.1: Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$) mit individueller y -Achsenkalibrierung. Die Skalierungsfaktoren für die jeweiligen Tensorelemente sind in den Legenden angegeben. Dargestellt sind sowohl die Tensorelemente $\chi_{\alpha\beta}(\eta_0)$ (\circ) als auch die symmetrisierten Tensorelemente $\chi_{\alpha\beta}^{\text{SYM}}(\eta_0) := \frac{1}{2}(\chi_{\alpha\beta}(\eta_0) + (-\chi_{\alpha\beta}(-\eta_0)))$ (\bullet). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.-%.

I.7.1.2. Spin-Orbit-Torkance \hat{t}

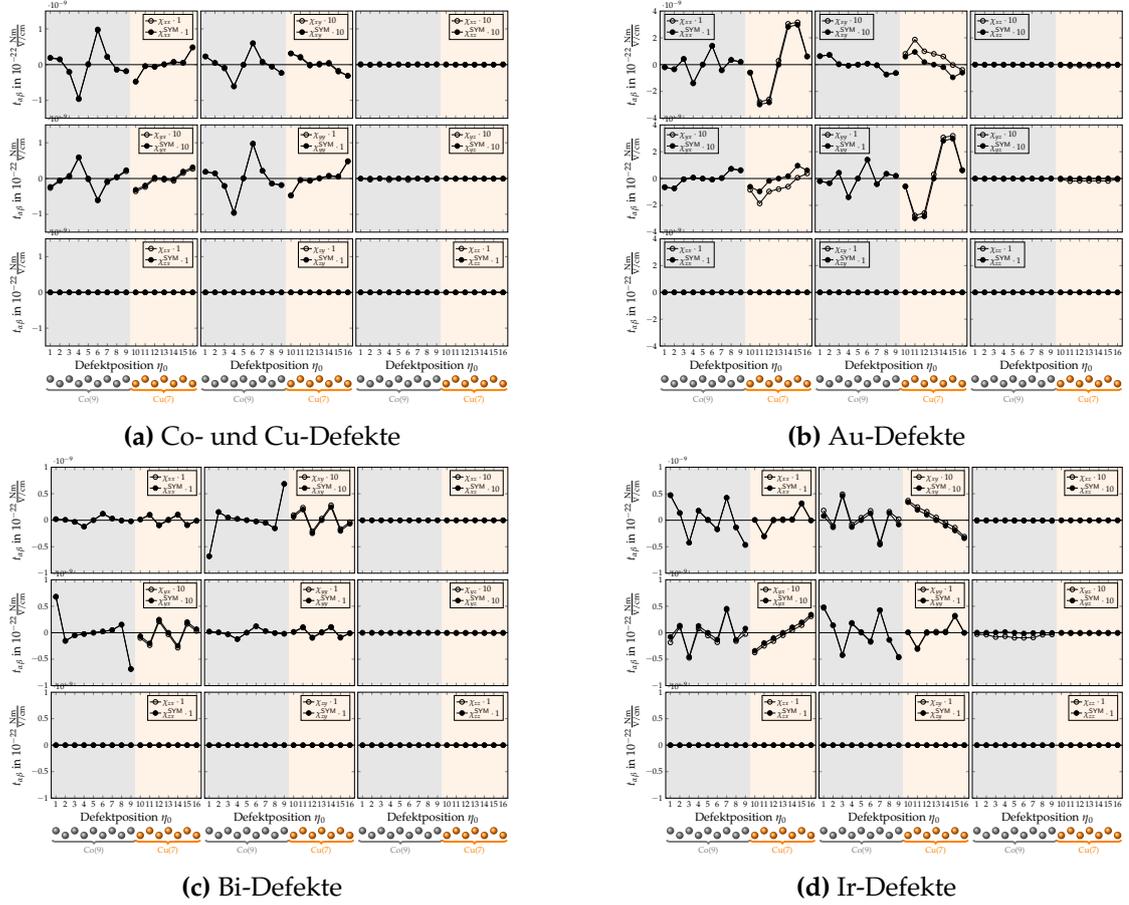


Abbildung I.7.2.: Spin-Orbit-Torkance \hat{t} für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, bzw. (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \vec{z}$) mit individueller y -Achsenkalibrierung. Die Skalierungsfaktoren für die jeweiligen Tensorelemente sind in den Legenden angegeben. Dargestellt sind sowohl die Tensorelemente $t_{\alpha\beta}(\eta_0)$ (\circ) als auch die symmetrisierten Tensorelemente $t_{\alpha\beta}^{\text{SYM}}(\eta_0) := \frac{1}{2} (t_{\alpha\beta}(\eta_0) + (-t_{\alpha\beta}(-\eta_0)))$ (\bullet). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

I.7.2. Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche

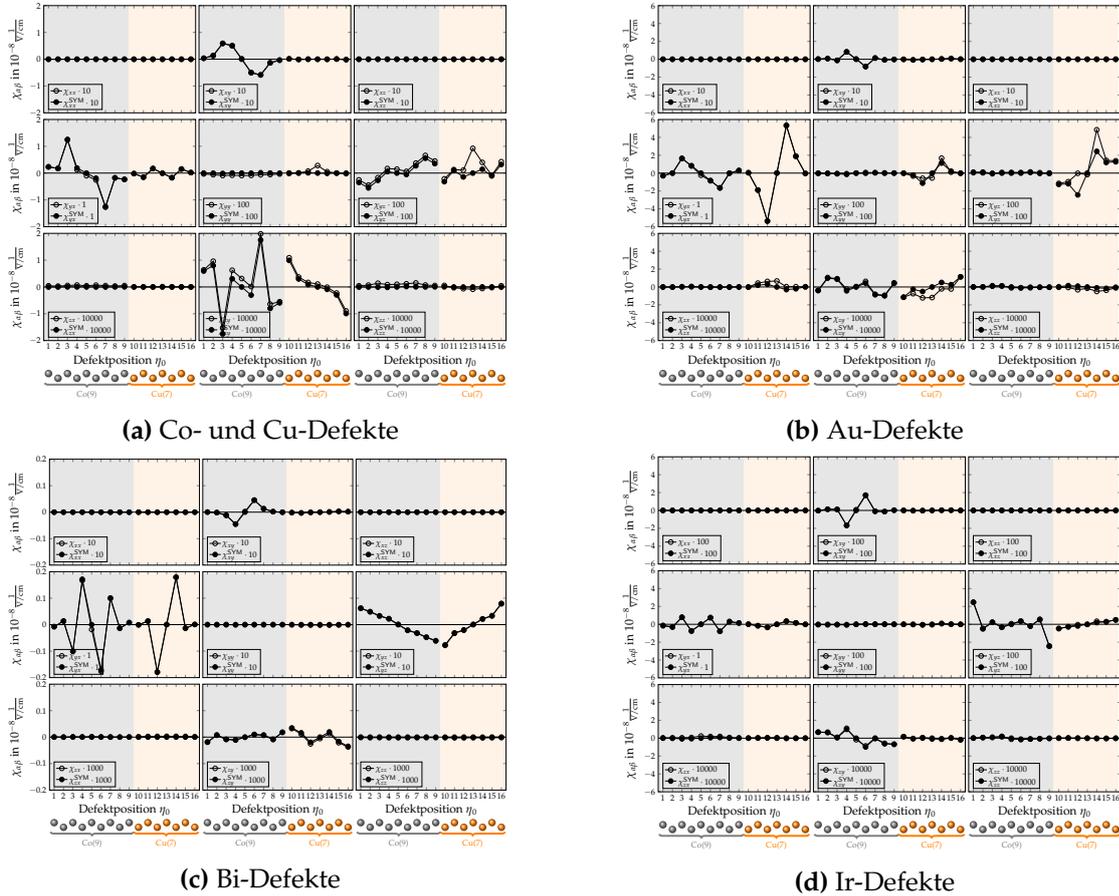
 I.7.2.1. Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$


Abbildung I.7.3.: Edelstein-Tensor $\hat{\chi}$ für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$) mit individueller y -Achsenkalibrierung. Die Skalierungsfaktoren für die jeweiligen Tensorelemente sind in den Legenden angegeben. Dargestellt sind sowohl die Tensorelemente $\chi_{\alpha\beta}$ (\circ) als auch die symmetrisierten Tensorelemente $\chi_{\alpha\beta}^{\text{SYM}}(\eta_0) := \frac{1}{2} (\chi_{\alpha\beta}(\eta_0) + (-\chi_{\alpha\beta}(-\eta_0)))$ (\bullet). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

I.7.2.2. Spin-Orbit-Torkance \hat{t}

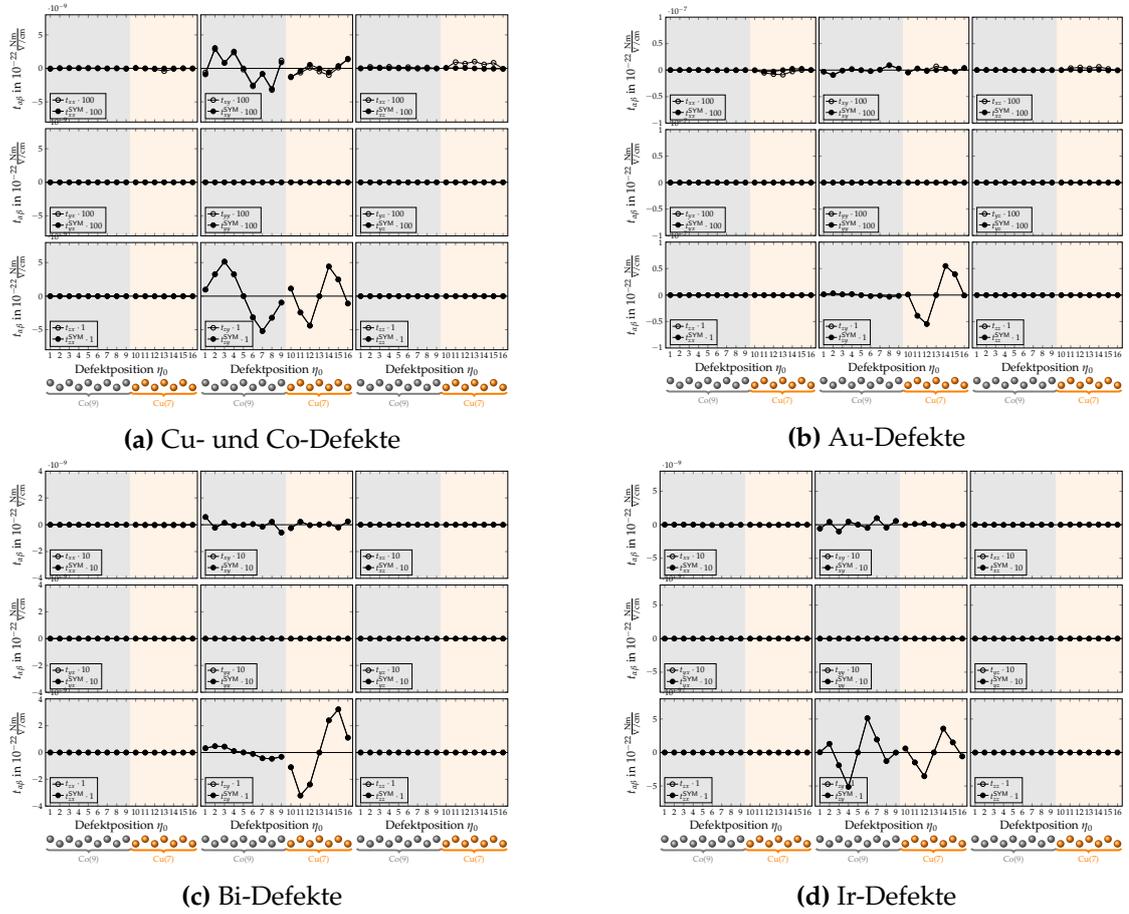


Abbildung I.7.4.: Spin-Orbit-Torkance \hat{t} für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\hat{M} = \hat{y}$) mit individueller y -Achsenkalibrierung. Die Skalierungsfaktoren für die jeweiligen Tensorelemente sind in den Legenden angegeben. Dargestellt sind sowohl die Tensorelemente $t_{\alpha\beta}(\eta_0)$ (\circ) als auch die symmetrisierten Tensorelemente $t_{\alpha\beta}^{\text{SYM}}(\eta_0) := \frac{1}{2} (t_{\alpha\beta}(\eta_0) + (-t_{\alpha\beta}(-\eta_0)))$ (\bullet). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

J. Zerlegung der Transportkoeffizienten

J.1. Beiträge der ferromagnetischen und nichtmagnetischen Schicht

Mit

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^\eta = -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n \eta}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}) \quad (\text{J.1})$$

ist der Beitrag der Schicht L $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^L$ über

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^L := \sum_{\eta \in L} a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^\eta = \sum_{\eta \in L} \left(-e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{vs} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n \eta}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}) \right) \quad (\text{J.2})$$

definiert, wobei $\{a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^L\}_L$

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = \sum_L a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^L \quad (\text{J.3})$$

erfüllen.

