

FKPhy1

Es ist dabei möglich, folgende Klassifizierung vorzunehmen:

- *einkristalline Festkörper*: periodisch angeordnete Atome im idealen Kristall (Nah- und Fernordnung vorhanden), zum Beispiel Diamant, Salzkristalle, etc.
- *polykristalline Festkörper*: eine Anordnung von kleinen Einkristallen, die über Versetzungen oder Fehlstellen miteinander verbunden sind (Nah- und Fernordnung pro Kristallit vorhanden, keine Fernordnung über Kristallitgrenzen hinweg), zum Beispiel Metalle, Quarze, etc.
- *amorphe Festkörper*: statistische Anordnung (nur eingeschränkte Nahordnung, keine Fernordnung), zum Beispiel Gläser, bestimmte Legierungen, etc.

$r=0.52 \text{ A Bohrradius}$

Lyman-Serie: Übergänge von n_2 nach $n_1 = 1$

- *Balmer-Serie*: Übergänge von n_2 nach $n_1 = 2$
- *Paschen-Serie*: Übergänge von n_2 nach $n_1 = 3$
- *Brackett-Serie*: Übergänge von n_2 nach $n_1 = 4$
- *Pfund-Serie*: Übergänge von n_2 nach $n_1 = 5$
- *Humphreys-Serie*: Übergänge von n_2 nach $n_1 = 6$

Struktur = Gitter + Basis.

Kristallgitter werden aufgrund ihrer Symmetrien unterschieden.

1-Drehung

2-Spiegelung an einer Ebene

3-Inversion

4-Drehinversion

- Es gibt **sieben verschiedene Kristallsysteme**:

Kristallsystem	Gitterkonstanten	Winkel
kubisch	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
trigonal (rhomboedrisch)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \gamma = 120^\circ$
tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
orthorhombisch	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
monoklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$
triklin	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$

Lasse mehrere Gitterpunkte je Einheitszelle auf **raumzentrierten, flächenzentrierten** oder **basiszentrierten** Positionen zu, um Anzahl der Symmetrien zu maximieren. Dies ergibt die **14 Bravais-Gitter**.

—————>

In zwei Dimensionen existieren fünf Bravais Gitter, wovon vier primitiv sind und eins ist zentriert. Die fünf Bravais Gitter sind in Abb. 1.13 dargestellt.

—————>

Van der Waals Kräfte sind Wechselwirkungen, die zwischen verschiedenen Atomen und/oder Molekülen auftreten. Sie sind relativ **schwache**, nicht-kovalente Wechselwirkungen.

—————>

Die **Bindung** entsteht durch die elektrostatische Anziehung entgegengesetzt geladener Teilchen. Die Ionen sind regelmäßig in einem Ionengitter angeordnet und sie bilden häufig Kristalle. Ihr Aufbau ist abhängig von der Ladung und den Größenverhältnissen der Ionen.

—————<

kovalente Bindung Bei den Elementverbindungen der Gruppen III bis V des Periodensystems (z.B. C, Si, Ge) treten Hybridisierungen der p- und s-Orbitale auf.

metallische Bindung Das freie Elektronengas sorgt allgemein für eine Gleichverteilung der Elektronen im Festkörper. Die Randbedingungen einer Oberfläche sorgen allerdings dafür, dass die Elektronen sich mehr im Rumpf des Festkörpers aufhalten als an der Oberfläche. Diese Elektronenumlagerung sorgt für ein Dipolfeld, das eine Kraft ausübt und so den Abstand der ersten zur zweiten Atomlage verringert. Dieser Effekt sorgt also nicht für eine Rekonstruktion (Neuanordnung der Atome in der ersten Lage), sondern für eine Relaxation (verringertes Atomlagenabstand an der Oberfläche).

Viele Elemente können in verschiedenen Strukturen vorkommen: **Allotropie**.
Umwandlung durch Änderung der Temperatur oder des Drucks.