J.2. Beiträge der verschiedenen Klassen an Zuständen

Ausgehend von Gleichung (J.1) beschreibt

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^C := -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{\substack{vs \\ kv_s \in C}} \int_{S_{vs}^F} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} \mathring{A}_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^\beta(\mathbf{k}) \quad (\text{J.4})$$

den Beitrag der Klasse C zur Größe $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$. Hierbei erfüllen die Größen $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^C$ die Beziehung

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = \sum_C a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^C. \quad (\text{J.5})$$

J.3. Beiträge der Majoritätselektronen und Minoritätselektronen

Die Spin-Polarisation ist definiert als die Projektion des Spin-Erwartungswert S_{kvs} auf die Richtung der Magnetisierung M . Zustände mit positiver Spin-Polarisation werden als Majoritätselektronen und Zustände mit negativer Spin-Polarisation werden als Minoritätselektronen. Ausgehend von Gleichung (J.1) beschreiben

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\pm} := -e \frac{\mathfrak{V}}{(2\pi)^3} \sum_{\substack{vs \\ S_{vs}(\mathbf{k}) \cdot \widehat{M} \gtrless 0}} \int_{S_{vs}^{\text{F}}} \frac{dS_{vs}(\mathbf{k})}{\hbar v_{vs}(\mathbf{k})} A_{vs}^{\alpha_1 \dots \alpha_n}(\mathbf{k}) \Lambda_{vs}^{\beta}(\mathbf{k}) \quad (\text{J.6})$$

den Beitrag der Majoritätselektronen bzw. der Minoritätselektronen zur Größe $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$, wobei sie hierbei die Beziehung

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta} = a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{+} + a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{-} \quad (\text{J.7})$$

erfüllen.

J.4. Beiträge des symmetrischen und antisymmetrischen Beitrages

Sei $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$ ein beliebiges Tensorelement mit $\alpha_1, \dots, \alpha_n, \beta \in \{x, y, z\}$. In den betrachteten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten hängt das Tensorelement insbesondere von der Defektposition η_0 ab. Dieses Tensorelement lässt sich durch

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) = \sum_{\eta} a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta}(\eta_0) \quad (\text{J.8})$$

darstellen, wobei η die Atomposition innerhalb der Einheitszelle bezeichnet. Unter Verwendung von

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta \pm}(\eta_0) := \frac{1}{2} \left(a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta}(\eta_0) \pm a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta}(\eta_0) \right) \quad (\text{J.9})$$

folgt

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta}(\eta_0) = a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{+\eta}(\eta_0) + a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{-\eta}(\eta_0) \quad (\text{J.10})$$

für $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta}(\eta_0)$. Für das Basisatom η ist $-\eta$ über

$$-\eta := \begin{cases} (N_{\text{FM}} + 1) - \eta & \text{für } \eta \in \text{FM} = \{1, \dots, N_{\text{FM}}\} \\ (2N_{\text{FM}} + N_{\text{NM}} + 1) - \eta & \text{für } \eta \in \text{NM} = \{N_{\text{FM}} + 1, \dots, N_{\text{FM}} + N_{\text{NM}}\} \end{cases} \quad (\text{J.11})$$

definiert, wobei N_{FM} und N_{NM} die Anzahl an Basisatomen innerhalb der ferromagnetischen bzw. nichtmagnetischen Schicht bezeichnen. Wegen

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta+}(\eta_0) = a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{-\eta+}(\eta_0) \quad (\text{J.12})$$

und

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta-}(\eta_0) = -a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{-\eta-}(\eta_0) \quad (\text{J.13})$$

werden $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta+}(\eta_0)$ und $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta-}(\eta_0)$ als symmetrischer bzw. antisymmetrischer Beitrag bezeichnet. Wegen Gleichung (J.13) heben sich die antisymmetrischen Beiträge in Gleichung (J.8) auf, sodass

$$a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}(\eta_0) = \sum_{\eta} a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta}(\eta_0) = \sum_{\eta} a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{\eta+}(\eta_0) = a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}^{+}(\eta_0) \quad (\text{J.14})$$

gilt. Somit wird der integrale Wert ausschließlich durch den symmetrischen Beitrag bestimmt. Diese Eigenschaft ist unabhängig davon, ob $a_{\alpha_1 \dots \alpha_n \beta}$ einen Tensor wie die elektrische Leitfähigkeit $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta}$ bzw. die Spin-Leitfähigkeit $\sigma_{\alpha\beta}^{\gamma}$ oder einen Pseudotensor wie den Edelstein-Tensor $\chi_{\alpha\beta}$ oder die Spin-Orbit-Torkance $t_{\alpha\beta}$ darstellt.

J.5. Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

J.5.1. Magnetisierung senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche

J.5.1.1. Tensor der elektrischen Leitfähigkeit $\hat{\sigma}$

J.5.1.1.1 Anomale Hall-Leitfähigkeit

J.5.1.1.1.1 σ_{yx}^{AHE}

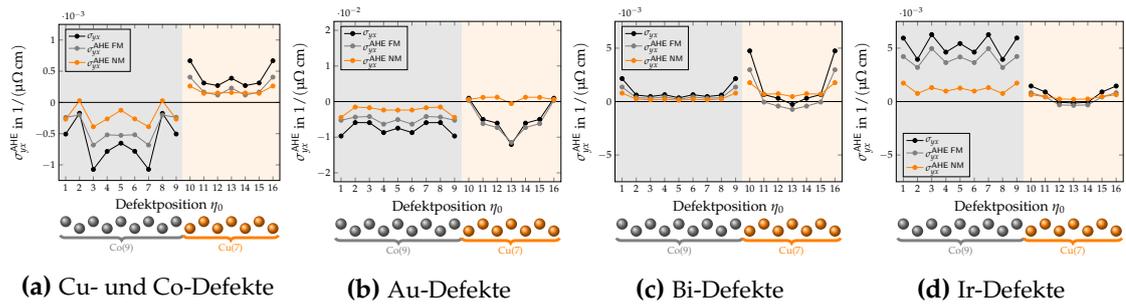


Abbildung J.5.1.: Anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Zusätzlich sind die individuellen Beiträge der Co-Schicht $\sigma_{yx}^{\text{AHE FM}}$ und der Cu-Schicht $\sigma_{yx}^{\text{AHE NM}}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

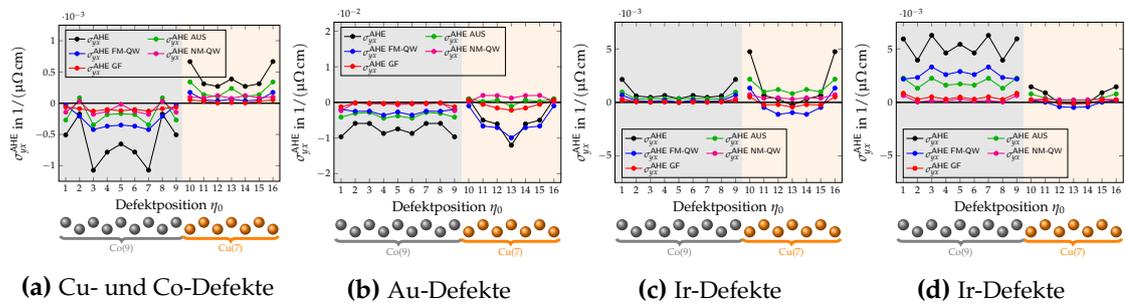


Abbildung J.5.2.: Anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{yx}^{AHE} für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Zusätzlich sind die individuellen Beiträge der Klassen $\sigma_{yx}^{\text{AHE C}}$ mit $C \in \{\text{AUS, FM-QW, NM-QW, GF}\}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

J.5.1.2. Spin-Orbit-Torkance

J.5.1.2.1 Longitudinale Spin-Orbit-Torkance

J.5.1.2.1.1 t_{xx}

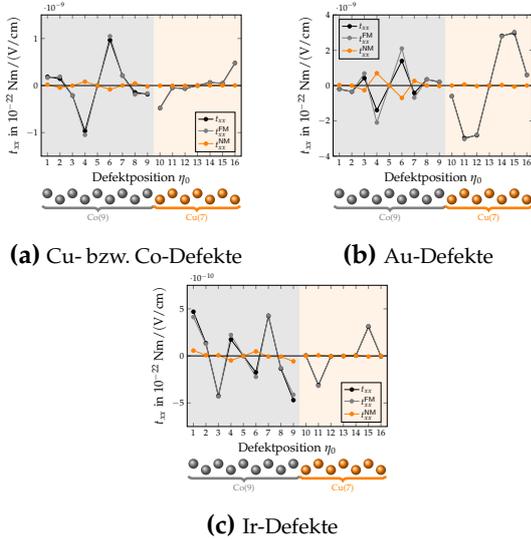
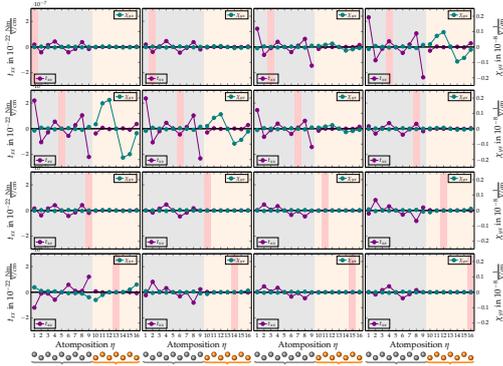
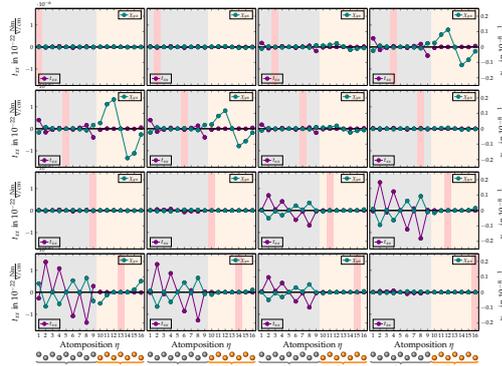


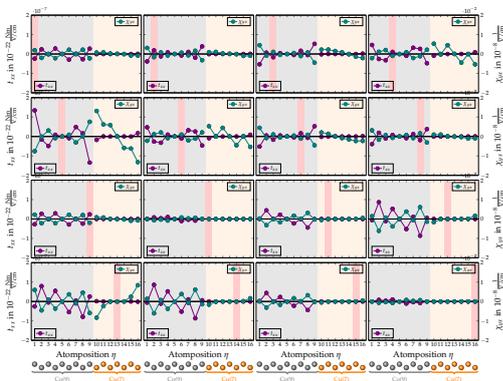
Abbildung J.5.3.: Longitudinale Spin-Orbit-Torkance t_{xx} in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (c) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Zusätzlich sind die Beiträge der ferromagnetischen Schicht t_{xx}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht t_{xx}^{NM} entsprechend Gleichung (J.2) dargestellt. Hierbei gilt $t_{xx}(\eta_0) = t_{xx}^{\text{FM}}(\eta_0) + t_{xx}^{\text{NM}}(\eta_0)$. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.



(a) Cu- und Co-Defekte



(b) Au-Defekte



(c) Ir-Defekte

Abbildung J.5.4.: Lokale Beiträge t_{xx}^{η} zur longitudinalen Spin-Orbit-Torkance t_{xx} und lokale Beiträge χ_{yx}^{η} zu transversalen Edelstein-Tensorelementen χ_{yx} für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, und (c) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

J.5.1.2.2 Transversale Spin-Orbit-Torkance

J.5.1.2.2.1 t_{yx}

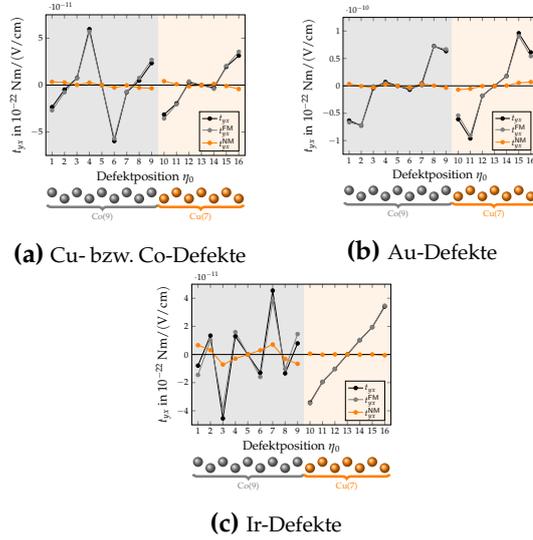


Abbildung J.5.5.: Transversale Spin-Orbit-Torkance t_{yx} in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, und (c) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Zusätzlich sind die Beiträge der ferromagnetischen Schicht t_{yx}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht t_{yx}^{NM} entsprechend Gleichung (J.2) dargestellt. Hierbei gilt $t_{yx}(\eta_0) = t_{yx}^{FM}(\eta_0) + t_{yx}^{NM}(\eta_0)$. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

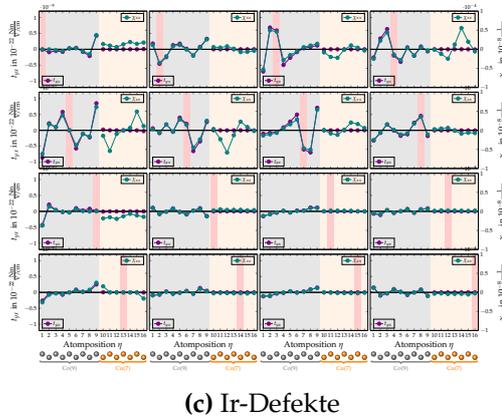
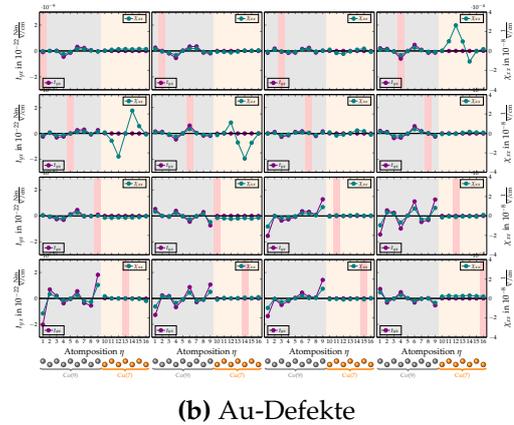
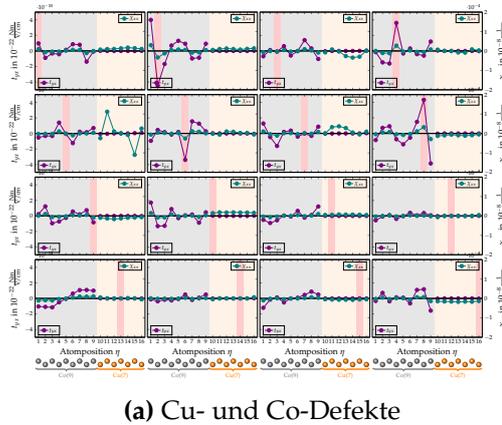


Abbildung J.5.6.: Lokale Beiträge t_{yx}^{η} zur transversalen Spin-Orbit-Torkance t_{yx} und lokale Beiträge χ_{xx}^{η} zur longitudinalen Edelstein-Tensorelementen χ_{xx} für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, und (c) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung \vec{M} senkrecht zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{z}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

J.6. Magnetisierung parallel zur Co/Cu-Grenzfläche

J.6.1. Elektrische Leitfähigkeit

J.6.1.1. Longitudinale elektrische Leitfähigkeit

J.6.1.1.1 σ_{zz}

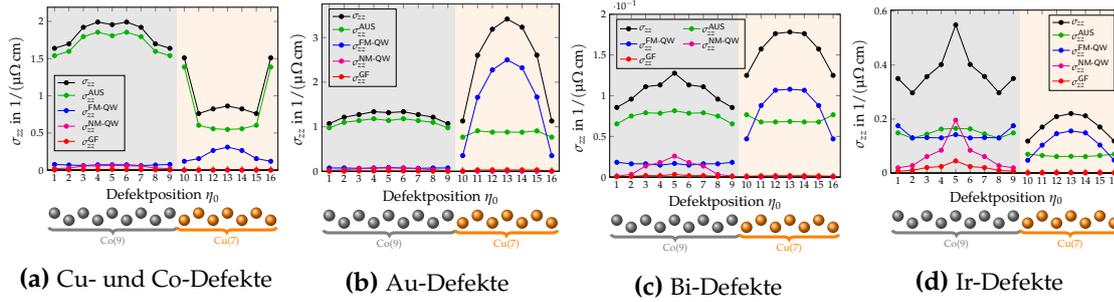


Abbildung J.6.1.: Longitudinale elektrische Leitfähigkeiten σ_{zz} für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$). Zusätzlich sind die individuellen Beiträge der Klassen $\sigma_{zz}^{\text{AHE } C}$ mit $C \in \{\text{AUS, FM-QW, NM-QW, GF}\}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %

J.6.1.2. Anomale Hall-Leitfähigkeit

J.6.1.2.1 σ_{zx}^{AHE}

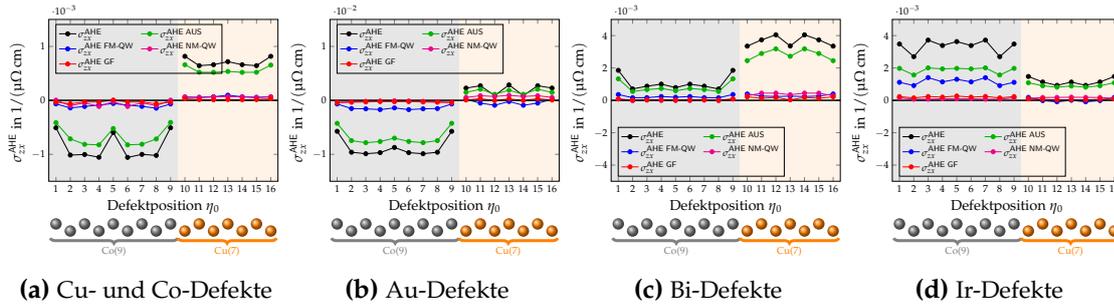


Abbildung J.6.2.: Anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{AHE} für (a) Cu- bzw. Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$). Zusätzlich sind die individuellen Beiträge der Klassen $\sigma_{zx}^{\text{AHE } C}$ mit $C \in \{\text{AUS, FM-QW, NM-QW, GF}\}$ dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %

J.6.2. Spin-Leitfähigkeit $\gamma := y$

J.6.2.1. Spin-Hall-Leitfähigkeit

J.6.2.1.1 σ_{zx}^{SHE}

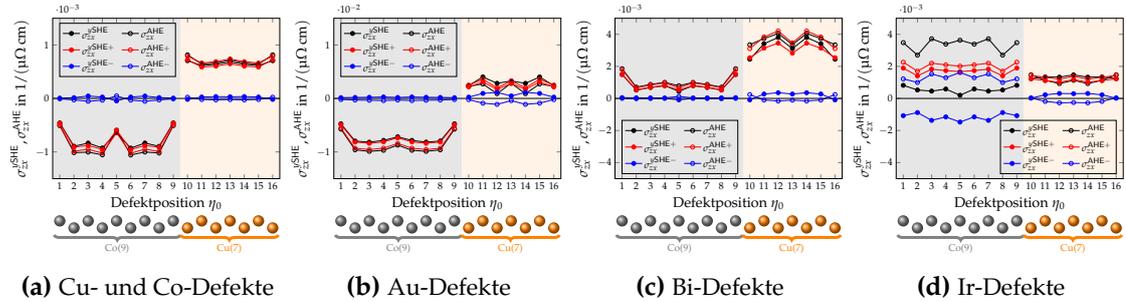


Abbildung J.6.3.: Spin-Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{SHE} und anomale Hall-Leitfähigkeiten σ_{zx}^{AHE} in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für **(a)** Cu- und Co-Defekte, **(b)** Au-Defekte, **(c)** Bi-Defekte, und **(d)** Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \vec{y}$). Zusätzlich sind die Beiträge der Majoritätselektronen ($\sigma_{zx}^{\text{SHE}+}, \sigma_{zx}^{\text{AHE}+}$) und Beiträge der Minoritätselektronen ($\sigma_{zx}^{\text{SHE}-}, \sigma_{zx}^{\text{AHE}-}$) entsprechend Gleichung (J.6) dargestellt. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at. %.

J.6.3. Spin-Orbit-Torkance

J.6.3.1. Transversale Spin-Orbit-Torkance

J.6.3.1.1 t_{xy}

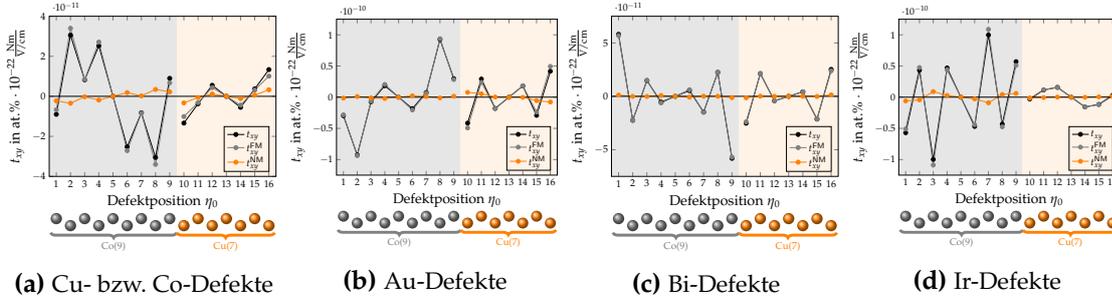


Abbildung J.6.4.: Transversale Spin-Orbit-Torkance t_{xy} in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$). Zusätzlich sind die Beiträge der ferromagnetischen Schicht t_{xy}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht t_{xy}^{NM} entsprechend Gleichung (J.2) dargestellt. Hierbei gilt $t_{xy}(\eta_0) = t_{xy}^{\text{FM}}(\eta_0) + t_{xy}^{\text{NM}}(\eta_0)$. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

J.6.3.1.2 t_{zy}

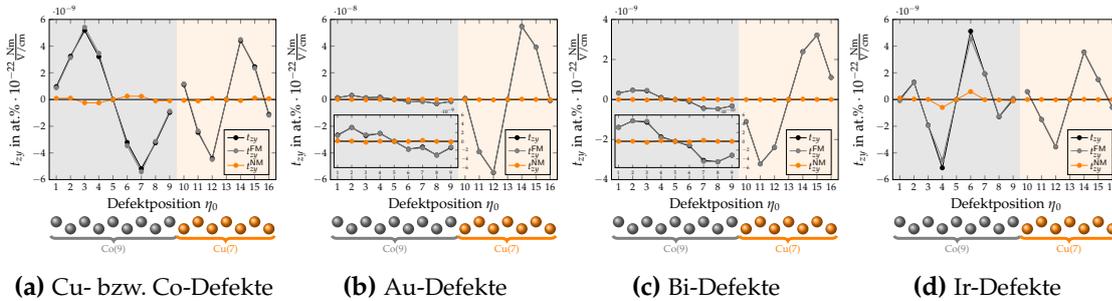


Abbildung J.6.5.: Transversale Spin-Orbit-Torkance t_{zy} in Abhängigkeit von der Defektposition η_0 für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\widehat{M} = \widehat{y}$). Zusätzlich sind die Beiträge der ferromagnetischen Schicht t_{zy}^{FM} und der nichtmagnetischen Schicht t_{zy}^{NM} entsprechend Gleichung (J.2) dargestellt. Hierbei gilt $t_{zy}(\eta_0) = t_{zy}^{\text{FM}}(\eta_0) + t_{zy}^{\text{NM}}(\eta_0)$. Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

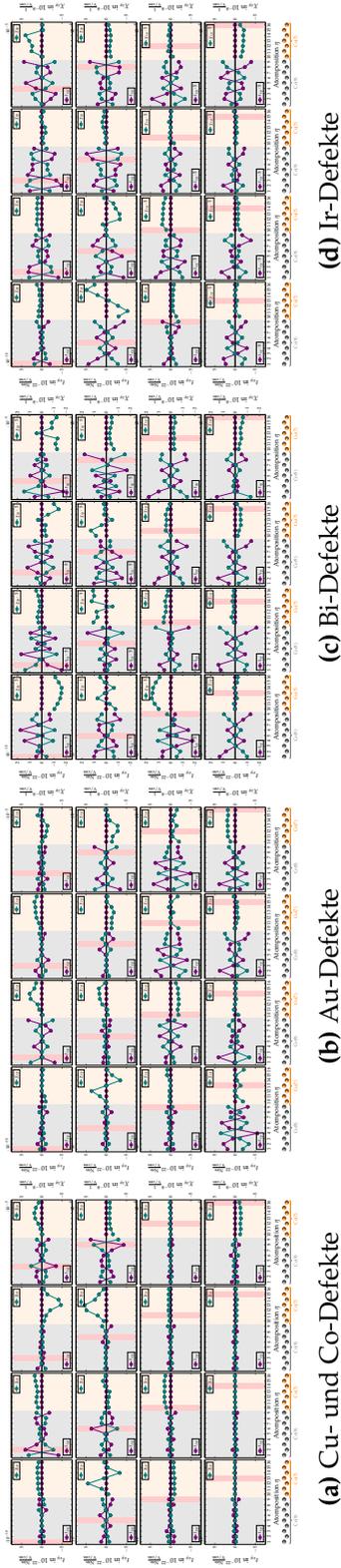


Abbildung J.6.6.: Lokale Beiträge t_{xy}^{\parallel} zur transversalen Spin-Orbit-Torkance t_{zy} und lokale Beiträge χ_{xy}^{\parallel} zur longitudinalen Edelstein-Tensorelementen χ_{xy}^{\perp} für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

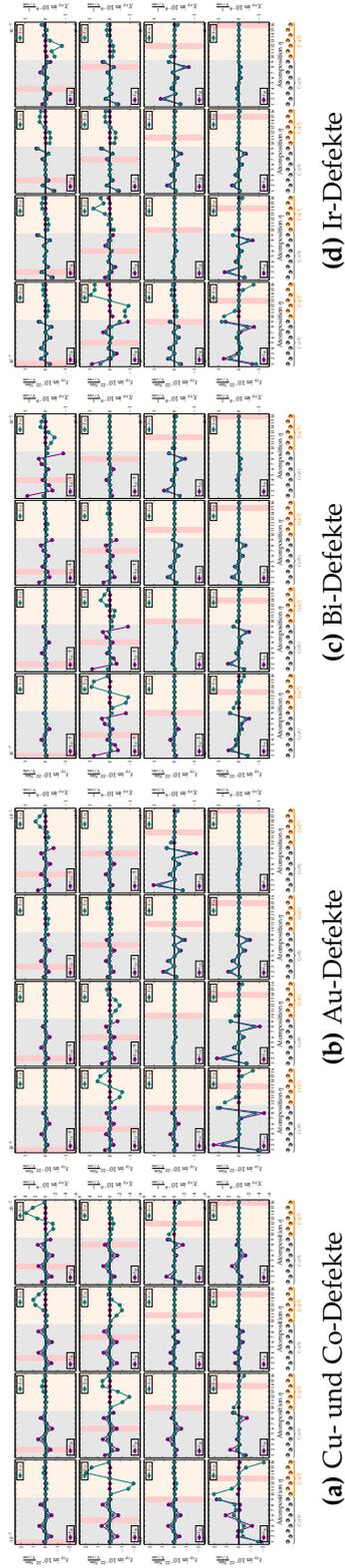


Abbildung J.6.7.: Lokale Beiträge t_{zy}^{\parallel} zur transversalen Spin-Orbit-Torkance t_{xy} und lokale Beiträge χ_{xy}^{\parallel} zur longitudinalen Edelstein-Tensorelementen χ_{xy}^{\perp} für (a) Cu- und Co-Defekte, (b) Au-Defekte, (c) Bi-Defekte, und (d) Ir-Defekte in Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten mit Magnetisierung M parallel zur Co/Cu-Grenzfläche ($\vec{M} = \hat{y}$). Die Defektkonzentration beträgt $c = 1$ at.%.