The critical temperature of a ferromagnetic material is called the Curie temperature (T_c) and that of an anti-ferromagnetic material, the Néel temperature (T_N).

pin-valve structure was NiFe(15 nm)/ Cu(2.6 nm)/NiFe(15 nm)/FeMn(10 nm). There are two ferromagnetic NiFe layers and an anti-ferromagnetic FeMn layer is attached to one of the NiFe layers to increase the required coercive force via the exchange anisotropy. The other NiFe layer behaves freely as a soft magnet. Therefore, the two NiFe layers are called the "pinned" and "free" layers, respectively.

The z-component of spin s_z takes one of two values $\pm 1/2$ and is not necessarily conserved, that is, it is time dependent due to such effects as the spin-orbit interaction (SOI) and interactions between electrons. Therefore, the length for which the spin of an electron is conserved is finite. This length is called the spin-flip mean free path and typically takes values in the range 10² nm–10¹ nm.

Due to scattering of electrons, the length an electron travels with a fixed spin direction is much shorter than the spin-flip mean free path. This length is called the spin-diffusion length l_{spin} .

Another important length scale is the Fermi wave length λ_F , which characterizes the electronic states.

TMR is a phenomenon in which the overlap of wave functions of electrons in two separated ferromagnetic metals becomes small.

anomalous Hall effect (AHE) and spin Hall effect (SHE)

Since SOI is a coupling of spin and orbital motion of electrons, current control of spin and magnetic control of charge via SOI are possible. This is the reason that SOI attracts much interests in the technological aspect.

One of the most important requirements for magnetoresistance (MR) in nanoscale ferromagnets is spin dependence of the electrical resistivity. In this section, we review spin-dependent resistivity (or conductivity) in ferromagnetic bulk metals and alloys, emphasizing the role of the electronic states on the resistivity at low temperatures.

The resistivity decreases with increasing magnetic field due to a change in the alignment of the magnetization of the Fe layers

The magnitude of the MR is expressed by the so-called MR ratio, defined as $\frac{R_{\text{AP}} - R_{\text{P}}}{R_{\text{P}}}$;

Spin valve

Technological applications of GMR, for example, sensors, require a sharp response of the magnetization direction to the external magnetic field within a few Oe

To achieve such sensitivity, a trilayer structure with an attached antiferromagnetic has been designed. The magnetization of the magnetic layer adjacent to the antiferromagnetic layer is pinned by the antiferromagnetism and only the other magnetic layer responds to the external magnetic field. This kind

of trilayer is called a spin valve

Simple picture of GMR

TUNNEL MAGNETORESISTANCE

TMR in ferromagnetic tunnel junctions (FTJs) was reported prior to the discovery of GMR [112, 113]. The observed MR ratios, however, were rather small at the time. A large TMR at room temperature was reported for Fe/Al–O/Fe in 1995 [114–116], and it has attracted considerable attention due to its wide potential application in sensors and memory storage devices in the near future. In the same year, tunnel-type MR was reported for metal-oxide ferromagnetic granular films [117, 118].

Many theoretical studies have so far investigated tunnel resistance and TMR [11, 119–123]. Since TMR is caused by tunnelling current through an insulating barrier, it is sensitive to physical factors such as temperature, voltage and the thickness and energy height of the barrier; it is also affected by scattering mechanisms. It is therefore vital to clarify the effects of each factor on TMR in order to develop technological applications of TMR.

In this section, we first overview the experimental results of TMR together with a phenomenological theory, and then describe the results obtained using microscopic theories. We also touch upon some recent experiments.

5.1. Ferromagnetic tunnel junctions

One of the characteristics of TMR is that the external magnetic field required to rotate the magnetization is sufficiently low.

where $P_L(R)$ is the spin polarization of L(R) electrodes a

An intuitive picture of the tunnelling process explained above is shown in

Ingredients for TMR

Tunnel junctions are usually composed of an insulating barrier sandwiched between two different ferromagnetic metals. Therefore, the Fermi surfaces of the L and R electrodes are generally different. Since k_{\parallel} is conserved in specular tunnelling, only states on the Fermi surface with the same k_{\parallel} may contribute to tunnelling.

When a semiconductor (e.g. GaAs) is used as the barrier, interfacial states, called Shockley states, appear within the energy band gap.