K. Bestimmung der Fermi-Fläche mittels Tetraedermethode

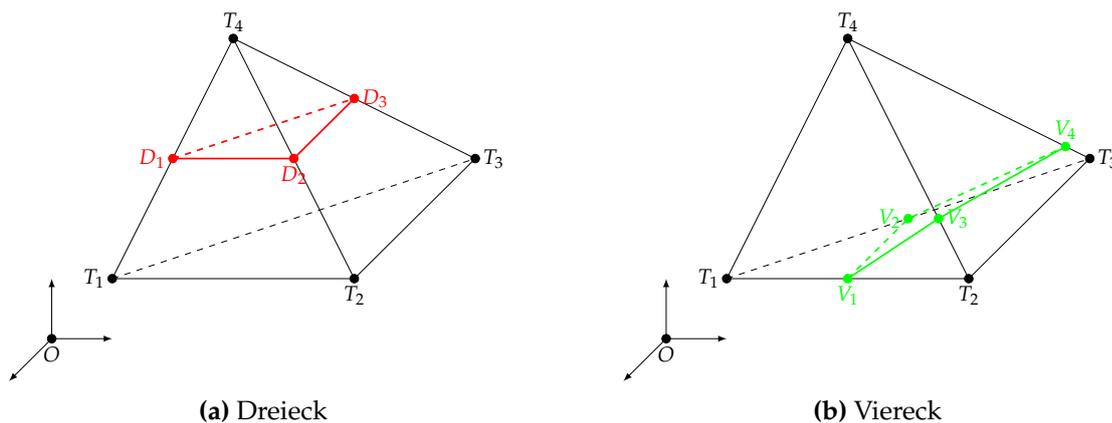


Abbildung K.0.1.: Tetraeder T mit den Eckpunkten T_1 , T_2 , T_3 , und T_4 wird von der Fermi-Fläche in **(a)** in drei Kanten geschnitten und in **(b)** in vier Kanten geschnitten, sodass die Fermi-Fläche im Tetraeder T näherungsweise in **(a)** durch ein Dreieck mit den Eckpunkten D_1 , D_2 , und D_3 und in **(b)** durch ein Viereck mit den Eckpunkten V_1 , V_2 , V_3 , und V_4 beschrieben wird.

Zunächst schneide, wie in Abb. K.0.1 (a) dargestellt, die Fermi-Fläche drei Kanten des Tetraeder T mit den Eckpunkten T_1 , T_2 , T_3 , und T_4 . Die Schnittpunkte der Kanten des Tetraeder und der Fermi-Fläche seien mit D_1 , D_2 , und D_3 bezeichnet. Der Verbindungsvektor vom Ursprung des Koordinatensystems O und dem Punkt D_i mit $i \in \{1, 2, 3\}$ sei mit \mathbf{d}_i bezeichnet. Da eine Ebene im \mathbb{R}^3 durch drei Punkte eindeutig bestimmt ist, ist der Normaleneinheitsvektor

$$\hat{\mathbf{n}}_D := \hat{\mathbf{n}}_{123} = \frac{(\mathbf{d}_2 - \mathbf{d}_1) \times (\mathbf{d}_3 - \mathbf{d}_1)}{|(\mathbf{d}_2 - \mathbf{d}_1) \times (\mathbf{d}_3 - \mathbf{d}_1)|}, \quad (\text{K.1})$$

der Flächeninhalt

$$A_D := A_{123} = \frac{1}{2} |(\mathbf{d}_2 - \mathbf{d}_1) \times (\mathbf{d}_3 - \mathbf{d}_1)|, \quad (\text{K.2})$$

und der Schwerpunkt

$$\mathbf{s}_D := \mathbf{s}_{123} = \frac{\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2 + \mathbf{d}_3}{3} \quad (\text{K.3})$$

eindeutig bestimmt. Die Richtung und der Betrag der Geschwindigkeit wird über die lineare Interpolation, beschrieben in Abschnitt 2.1.3.4 sowie den dort angegebenen Referenzen, bestimmt. Schneide nun, wie in Anhang K illustriert, die Fermi-Fläche vier Kanten des Tetraeders. Die Schnittpunkte zwischen Fermi-Fläche und den Kanten des Tetraeders seien $V_1, V_2, V_3,$ und V_4 . Die zugehörigen Ortsvektoren der Schnittpunkte seien $v_1, v_2, v_3,$ und v_4 . Wählt man drei beliebige Schnittpunkte aus, so liegt der vierte Schnittpunkt im Allgemeinen nicht auf der von den drei anderen aufgespannten Ebene.

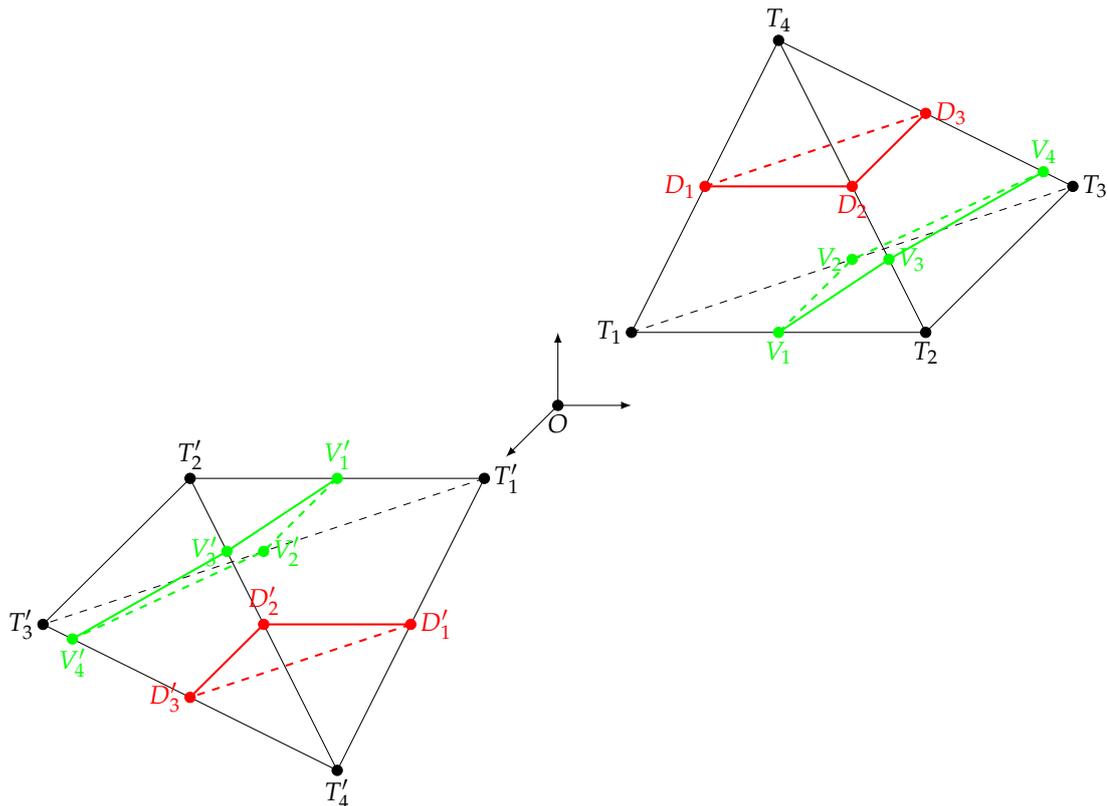


Abbildung K.0.2.: Tetraeder T mit den Eckpunkten $T_1, T_2, T_3,$ und T_4 und der durch Symmetrietransformation \mathcal{O} verknüpfte Tetraeder T' mit den Eckpunkten $T'_1, T'_2, T'_3,$ und T'_4 , wobei für alle $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ $R(\mathcal{O})T_i = T'_i$ gilt.

Man betrachtet nun zwei Tetraeder T und T' bestehend aus $\{T_i\}_{i \in \{1, 2, 3, 4\}}$ bzw. bestehend aus $\{T'_i\}_{i \in \{1, 2, 3, 4\}}$, die durch Symmetrietransformation des Kristalls \mathcal{O} ineinander überführt werden können. Es gilt somit

$$R(\mathcal{O})T_i = T'_i \quad (\text{K.4})$$

für alle $i \in \{1, 2, 3, 4\}$. Intern sind für den Tetraeder T die Eckpunkte in der Reihenfolge T_1, T_2, T_3, T_4 gespeichert, während für den Tetraeder T' die Eckpunkte in der Reihenfolge T'_1, T'_3, T'_4, T'_2 hinterlegt sind. Die Schnittpunkte mit der Fermi-Fläche sind in T in der

Reihenfolge V_1, V_2, V_3, V_4 und in T' in der Reihenfolge V'_2, V'_3, V'_4, V'_3 gespeichert. Bisher wurden der Normaleneinheitsvektor aus den ersten drei Schnittpunkten bzgl. der internen Nummerierung bestimmt, d.h. für T durch die Schnittpunkte V_1, V_2, V_3 und für T' durch die Schnittpunkte V'_2, V'_3, V'_4 . Die Dreiecke V_1, V_2, V_3 in T und V'_2, V'_3, V'_4 in T' sind im Allgemeinen verschieden. Insbesondere sind die Normaleneinheitsvektoren, die Flächeninhalte, und die Schwerpunkte verschieden. Die Folge ist, dass die fehlende Symmetrie eigentlich äquivalenter Vierecke sich auf die Transportgrößen überträgt und so z. B. die Tensoren nicht die Symmetrie aufweisen, die von der Symmetrie des Systems vorgegeben ist.

Die fehlende Symmetrie hängt von der im Allgemeinen beliebigen Nummerierung der Ecken der Tetraeder ab. Um diese Beliebigkeit zu beheben, betrachtet man folgendes. Das Viereck kann auf zwei Art und Weisen in zwei Dreiecke geteilt werden. Einerseits kann das Viereck auch bzgl. der Verbindungsstrecke von V_2 und V_3 geteilt werden, sodass in diesem Fall die zwei Teildreiecke durch V_1, V_2 , und V_3 bzw. V_2, V_3 , und V_4 aufgespannt werden. Andererseits kann es bzgl. der Verbindungsstrecke von V_1 und V_4 geteilt werden. Die entstehenden Teildreiecke bestehen aus den Punkten V_1, V_2 , und V_4 bzw. V_1, V_3 , und V_4 .

Für beliebige i, j, k mit $i, j, k \in \{1, 2, 3, 4\}$ mit $i < j < k$ ist der Normaleneinheitsvektor, der Flächeninhalt, und der Schwerpunkt des Dreiecks bestehend aus V_i, V_j , und V_k durch

$$\hat{\mathbf{n}}_{ijk} := \frac{(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \times (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i)}{|(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \times (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i)|}, \quad (\text{K.5})$$

$$A_{ijk} := \frac{1}{2} |(\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \times (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_i)|, \quad (\text{K.6})$$

und

$$\hat{\mathbf{s}}_{ijk} := \frac{1}{3} (\mathbf{v}_i + \mathbf{v}_j + \mathbf{v}_k) \quad (\text{K.7})$$

gegeben. Für das Viereck werden somit als Normaleneinheitsvektor

$$\hat{\mathbf{n}}_V := \frac{A_{123}\hat{\mathbf{n}}_{123} + A_{234}\hat{\mathbf{n}}_{234} + A_{134}\hat{\mathbf{n}}_{134} + A_{124}\hat{\mathbf{n}}_{124}}{A_{123} + A_{234} + A_{134} + A_{124}}, \quad (\text{K.8})$$

als Flächeninhalt

$$A_V := A_{123} + A_{234} + A_{134} + A_{124}, \quad (\text{K.9})$$

und als Schwerpunkt

$$\hat{\mathbf{s}}_V := \frac{A_{123}\hat{\mathbf{s}}_{123} + A_{234}\hat{\mathbf{s}}_{234} + A_{134}\hat{\mathbf{s}}_{134} + A_{124}\hat{\mathbf{s}}_{124}}{A_{123} + A_{234} + A_{134} + A_{124}} \quad (\text{K.10})$$

definiert. Die Isoenergieflächen zur Energie $E_F + \Delta E$ bzw. $E_F - \Delta E$, bezeichnet als S_F^+ bzw. S_F^- , schneiden den Tetraeder ebenfalls in vier Kanten. Diese Schnittpunkte seien mit T_i^+

für $S_{\mathbb{F}}^+$ bzw. mit T_i^- für $S_{\mathbb{F}}^-$ bezeichnet. Für beliebige i, j, k mit $i, j, k \in \{1, 2, 3, 4\}$ mit $i < j < k$ wird über die lineare Interpolation die Geschwindigkeit über die Dreiecke V_i, V_j, V_k und V_i^+, V_j^+, V_k^+ bestimmt und entsprechend mit dem Flächeninhalt A_{ijk} gewichtet. Somit hängen die Geschwindigkeit, der Flächeninhalt, und der Schwerpunkt nicht mehr von der internen Nummerierung der Eckpunkte der Tetraeder ab.

L. Parameter in den numerischen Rechnungen

L.1. Grundzustandseigenschaften von Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

L.1.1. Potential

Das Potential $\overset{\circ}{U}$ wird im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie unter Verwendung der *screened* Korrington-Kohn-Rostoker Greenschen Funktionsmethode selbstkonsistent bestimmt. Die Greensche Funktion wird zu komplexen Energien $z = E + i\eta$ mit endlichem Imaginärteil berechnet. Die Dichte $n(\mathbf{r})$ kann entsprechend Gleichung (2.43) durch Integration in der komplexen Ebene bestimmt werden. Das repulsive Potential beträgt $\tilde{U} = \tilde{V} = 108.8 \text{ eV}$ und $\tilde{B} = 0 \text{ eV}$.

Tabelle L.1.1.: Greensche Funktion $\overset{\circ}{G}{}^{\eta\eta'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ mit $z = E + i\eta$ mit $E \in [E_{\min}, E_{\max}]$

k -Netz	$64 \times 64 \times 6$ mit $64/6 \approx 10.67$
E_{\min}	-29.9 eV
E_{\max}	E_{F}
η	216.6 meV
N	249 Atome (zwölfte nächste Nachbarn)

L.1.2. Lokale Zustandsdichten

Die lokale Zustandsdichte $n(\mathbf{r}, E)$ hängt über Gleichung (2.41) mit der Greenschen Funktion $\overset{\circ}{G}$ zusammen.

Tabelle L.1.2.: Greensche Funktion $\overset{\circ}{G}{}^{nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ mit $z = E + i\eta$ mit $E \in [E_{\min}, E_{\max}]$

k -Netz	$64 \times 64 \times 6$ mit $64/6 \approx 10.67$
E_{\min}	-29.9 eV
E_{\max}	16.3 eV
η	54.1 meV
N	249
(zwölfte nächste Nachbarn)	

L.1.3. Greensche Funktion

Für die Bestimmung des Potentials der gestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten U wird u. A. die Greensche Funktion der ungestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten $\overset{\circ}{G}$ benötigt. Die zur Bestimmung der Greenschen Funktion $\overset{\circ}{G}$ hierzu verwendeten Parameter sind in Tabelle L.1.4 (a) gegeben. Für die Übergangsmatrixelemente in Gleichung (2.126) werden die Eigenfunktionen des Defektsystems für $E = E_F$ gebraucht. Entsprechend Gleichung (2.101) ist die Greensche Funktion an der Fermi-Energie zu berechnen. Die hierzu verwendeten Parameter sind in Tabelle L.1.4 (b) aufgeführt.

Tabelle L.1.3.: Greensche Funktion $\overset{\circ}{G}{}^{nn'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; z)$ mit $z = E + i\eta$ für (a) $E \in [E_{\min}, E_{\max}]$ und (b) $E = E_F$

(a) $E \in [E_{\min}, E_{\max}]$		(b) $E = E_F$	
k -Punkte	$64 \times 64 \times 6$ mit $64/6 \approx 10.67$	k -Punkte	$800 \times 800 \times 71$ mit $800/71 \approx 11.27$
E_{\min}	-29.9 eV	E_F	8.9 eV
E_{\max}	E_F	η	10.8 meV
η	216.6 meV	N	249 Atome
N	249 Atome	(zwölfte nächste Nachbarn)	
(zwölfte nächste Nachbarn)			

L.1.4. Fermi-Fläche

Für die Bestimmung der Fermi-Fläche wird die Greensche Funktion $\overset{\circ}{G}$ auf der reellen Achse, d.h. für $\text{Im}(z) = \eta = 0$ meV bestimmt. Das angegebene k -Netz bezieht sich auf den nichtrelativistischen irreduziblen Teil der Brillouin-Zone, während die Anzahl an k -Punkten, Linien, und Tetraedern die Anzahl innerhalb der gesamten Brillouin-Zone beschreibt.

k -Netz	$45 \times 45 \times 4$ mit $45/4 \approx 11.25$
Anzahl k -Punkte	66 240
Anzahl an Linien	382 320
Anzahl an Tetraedern	278 784
ΔE	1.36 μeV

L.2. Eigenschaften der gestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten

Die verwendeten Parameter der Greensche Funktion der gestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten zur Bestimmung des Potentials der gestörten Co(9)/Cu(7)(001)-Vielfachschichten sind in Tabelle L.2.2 (a). Die Parameter für die Greensche Funktion zur Bestimmung der Eigenfunktion des Defektsystems sind in Tabelle L.2.2 (b) gegeben.

Tabelle L.2.1.: Greensche Funktion $G^{nn'}(r, r'; z)$ mit $z = E + i\eta$

(a) $E \in [E_{\min}, E_{\max}]$		(b) $E = E_F$	
k -Netz	$64 \times 64 \times 6$ mit $64/6 \approx 10.67$	k -Netz	$800 \times 800 \times 71$ mit $800/71 \approx 11.27$
E_{\min}	-29.9 eV	E_F	8.9 eV
E_{\max}	E_F	η	10.8 meV
η	216.6 meV	N	55 Atome
N	55 Atome		$(\text{viertnächste Nachbarn})$
	$(\text{viertnächste Nachbarn})$		

M. Literatur

- ¹S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova und D. M. Treger, „Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future“, *Science* **294**, 1488 (2001).
- ²A. Fert, „The present and the future of spintronics“, *Thin Solid Films* **517**, Fifth International Conference on Silicon Epitaxy and Heterostructures (ICSI-5), 2 (2008).
- ³A. Fert und F. N. Van Dau, „Spintronics, from giant magnetoresistance to magnetic skyrmions and topological insulators“, *Comptes Rendus Physique* **20**, La science en mouvement 2 : de 1940 aux premières années 1980 – Avancées en physique, 817 (2019).
- ⁴I. Žutić, J. Fabian und S. Das Sarma, „Spintronics: Fundamentals and applications“, *Review of Modern Physics* **76**, 323 (2004).
- ⁵M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich und J. Chazelas, „Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices“, *Physical Review Letters* **61**, 2472 (1988).
- ⁶G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach und W. Zinn, „Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange“, *Physical Review B* **39**, 4828 (1989).
- ⁷A. Fert, „Nobel Lecture: Origin, development, and future of spintronics“, *Review of Modern Physics* **80**, 1517 (2008).
- ⁸P. A. Grünberg, „Nobel Lecture: From spin waves to giant magnetoresistance and beyond“, *Review of Modern Physics* **80**, 1531 (2008).
- ⁹J. Slonczewski, „Current-driven excitation of magnetic multilayers“, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **159**, L1 (1996).
- ¹⁰L. Berger, „Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current“, *Physical Review B* **54**, 9353 (1996).
- ¹¹D. Ralph und M. Stiles, „Spin transfer torques“, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **320**, 1190 (2008).
- ¹²D. Ralph und M. Stiles, „Erratum to “Spin Transfer Torques” [Journal of Magnetism and Magnetic Materials **320**, 1190 (2008)]“, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **321**, 2508 (2009).
- ¹³J. Sinova, S. O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back und T. Jungwirth, „Spin Hall effects“, *Reviews of Modern Physics* **87**, 1213 (2015).
- ¹⁴Y. Mokrousov, „Anomalous Hall Effect“, in *Topology in Magnetism*, hrsg. von J. Zang, V. Cros und A. Hoffmann (Springer International Publishing, Cham, 2018), S. 177.

- ¹⁵N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald und N. P. Ong, „Anomalous Hall effect“, *Reviews of Modern Physics* **82**, 1539 (2010).
- ¹⁶N. A. Sinitsyn, „Semiclassical theories of the anomalous Hall effect“, *Journal of Physics: Condensed Matter* **20**, 023201 (2007).
- ¹⁷A. G. Aronov und Y. B. Lyanda-Geller, „Nuclear electric resonance and orientation of carrier spins by an electric field“, *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters* **50**, 431 (1989).
- ¹⁸V. M. Edelstein, „Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems“, *Solid State Communications* **73**, 233 (1990).
- ¹⁹A. Manchon und S. Zhang, „Theory of nonequilibrium intrinsic spin torque in a single nanomagnet“, *Physical Review B* **78**, 212405 (2008).
- ²⁰A. Manchon und S. Zhang, „Theory of spin torque due to spin-orbit coupling“, *Physical Review B* **79**, 094422 (2009).
- ²¹A. Manchon, J. Železný, I. M. Miron, T. Jungwirth, J. Sinova, A. Thiaville, K. Garello und P. Gambardella, „Current-induced spin-orbit torques in ferromagnetic and antiferromagnetic systems“, *Reviews of Modern Physics* **91**, 035004 (2019).
- ²²P. Gambardella und I. M. Miron, „Current-induced spin-orbit torques“, *Philosophical Transaction of the Royal Society A* **369**, 3175 (2011).
- ²³E. H. Hall, „On a New Action of the Magnet on Electric Currents“, *American Journal of Mathematics* **2**, 287 (1879).
- ²⁴E. Hall, „XVIII. On the “Rotational Coefficient” in nickel and cobalt“, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **12**, 157 (1881).
- ²⁵Y. Tserkovnyak, A. Brataas und G. E. W. Bauer, „Enhanced Gilbert Damping in Thin Ferromagnetic Films“, *Physical Review Letters* **88**, 117601 (2002).
- ²⁶A. Brataas, Y. Tserkovnyak, G. E. W. Bauer und P. J. Kelly, „Spin pumping and spin transfer“, in *Spin Current* (Oxford University Press, 2012), S. 87–135.
- ²⁷H. Zhao, E. J. Loren, H. M. van Driel und A. L. Smirl, „Coherence Control of Hall Charge and Spin Currents“, *Physical Review Letters* **96**, 246601 (2006).
- ²⁸K. Ando, S. Takahashi, K. Harii, K. Sasage, J. Ieda, S. Maekawa und E. Saitoh, „Electric Manipulation of Spin Relaxation Using the Spin Hall Effect“, *Physical Review Letters* **101**, 036601 (2008).
- ²⁹S. O. Valenzuela und M. Tinkham, „Direct electronic measurement of the spin Hall effect“, *Nature* **442**, 176 (2006).
- ³⁰D. Wei, M. Obstbaum, M. Ribow, C. H. Back und G. Woltersdorf, „Spin Hall voltages from a.c. and d.c. spin currents“, *Nature Communications* **5**, 3768 (2014).
- ³¹H. L. Wang, C. H. Du, Y. Pu, R. Adur, P. C. Hammel und F. Y. Yang, „Scaling of Spin Hall Angle in 3d, 4d, and 5d Metals from Y₃Fe₅O₁₂/Metal Spin Pumping“, *Physical Review Letters* **112**, 197201 (2014).

- ³²L. Liu, T. Moriyama, D. C. Ralph und R. A. Buhrman, „Spin-Torque Ferromagnetic Resonance Induced by the Spin Hall Effect“, *Physical Review Letters* **106**, 036601 (2011).
- ³³L. Liu, C.-F. Pai, Y. Li, H. W. Tseng, D. C. Ralph und R. A. Buhrman, „Spin-Torque Switching with the Giant Spin Hall Effect of Tantalum“, *Science* **336**, 555 (2012).
- ³⁴A. Hoffmann, „Spin Hall Effects in Metals“, *IEEE Transactions on Magnetics* **49**, 5172 (2013).
- ³⁵T. Seki, Y. Hasegawa, S. Mitani, S. Takahashi, H. Imamura, S. Maekawa, J. Nitta und K. Takanashi, „Giant spin Hall effect in perpendicularly spin-polarized FePt/Au devices“, *Nature Materials* **7**, 125 (2008).
- ³⁶G. Mihajlović, J. E. Pearson, M. A. Garcia, S. D. Bader und A. Hoffmann, „Negative Nonlocal Resistance in Mesoscopic Gold Hall Bars: Absence of the Giant Spin Hall Effect“, *Physical Review Letters* **103**, 166601 (2009).
- ³⁷C. Chen, D. Tian, H. Zhou, D. Hou und X. Jin, „Generation and Detection of Pure Spin Current in an H-Shaped Structure of a Single Metal“, *Physical Review Letters* **122**, 016804 (2019).
- ³⁸T. D. Skinner, H. Kurebayashi, D. Fang, D. Heiss, A. C. Irvine, A. T. Hindmarch, M. Wang, A. W. Rushforth und A. J. Ferguson, „Enhanced inverse spin-Hall effect in ultrathin ferromagnetic/normal metal bilayers“, *Applied Physics Letters* **102**, 072401 (2013).
- ³⁹T. D. Skinner, M. Wang, A. T. Hindmarch, A. W. Rushforth, A. C. Irvine, D. Heiss, H. Kurebayashi und A. J. Ferguson, „Spin-orbit torque opposing the Oersted torque in ultrathin Co/Pt bilayers“, *Applied Physics Letters* **104**, 062401 (2014).
- ⁴⁰T. D. Skinner, H. Kurebayashi, D. Fang, D. Heiss, A. C. Irvine, A. T. Hindmarch, M. Wang, A. W. Rushforth und A. J. Ferguson, „Erratum: “Enhanced inverse spin-Hall effect in ultrathin ferromagnetic/normal metal bilayers” [Applied Physics Letters **102**, 072401 (2013)]“, *Applied Physics Letters* **106**, 179902 (2015).
- ⁴¹F. Hellman, A. Hoffmann, Y. Tserkovnyak, G. S. D. Beach, E. E. Fullerton, C. Leighton, A. H. MacDonald, D. C. Ralph, D. A. Arena, H. A. Dürr, P. Fischer, J. Grollier, J. P. Heremans, T. Jungwirth, A. V. Kimel, B. Koopmans, I. N. Krivorotov, S. J. May, A. K. Petford-Long, J. M. Rondinelli, N. Samarth, I. K. Schuller, A. N. Slavin, M. D. Stiles, O. Tchernyshyov, A. Thiaville und B. L. Zink, „Interface-induced phenomena in magnetism“, *Reviews of Modern Physics* **89**, 025006 (2017).
- ⁴²L. Wang, R. J. H. Wesselink, Y. Liu, Z. Yuan, K. Xia und P. J. Kelly, „Giant Room Temperature Interface Spin Hall and Inverse Spin Hall Effects“, *Physical Review Letters* **116**, 196602 (2016).
- ⁴³V. P. Amin und M. D. Stiles, „Spin transport at interfaces with spin-orbit coupling: Formalism“, *Physical Review B* **94**, 104419 (2016).
- ⁴⁴V. P. Amin und M. D. Stiles, „Spin transport at interfaces with spin-orbit coupling: Phenomenology“, *Physical Review B* **94**, 104420 (2016).

- ⁴⁵V. P. Amin, J. Zemen und M. D. Stiles, „Interface-Generated Spin Currents“, *Physical Review Letters* **121**, 136805 (2018).
- ⁴⁶Y. Niimi, M. Morota, D. H. Wei, C. Deranlot, M. Basletic, A. Hamzic, A. Fert und Y. Otani, „Extrinsic Spin Hall Effect Induced by Iridium Impurities in Copper“, *Physical Review Letters* **106**, 126601 (2011).
- ⁴⁷Y. Niimi, Y. Kawanishi, D. H. Wei, C. Deranlot, H. X. Yang, M. Chshiev, T. Valet, A. Fert und Y. Otani, „Giant Spin Hall Effect Induced by Skew Scattering from Bismuth Impurities inside Thin Film CuBi Alloys“, *Physical Review Letters* **109**, 156602 (2012).
- ⁴⁸M. Gradhand, D. V. Fedorov, P. Zahn und I. Mertig, „Spin Hall angle versus spin diffusion length: Tailored by impurities“, *Physical Review B* **81**, 245109 (2010).
- ⁴⁹D. V. Fedorov, C. Herschbach, A. Johansson, S. Ostanin, I. Mertig, M. Gradhand, K. Chadova, D. Ködderitzsch und H. Ebert, „Analysis of the giant spin Hall effect in Cu(Bi) alloys“, *Physical Review B* **88**, 085116 (2013).
- ⁵⁰G. Y. Guo, S. Murakami, T.-W. Chen und N. Nagaosa, „Intrinsic Spin Hall Effect in Platinum: First-Principles Calculations“, *Physical Review Letters* **100**, 096401 (2008).
- ⁵¹M. Gradhand, D. V. Fedorov, P. Zahn und I. Mertig, „Extrinsic Spin Hall Effect from First Principles“, *Physical Review Letters* **104**, 186403 (2010).
- ⁵²S. Lowitzer, M. Gradhand, D. Ködderitzsch, D. V. Fedorov, I. Mertig und H. Ebert, „Extrinsic and Intrinsic Contributions to the Spin Hall Effect of Alloys“, *Physical Review Letters* **106**, 056601 (2011).
- ⁵³S. Wimmer, K. Chadova, M. Seemann, D. Ködderitzsch und H. Ebert, „Fully relativistic description of spin-orbit torques by means of linear response theory“, *Physical Review B* **94**, 054415 (2016).
- ⁵⁴S. Wimmer, „Spin caloric transport and related phenomena from first principles“, Diss. (Ludwig-Maximilians-Universität München - Fakultät Chemie und Pharmazie, 2018).
- ⁵⁵C. Freysoldt, B. Grabowski, T. Hickel, J. Neugebauer, G. Kresse, A. Janotti und C. G. Van de Walle, „First-principles calculations for point defects in solids“, *Reviews of Modern Physics* **86**, 253 (2014).
- ⁵⁶I. Mertig, E. Mrosan und P. Ziesche, *Multiple scattering theory of point defects in metals: Electronic properties* (BSB B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, 1987).
- ⁵⁷M. Gradhand, M. Czerner, D. V. Fedorov, P. Zahn, B. Y. Yavorsky, L. Szunyogh und I. Mertig, „Spin polarization on Fermi surfaces of metals by the KKR method“, *Physical Review B* **80**, 224413 (2009).
- ⁵⁸J. Zabloudil, R. Hammerling, L. Szunyogh und P. Weinberger, *Electron Scattering in Solid Matter: A Theoretical and Computational Treatise* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2005).
- ⁵⁹J. Korringa, „On the calculation of the energy of a Bloch wave in a metal“, *Physica* **13**, 392 (1947).

-
- ⁶⁰W. Kohn und N. Rostoker, „Solution of the Schrödinger Equation in Periodic Lattices with an Application to Metallic Lithium“, *Physical Review* **94**, 1111 (1954).
- ⁶¹I. Mertig, „Transport properties of dilute alloys“, *Reports on Progress in Physics* **62**, 237 (1999).
- ⁶²B. Zimmermann, K. Chadova, D. Ködderitzsch, S. Blügel, H. Ebert, D. V. Fedorov, N. H. Long, P. Mavropoulos, I. Mertig, Y. Mokrousov und M. Gradhand, „Skew scattering in dilute ferromagnetic alloys“, *Physical Review B* **90**, 220403 (2014).
- ⁶³R. Gross und A. Marx, *Festkörperphysik*, 2. Aufl. (De Gruyter Oldenbourg, 2014).
- ⁶⁴N. W. Ashcroft und N. D. Mermin, *Festkörperphysik* (Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 2001).
- ⁶⁵E. M. Pugh, „Hall Effect and the Magnetic Properties of Some Ferromagnetic Materials“, *Physical Review* **36**, 1503 (1930).
- ⁶⁶R. Karplus und J. M. Luttinger, „Hall Effect in Ferromagnetics“, *Physical Review* **95**, 1154 (1954).
- ⁶⁷J. Smit, „The spontaneous hall effect in ferromagnetics I“, *Physica* **21**, 877 (1955).
- ⁶⁸J. Smit, „The spontaneous hall effect in ferromagnetics II“, *Physica* **24**, 39 (1958).
- ⁶⁹L. Berger, „Side-Jump Mechanism for the Hall Effect of Ferromagnets“, *Physical Review B* **2**, 4559 (1970).
- ⁷⁰L. Berger, „Application of the Side-Jump Model to the Hall Effect and Nernst Effect in Ferromagnets“, *Physical Review B* **5**, 1862 (1972).
- ⁷¹N. A. Sinitsyn, Q. Niu und A. H. MacDonald, „Coordinate shift in the semiclassical Boltzmann equation and the anomalous Hall effect“, *Physical Review B* **73**, 075318 (2006).
- ⁷²N. F. Mott und H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, 3. Aufl. (Oxford University Press, 1965).
- ⁷³L. D. Landau und E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics: Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, 1. Aufl. (Pergamon Press Ltd., 1965).
- ⁷⁴D. M.I. und P. V. I., „Possibility of Orienting Electron Spins with Current“, *JETP Lett.* **13**, 467 (1971).
- ⁷⁵M. Dyakonov und V. Perel, „Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors“, *Physics Letters A* **35**, 459 (1971).
- ⁷⁶J. E. Hirsch, „Spin Hall Effect“, *Physical Review Letters* **83**, 1834 (1999).
- ⁷⁷Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard und D. D. Awschalom, „Observation of the Spin Hall Effect in Semiconductors“, *Science* **306**, 1910 (2004).
- ⁷⁸C. Herschbach, D. V. Fedorov, I. Mertig, M. Gradhand, K. Chadova, H. Ebert und D. Ködderitzsch, „Insight into the skew-scattering mechanism of the spin Hall effect: Potential scattering versus spin-orbit scattering“, *Physical Review B* **88**, 205102 (2013).

- ⁷⁹C. Herschbach, D. V. Fedorov, M. Gradhand und I. Mertig, „Colossal spin Hall effect in ultrathin metallic films“, *Physical Review B* **90**, 180406 (2014).
- ⁸⁰Y. Omori, E. Sagasta, Y. Niimi, M. Gradhand, L. E. Hueso, F. Casanova und Y. Otani, „Relation between spin Hall effect and anomalous Hall effect in 3d ferromagnetic metals“, *Physical Review B* **99**, 014403 (2019).
- ⁸¹J. C. R. Sánchez, L. Vila, G. Desfonds, S. Gambarelli, J. P. Attané, J. M. De Teresa, C. Magén und A. Fert, „Spin-to-charge conversion using Rashba coupling at the interface between non-magnetic materials“, *Nature Communications* **4**, 2944 (2013).
- ⁸²E. Rashba, „Properties of semiconductors with an extremum loop. I. Cyclotron and combinational Resonance in a magnetic field perpendicular to the plane of the loop“, *Soviet Physics - Solid State* **2**, 1109 (1960).
- ⁸³Y. A. Bychkov und E. Rashba, „Properties of 2D electron gas with lifted spectral degeneracy“, *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters* **39**, 78 (1984).
- ⁸⁴Y. A. Bychkov und E. I. Rashba, „Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers“, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **17**, 6039 (1984).
- ⁸⁵G. Géranton, B. Zimmermann, N. H. Long, P. Mavropoulos, S. Blügel, F. Freimuth und Y. Mokrousov, „Spin-orbit torques and spin accumulation in FePt/Pt and Co/Cu thin films from first principles: The role of impurities“, *Physical Review B* **93**, 224420 (2016).
- ⁸⁶K. M. D. Hals und A. Brataas, „Phenomenology of current-induced spin-orbit torques“, *Physical Review B* **88**, 085423 (2013).
- ⁸⁷I. M. Miron, K. Garello, G. Gaudin, P.-J. Zermatten, M. V. Costache, S. Auffret, S. Bandiera, B. Rodmacq, A. Schuhl und P. Gambardella, „Perpendicular switching of a single ferromagnetic layer induced by in-plane current injection“, *Nature* **476**, 189 (2011).
- ⁸⁸J. M. Ziman, *Prinzipien der Festkörpertheorie* (Akademie-Verlag Berlin, 1974).
- ⁸⁹M. Born und R. Oppenheimer, „Zur Quantentheorie der Molekeln“, *Annalen der Physik* **389**, 457 (1927).
- ⁹⁰R. O. Jones, „Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future“, *Reviews of Modern Physics* **87**, 897 (2015).
- ⁹¹L. H. Thomas, „The calculation of atomic fields“, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **23**, 542 (1927).
- ⁹²E. Fermi, „Un Metodo Statistico per la Determinazione di alcune Prioprietà dell’Atomo (A statistical method for the determination of some atomic properties)“, *Rendiconti Accademia Nazionale dei Lincei* **6**, 602 (1927).
- ⁹³P. Hohenberg und W. Kohn, „Inhomogeneous electron gas“, *Physical Review* **136**, B864 (1964).
- ⁹⁴W. Kohn und L. J. Sham, „Self-consistent equations including exchange and correlation effects“, *Physical Review* **140**, A1133 (1965).

-
- ⁹⁵J. P. Perdew und A. Zunger, „Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems“, *Physical Review B* **23**, 5048 (1981).
- ⁹⁶S. H. Vosko, L. Wilk und M. Nusair, „Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis“, *Canadian Journal of Physics* **58**, 1200 (1980).
- ⁹⁷D. M. Ceperley und B. J. Alder, „Ground state of the electron gas by a stochastic method“, *Physical Review Letters* **45**, 566 (1980).
- ⁹⁸J. P. Perdew, K. Burke und M. Ernzerhof, „Generalized Gradient Approximation Made Simple“, *Physical Review Letters* **77**, 3865 (1996).
- ⁹⁹P. A. M. Dirac, „The quantum theory of the electron“, *Proceedings of the Royal Society London A* **117**, 610 (1928).
- ¹⁰⁰P. A. M. Dirac, „The quantum theory of the electron. Part II“, *Proceedings of the Royal Society London A* **118**, 351 (1928).
- ¹⁰¹P. Strange, *Relativistic Quantum Mechanics: With Applications in Condensed Matter and Atomic Physics* (Cambridge University Press, 1998).
- ¹⁰²U. von Barth und L. Hedin, „A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. i“, *Journal of Physics C: Solid State Physics* **5**, 1629 (1972).
- ¹⁰³A. K. Rajagopal und J. Callaway, „Inhomogeneous Electron Gas“, *Physical Review B* **7**, 1912 (1973).
- ¹⁰⁴E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2006).
- ¹⁰⁵E. Merzbacher, *Quantum mechanics*, 3. Aufl. (John Wiley & Sons, Inc., 2014).
- ¹⁰⁶H. Ebert, D. Ködderitzsch und J. Minár, „Calculating condensed matter properties using the KKR-Green's function method—recent developments and applications“, *Reports on Progress in Physics* **74**, 096501 (2011).
- ¹⁰⁷H. Ebert, P. Strange und B. L. Gyorffy, „The influence of relativistic effects on the magnetic moments and hyperfine fields of Fe, Co and Ni“, *Journal of Physics F: Metal Physics* **18**, L135 (1988).
- ¹⁰⁸T. Huhne, C. Zecha, H. Ebert, P. H. Dederichs und R. Zeller, „Full-potential spin-polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker method implemented and applied to bcc Fe, fcc Co, and fcc Ni“, *Physical Review B* **58**, 10236 (1998).
- ¹⁰⁹C. Herschbach, „Optimization and Modeling of the Spin Hall Effect in Dilute Alloys: A Theoretical Study“, Diss. (Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg - Naturwissenschaftliche Fakultät II - Institut für Physik, 2015).
- ¹¹⁰J. Binder, „Giant Magnetoresistance - eine ab-initio Beschreibung“, Diss. (Technische Universität Dresden - Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften - Institut für Theoretische Physik, 2000).
- ¹¹¹N. Papanikolaou, R. Zeller und P. H. Dederichs, „Conceptual improvements of the KKR method“, *Journal of Physics: Condensed Matter* **14**, 2799 (2002).

- ¹¹²M. Czerner, „Beiträge zur Theorie des Elektronentransports in Systemen mit nichtkollinearer magnetischer Ordnung“, Diss. (Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg - Naturwissenschaftliche Fakultät II - Institut für Physik, 2009).
- ¹¹³M. Gradhand, „The Extrinsic Spin Hall Effect“, Diss. (Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg - Naturwissenschaftliche Fakultät II - Institut für Physik, 2010).
- ¹¹⁴K. Tauber, „Spin Nernst and spin Hall effect in dilute metallic alloys“, Diss. (Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg - Naturwissenschaftliche Fakultät II - Institut für Physik, 2013).
- ¹¹⁵R. M. Geilhufe, „Complex structures, disorder and low dimensionality - treatment of oxides and semiconductors by a relativistic Korringa-Kohn-Rostoker Green function method“ (Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg - Naturwissenschaftliche Fakultät II - Institut für Physik, 2015).
- ¹¹⁶M. E. Rose, *Relativistic Electron Theory* (John Wiley & Sons, Inc., 1961).
- ¹¹⁷P. Zahn, „Screened Korringa-Kohn-Rostoker-Methode für Vielfachschichten“, Diss. (Technische Universität Dresden - Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften - Institut für Theoretische Physik, 1998).
- ¹¹⁸P. Zahn, „Transport phenomena in metallic nanostructures“, Habilitation (Technische Universität Dresden - Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften - Fachrichtung Physik - Institut für Theoretische Physik, 2005).
- ¹¹⁹L. Szunyogh, B. Újfalussy und P. Weinberger, „Magnetic anisotropy of iron multilayers on Au(001): First-principles calculations in terms of the fully relativistic spin-polarized screened KKR method“, *Physical Review B* **51**, 9552 (1995).
- ¹²⁰R. Zeller, P. H. Dederichs, B. Újfalussy, L. Szunyogh und P. Weinberger, „Theory and convergence properties of the screened Korringa-Kohn-Rostoker method“, *Physical Review B* **52**, 8807 (1995).
- ¹²¹M. Gradhand, D. V. Fedorov, F. Pientka, P. Zahn, I. Mertig und B. L. Györfy, „Calculating the Berry curvature of Bloch electrons using the KKR method“, *Physical Review B* **84**, 075113 (2011).
- ¹²²N. A. Shilkova und V. P. Shirokovskii, „Calculation of Electron Velocity in Crystal ab Initio. Role of Relativistic Effects“, *physica status solidi (b)* **149**, 571 (1988).
- ¹²³G. Lehmann und M. Taut, „On the Numerical Calculation of the Density of States and Related Properties“, *physica status solidi (b)* **54**, 469 (1972).
- ¹²⁴H. Bauke, S. Ahrens, C. H. Keitel und R. Grobe, „Relativistic spin operators in various electromagnetic environments“, *Physical Review A* **89**, 052101 (2014).
- ¹²⁵H. Bauke, S. Ahrens, C. H. Keitel und R. Grobe, „What is the relativistic spin operator?“, *New Journal of Physics* **16**, 043012 (2014).
- ¹²⁶F. Pientka, „Geometrical Concepts in the Band Theory of Solids“, Diplomarbeit (Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg - Naturwissenschaftliche Fakultät II - Institut für Physik, 2010).

-
- ¹²⁷F. Pientka, M. Gradhand, D. V. Fedorov, I. Mertig und B. L. Györfly, „Gauge freedom for degenerate Bloch states“, *Physical Review B* **86**, 054413 (2012).
- ¹²⁸M. Gradhand, D. V. Fedorov, F. Pientka, P. Zahn, I. Mertig und B. L. Györfly, „First-principle calculations of the Berry curvature of Bloch states for charge and spin transport of electrons“, *Journal of Physics: Condensed Matter* **24**, 213202 (2012).
- ¹²⁹J. D. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*, 5. Aufl. (De Gruyter, 2014).
- ¹³⁰C. Kittel, *Quantentheorie der Festkörper* (Oldenbourg Verlag, 1970).
- ¹³¹T. Gilbert, „A phenomenological theory of damping in ferromagnetic materials“, *IEEE Transactions on Magnetics* **40**, 3443 (2004).
- ¹³²R. Kubo, „Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems“, *Journal of the Physical Society of Japan* **12**, 570 (1957).
- ¹³³L. Boltzmann, „Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen“, in *Kinetische Theorie II: Irreversible Prozesse Einführung und Originaltexte* (Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 1970), S. 115.
- ¹³⁴L. V. Keldysh, „Diagram Technique for Nonequilibrium Processes“, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **20**, 1018 (1965).
- ¹³⁵L. P. Kadanoff und G. Baym, *Quantum Statistical Mechanics* (Benjamin, 1962).
- ¹³⁶J. Rammer und H. Smith, „Quantum field-theoretical methods in transport theory of metals“, *Review of Modern Physics* **58**, 323 (1986).
- ¹³⁷G. Sundaram und Q. Niu, „Wave-packet dynamics in slowly perturbed crystals: Gradient corrections and Berry-phase effects“, *Physical Review B* **59**, 14915 (1999).
- ¹³⁸D. Xiao, J. Shi und Q. Niu, „Berry Phase Correction to Electron Density of States in Solids“, *Physical Review Letters* **95**, 137204 (2005).
- ¹³⁹D. Xiao, M.-C. Chang und Q. Niu, „Berry phase effects on electronic properties“, *Reviews of Modern Physics* **82**, 1959 (2010).
- ¹⁴⁰A. Johansson, „Spin-orbit driven transport: Edelstein effect and chiral anomaly“, Diss. (Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg - Naturwissenschaftliche Fakultät II - Institut für Physik, 2019).
- ¹⁴¹W. Kohn und J. M. Luttinger, „Quantum theory of electrical transport phenomena“, *Physical Review* **108**, 590 (1957).
- ¹⁴²B. I. Sturman, „Collision integral for elastic scattering of electrons and phonons“, *Soviet Physics - Uspekhi* **27**, 881 (1984).
- ¹⁴³B. Zimmermann, „Ab initio description of transverse transport due to impurity scattering in transition metals“, Diss. (Forschungszentrum Jülich GmbH - Peter Grünberg Institut - Quanten-Theorie der Materialien, 2014).
- ¹⁴⁴P. Zahn, J. Binder, I. Mertig, R. Zeller und P. H. Dederichs, „Origin of Giant Magnetoresistance: Bulk or Interface Scattering“, *Physical Review Letters* **80**, 4309 (1998).

- ¹⁴⁵W. H. Butler, „Theory of electronic transport in random alloys: Korringa-Kohn-Rostoker coherent-potential approximation“, *Physical Review B* **31**, 3260 (1985).
- ¹⁴⁶M. Seemann, D. Ködderitzsch, S. Wimmer und H. Ebert, „Symmetry-imposed shape of linear response tensors“, *Physical Review B* **92**, 155138 (2015).
- ¹⁴⁷S. Lowitzer, D. Ködderitzsch und H. Ebert, „Coherent description of the intrinsic and extrinsic anomalous Hall effect in disordered alloys on an ab initio level“, *Physical Review Letters* **105**, 266604 (2010).
- ¹⁴⁸D. Ködderitzsch, K. Chadova und H. Ebert, „Linear response Kubo-Bastin formalism with application to the anomalous and spin Hall effects: A first-principles approach“, *Physical Review B* **92**, 184415 (2015).
- ¹⁴⁹K. Chadova, D. V. Fedorov, C. Herschbach, M. Gradhand, I. Mertig, D. Ködderitzsch und H. Ebert, „Separation of the individual contributions to the spin Hall effect in dilute alloys within the first-principles Kubo-Středa approach“, *Physical Review B* **92**, 045120 (2015).
- ¹⁵⁰K. Chadova, S. Wimmer, H. Ebert und D. Ködderitzsch, „Tailoring of the extrinsic spin Hall effect in disordered metal alloys“, *Physical Review B* **92**, 235142 (2015).
- ¹⁵¹A. Marmodoro, S. Wimmer, O. Šipr, M. Ogura und H. Ebert, „First-principles calculations of steady-state voltage-controlled magnetism: Application to x-ray absorption spectroscopy experiments“, *Physical Review Research* **2**, 032067 (2020).
- ¹⁵²E. Simon, A. Marmodoro, S. Mankovsky und H. Ebert, „Theoretical study on the electric field effect on magnetism of Pd/Co/Pt thin films“, *Physical Review B* **103**, 064406 (2021).
- ¹⁵³F. Freimuth, S. Blügel und Y. Mokrousov, „Spin-orbit torques in Co/Pt(111) and Mn/W(001) magnetic bilayers from first principles“, *Physical Review B* **90**, 174423 (2014).
- ¹⁵⁴F. Freimuth, S. Blügel und Y. Mokrousov, „Direct and inverse spin-orbit torques“, *Physical Review B* **92**, 064415 (2015).
- ¹⁵⁵F. Freimuth, S. Blügel und Y. Mokrousov, „Laser-induced torques in metallic ferromagnets“, *Physical Review B* **94**, 144432 (2016).
- ¹⁵⁶F. Freimuth, S. Blügel und Y. Mokrousov, „Spin-orbit torques and tunable Dzyaloshinskii-Moriya interaction in Co/Cu/Co trilayers“, *Physical Review B* **98**, 024419 (2018).
- ¹⁵⁷G. Vignale und I. V. Tokatly, „Theory of the nonlinear Rashba-Edelstein effect: The clean electron gas limit“, *Physical Review B* **93**, 035310 (2016).
- ¹⁵⁸H. Xu, J. Zhou, H. Wang und J. Li, „Light-induced static magnetization: Nonlinear Edelstein effect“, *Physical Review B* **103**, 205417 (2021).
- ¹⁵⁹W. H. Butler, X.-G. Zhang, D. M. C. Nicholson und J. M. MacLaren, „First-principles calculations of electrical conductivity and giant magnetoresistance of Co||Cu||Co spin valves“, *Physical Review B* **52**, 13399 (1995).

-
- ¹⁶⁰C. Blaas, L. Szunyogh, P. Weinberger, C. Sommers, P. M. Levy und J. Shi, „Theoretical evaluation of magnetotransport properties in Co/Cu/Co-based spin valves“, *Physical Review B* **65**, 134427 (2002).
- ¹⁶¹N. Wiberg, *Lehrbuch der Anorganischen Chemie* (De Gruyter, 2008).
- ¹⁶²B. Heinrich, J. F. Cochran, M. Kowalewski, J. Kirschner, Z. Celinski, A. S. Arrott und K. Myrtle, „Magnetic anisotropies and exchange coupling in ultrathin fcc Co(001) structures“, *Physical Review B* **44**, 9348 (1991).
- ¹⁶³P. Krams, F. Lauks, R. L. Stamps, B. Hillebrands und G. Güntherodt, „Magnetic anisotropies of ultrathin Co(001) films on Cu(001)“, *Physical Review Letters* **69**, 3674 (1992).
- ¹⁶⁴M. Kowalewski, C. M. Schneider und B. Heinrich, „Thickness and temperature dependence of magnetic anisotropies in ultrathin fcc Co(001) structures“, *Physical Review B* **47**, 8748 (1993).
- ¹⁶⁵M. Yamamoto, H. Hayasaki, K. Nishikawa und T. Kingetsu, „Inheritance of Crystal Structure in Cu/Co and Co/Cu Bilayers Grown on MgO(100) Substrate“, *Japanese Journal of Applied Physics* **35**, 709 (1996).
- ¹⁶⁶P. Zahn, J. Binder und I. Mertig, „Impurity scattering and quantum confinement in giant magnetoresistive systems“, *Physical Review B* **68**, 100403 (2003).
- ¹⁶⁷M. G. Samant, J. Stöhr, S. S. P. Parkin, G. A. Held, B. D. Hermsmeier, F. Herman, M. Van Schilfhaarde, L.-C. Duda, D. C. Mancini, N. Wassdahl und R. Nakajima, „Induced spin polarization in Cu spacer layers in Co/Cu multilayers“, *Physical Review Letters* **72**, 1112 (1994).
- ¹⁶⁸H. T. Stokes, D. M. Hatch und B. J. Campbell, *FINDSYM, ISOTROPY Software Suite*, iso.byu.edu.
- ¹⁶⁹H. T. Stokes und D. M. Hatch, „*FINDSYM*: program for identifying the space-group symmetry of a crystal“, *Journal of Applied Crystallography* **38**, 237 (2005).
- ¹⁷⁰M. D. Stiles, „Spin-dependent interface transmission and reflection in magnetic multilayers (invited)“, *Journal of Applied Physics* **79**, 5805 (1996).
- ¹⁷¹D. T. Dekadjevi, P. A. Ryan, B. J. Hickey, B. D. Fulthorpe und B. K. Tanner, „Experimental Evidence for Electron Channeling in Fe / Au (100) Superlattices“, *Physical Review Letters* **86**, 5787 (2001).
- ¹⁷²A. Mook, R. R. Neumann, A. Johansson, J. Henk und I. Mertig, „Origin of the magnetic spin Hall effect: Spin current vorticity in the Fermi sea“, *Physical Review Research* **2**, 023065 (2020).
- ¹⁷³F. Tsui, B. Chen, D. Barlett, R. Clarke und C. Uher, „Scaling behavior of giant magnetotransport effects in Co/Cu superlattices“, *Physical Review Letters* **72**, 740 (1994).
- ¹⁷⁴Y. Kobayashi, H. Sato, Y. Aoki und A. Kamijo, „The giant magnetoresistance and the anomalous Hall effect in molecular-beam-epitaxy grown Co/Cu superlattices“, *Journal of Physics: Condensed Matter* **6**, 7255 (1994).

- ¹⁷⁵Q. Zhang, P. Li, Y. Wen, C. Zhao, J. W. Zhang, A. Manchon, W. B. Mi, Y. Peng und X. X. Zhang, „Anomalous Hall effect in Fe/Au multilayers“, *Physical Review B* **94**, 024428 (2016).
- ¹⁷⁶Q. Zhang, P. Li, Y. Wen, X. He, Y. Zhao, J. Zhang und X. Zhang, „Interfacial scattering effect on anomalous Hall effect in Ni/Au multilayers“, *Journal of Physics D: Applied Physics* **50**, 235002 (2017).
- ¹⁷⁷S. Zhang, „Extraordinary Hall effect in magnetic multilayers“, *Physical Review B* **51**, 3632 (1995).
- ¹⁷⁸S. Wimmer, M. Seemann, K. Chadova, D. Ködderitzsch und H. Ebert, „Spin-orbit-induced longitudinal spin-polarized currents in nonmagnetic solids“, *Physical Review B* **92**, 041101 (2015).
- ¹⁷⁹N. F. Mott, „The electrical conductivity of transition metals“, *Proceedings of the Royal Society London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **153**, 699 (1936).
- ¹⁸⁰A. Johansson, C. Herschbach, D. V. Fedorov, M. Gradhand und I. Mertig, „Validity of the relativistic phase shift model for the extrinsic spin Hall effect in dilute metal alloys“, *Journal of Physics: Condensed Matter* **26**, 274207 (2014).
- ¹⁸¹A. Fert und P. M. Levy, „Spin Hall Effect Induced by Resonant Scattering on Impurities in Metals“, *Physical Review Letters* **106**, 157208 (2011).
- ¹⁸²A. Fert und P. M. Levy, „Erratum: Spin Hall Effect Induced by Resonant Scattering on Impurities in Metals [Physical Review Letters **106**, 157208 (2011)]“, *Physical Review Letters* **111**, 199904 (2013).
- ¹⁸³B. Gu, Z. Xu, M. Mori, T. Ziman und S. Maekawa, „Enhanced spin Hall effect by electron correlations in CuBi alloys“, *Journal of Applied Physics* **117**, 17D503 (2015).
- ¹⁸⁴C. H. Marrows und B. J. Hickey, „Impurity scattering from δ -layers in giant magnetoresistance systems“, *Physical Review B* **63**, 220405 (2001).
- ¹⁸⁵M. Yamanouchi, L. Chen, J. Kim, M. Hayashi, H. Sato, S. Fukami, S. Ikeda, F. Matsuura und H. Ohno, „Three terminal magnetic tunnel junction utilizing the spin Hall effect of iridium-doped copper“, *Applied Physics Letters* **102**, 212408 (2013).
- ¹⁸⁶S. Takizawa, M. Kimata, Y. Omori, Y. Niimi und Y. Otani, „Spin mixing conductance in Cu-Ir dilute alloys“, *Applied Physics Express* **9**, 063009 (2016).
- ¹⁸⁷S. Onoda, N. Sugimoto und N. Nagaosa, „Quantum transport theory of anomalous electric, thermoelectric, and thermal Hall effects in ferromagnets“, *Physical Review B* **77**, 165103 (2008).
- ¹⁸⁸H. Masuda, T. Seki, Y.-C. Lau, T. Kubota und K. Takanashi, „Interlayer exchange coupling and spin Hall effect through an Ir-doped Cu nonmagnetic layer“, *Physical Review B* **101**, 224413 (2020).
- ¹⁸⁹H. Masuda, R. Modak, T. Seki, K.-i. Uchida, Y.-C. Lau, Y. Sakuraba, R. Iguchi und K. Takanashi, „Large spin-Hall effect in non-equilibrium binary copper alloys beyond the solubility limit“, *Communications Materials* **1**, 75 (2020).

- ¹⁹⁰R. Kukreja, S. Bonetti, Z. Chen, D. Backes, Y. Acremann, J. A. Katine, A. D. Kent, H. A. Dürr, H. Ohldag und J. Stöhr, „X-ray Detection of Transient Magnetic Moments Induced by a Spin Current in Cu“, *Physical Review Letters* **115**, 096601 (2015).
- ¹⁹¹P. M. Haney, H.-W. Lee, K.-J. Lee, A. Manchon und M. D. Stiles, „Current induced torques and interfacial spin-orbit coupling: Semiclassical modeling“, *Physical Review B* **87**, 174411 (2013).
- ¹⁹²S.-h. C. Baek, V. P. Amin, Y.-W. Oh, G. Go, S.-J. Lee, G.-H. Lee, K.-J. Kim, M. D. Stiles, B.-G. Park und K.-J. Lee, „Spin currents and spin-orbit torques in ferromagnetic trilayers“, *Nature Materials* **17**, 509 (2018).
- ¹⁹³A. Fabian, M. Czerner, C. Heiliger, H. Rossignol, M.-H. Wu und M. Gradhand, „Spin accumulation from nonequilibrium first principles methods“, *Physical Review B* **104**, 054402 (2021).

N. Eigene Veröffentlichungen

- ^{H1} K. Tauber, A. Hönemann, D. V. Fedorov, M. Gradhand, und I. Mertig. „Enhancement of the anomalous Hall effect in ternary alloys“. *Physical Review B* **91**, 220404 (2015).
- ^{H2} F. Töpler, A. Hönemann, K. Tauber, D. V. Fedorov, M. Gradhand, und I. Mertig. „Nonlocal anomalous Hall effect in ternary alloys based on noble metals“. *Physical Review B* **94**, 140413 (2016).
- ^{H3} A. Hönemann, C. Herschbach, D. V. Fedorov, M. Gradhand, und I. Mertig. „Absence of strong skew scattering in crystals with multi-sheeted Fermi surfaces“. *Journal of Physics: Condensed Matter* **31**, 085803 (2019).
- ^{H4} A. Hönemann, C. Herschbach, D. V. Fedorov, M. Gradhand, und I. Mertig. „Spin and charge currents induced by the spin Hall and anomalous Hall effects upon crossing ferromagnetic/nonmagnetic interfaces“. *Physical Review B* **99**, 024420 (2019).

O. Danksagung

Mein erster und größter Dank gilt Prof. Dr. Ingrid Mertig. Angefangen mit meiner Bachelorarbeit hat Ingrid mich bis zum heutigen Tage unterstützt, wenngleich ich ihre Geduld mehrmals strapaziert habe. Ich habe Ingrid als eine sehr anregende und ermutigende Diskussionspartnerin erlebt, die stets ein offenes Ohr für alle fachlichen und persönlichen Anliegen hat. Überdies bin ich über ihre, in meinen Augen keine selbstverständliche, Bereitschaft meine Stelle bis zum Abschluss der Promotion zu finanzieren, dankbar.

Einen herzlichen Dank an Dr. Christian Herschbach für die mehrjährige intensive Betreuung meiner Promotion, für den wissenschaftlichen Austausch, und die gute Zusammenarbeit. Für Fragen oder Diskussionen stand seine Tür stets offen.

Für die Betreuung meiner Promotion in den ersten Monaten bedanke ich mich bei Dr. Dmitry Fedorov (Universität Luxemburg). Sowohl bei Dima als auch bei Dr. Martin Gradhand (University of Bristol) bedanke ich mich für ihre kritischen Bemerkungen und Diskussionen zu den Publikationen. Insbesondere profitierte ich von ihrer Expertise bzgl. des relativistischen KKR-Code.

Besonders möchte ich mich bei Dr. Annika Johansson bedanken für Ihre Bereitschaft meine Dissertation in kürzester Zeit kritisch zu kommentieren und zu lekturieren. Mehr noch vor dem Hintergrund dies zwischen eigener wissenschaftlicher Arbeit und Kinderbetreuung einzuschieben, gebührt ihr mein Dank.

Für das angenehme Klima sowie die kritischen Anmerkungen zu Vorträgen, Postern, usw. bedanke ich mich bei der Arbeitsgruppe „Quantentheorie der Festkörper“. Im Speziellen gilt mein Dank meinen Arbeitskollegen Thorsten Aull und Franziska Töpfer.

Der Deutschen Forschungsgemeinschaft danke ich für die Finanzierung meiner Arbeitsstelle zunächst über den Sonderforschungsbereich 762 (SFB 762) und anschließend über den Sonderforschungsbereich/Transregio 227 (SFB/TRR 227). Im Besonderen danke ich der *integrated Research Training Group* (iRTG) als Teil des CRC/TRR 227, koordiniert von Dr. Britta Anstötz, für die Möglichkeit des Austausches mit anderen Doktoranden der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg und der Freien Universität Berlin.

Weiterhin bin ich meinen Freunden Heiner Raum, geb. Baier, und Mathias Augstein, geb. Albrecht, dankbar, dass unsere Freundschaft seit dem ersten Semester besteht.

Schließlich gilt mein Dank Valerie. Ohne ihre Unterstützung, Motivation und Liebe hätte diese Arbeit sicher nicht ihren Abschluss gefunden.

P. Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, Albert Lucas Hönemann geboren am 30. April 1990 in Dinklage, gemäß § 5 der Promotionsordnung der Naturwissenschaftlichen Fakultäten I, II und III der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg vom 13.07.2016, dass ich die vorliegende Dissertation mit dem Titel

Ab-initio BESCHREIBUNG VON TRANSPORTKOEFFIZIENTEN IN CO/CU-VIELFACHSCHICHTEN

selbständig und ohne fremde Hilfe verfasst hat, keine anderen als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe und die den benutzten Werken wörtlich oder inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Ich erkläre, dass ich weder vergebliche Promotionsversuche unternommen habe noch die Dissertation in der gegenwärtigen bzw. in einer anderen Fassung bereits einer anderen Fakultät vorgelegt habe.

Ich erkläre, dass gegen mich weder Vorstrafen vorliegen noch dass ein Ermittlungsverfahren eingeleitet ist.

Halle (Saale), den 13. September 2021

Albert Lucas Hönemann

Q. Lebenslauf

Persönliche Informationen

Name Hönemann
Vornamen Albert Lucas
Adresse

Geburtsdatum und -ort
Staatsangehörigkeit
Familienstand
Religionszugehörigkeit

Schulbildung

Hochschulausbildung

seit 06/2016	Promotionsstudium, Institut für Physik, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale)
10/2013 – 05/2016	Studium Master Physik, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale) Abschlussnote: 1,1 Titel der Masterarbeit: „Untersuchungen zum Spin- und anomalen Hall-Effekt in verdünnten magnetischen Legierungen“
10/2010 – 09/2013	Studium Bachelor Physik, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale) Abschlussnote: 1,2 Titel der Bachelorarbeit: „Anomaler Hall-Effekt im sphärischen Bandmodell“

Beruf

seit 06/2016	wissenschaftlicher Mitarbeiter, Institut für Physik, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale)
10/2013 – 05/2016	wissenschaftliche Hilfskraft, Institut für Physik, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale)
10/2011 – 09/2013	studentische Hilfskraft, Institut für Mathematik, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale)
11/2009 – 07/2010	Zivildienst, Malteser Hilfsdienst Dinklage gGmbH, Dinklage

Stipendien und Preise

Halle (Saale), den 13. September 2021

Albert Lucas Hönemann