Spin-flip tunnelling

The results presented thus far were obtained by assuming that the spin of tunneling electrons is conserved. When there exist impurity spins within the barrier or near the interfaces, the tunnelling electrons may interact with these impurity spins and reverse their spins in the tunnelling process. This kind of spin-flip tunnelling may reduce the MR ratio. Interaction between conduction electrons and localized spins in electrodes may also produce similar effects.

Summing up these results, theory predicts that more than two periods appear in TMR oscillations and that the MR ratio oscillates about a finite value. These theoretical results do not agree with experimental observations. These results, however, are modified when roughness is present, and become [159]:

The DOS of metallic ferromagnets is usually spin dependent. When the DOS of either a \uparrow or \downarrow spin state is zero at the Fermi level, and one of two spin states is metallic and the other is insulating, the metals are referred to as half-metals. The spin polarization P of these half-metals is 100%, and therefore half-metals have potential applicability as magnetoresistive devices

Recently, it has been shown using the first-principles method that diluted magnetic semiconductors, such as (GaMn)As, may also be half-metallic. In experiments in which point contacts and tunnel junctions were used to measure spin polarization, lower values than 100% were obtained for P (e.g. 90% for CrO₂, 70–85% for LaSrMnO₃ and 60% for Heusler alloys) [164–166]. Recently, relatively high MR ratios have been observed in FTJs with Heusler alloys, suggesting that the value of P is about 86% [167, 168]. In the following, we briefly review the electronic states of half-metals, and give some experimental results for TMR in FTJs with half-metals.

We have shown that the SOI gives rise to the magnetoresistance known as AMR. Since SOI is a coupling of spin and orbital motion of electrons, it also gives rise to other interesting transport properties called as anomalous Hall effect (AHE) and spin Hall effect (SHE) as well as electric field-induced spin accumulation in 2DEG.

- Since the first three types of SOI are called intrinsic SOI since they reside uniformly in the system, the last one is called an extrinsic SOI as it is caused by impurity potentials.

when he was studying the force acting on the charged particles under an external electric field E_{ext} and a magnetic field H_{ext}

- This is the so-called "ordinary" Hall effect in which the electrons are deflected into the direction of E_{ext} H_{ext} due to the Lorentz force
-

the extrinsic AHE appears due to spin-dependent scattering. The up- and down-spin electrons are scattered into opposite directions, resulting in spin-up and spin-down charge Hall currents along the perpendicular direction of E_{ext}

called spin Hall effect (SHE). A schematic view of SHE is shown in Fig. 54. When the spin Hall current is originated from scattering of electrons by impurity potentials with SO interaction,

Teo FKPhy1

- Der Widerstand nimmt mit steigender Temperatur stetig zu und hat auch bei Raumtemperatur noch einen relativ geringen Wert von etwa $10^{-4} \Omega\text{cm}$.

entweder ist \hat{A} total antisymmetrisch oder \hat{A} ist total symmetrisch bezüglich Vertauschung. In der Natur nehmen Fermionen die erste und Bosonen die zweite Art Zustände ein.

Im Gegensatz zu den Bose- Operatoren vertauschen die fermionischen Operatoren aber nicht, denn wegen der Anti- symmetrisierung der Wellenfunktion macht es einen Unterschied, ob man erst ein Teil- chen im Zustand $|\uparrow\rangle$ erzeugt und dann eines im Zustand $|\downarrow\rangle$ oder umgekehrt.

Tabelle 6.2: Einige thermodynamische Begriffe.

Begriff	Definition
isobar	$P = \text{const.}$
isochor	$V = \text{const.}$
isotherm	$T = \text{const.}$
isentrop	$S = \text{const.}$
adiabatisch	$\delta Q = 0$
extensiv	proportional zur Größe des Systems
intensiv	unabhängig von der Größe des Systems

Als ein weiteres Beispiel für einen Phasenübergang wollen wir im Folgenden den ferro- magnetischen Phasenübergang besprechen. Einen Ferromagneten kann man sich durch viele atomare magnetische Momente ('Spins') zusammengesetzt denken. Bei sehr hohen Temperaturen sind die Spins ungeordnet und die Magnetisierung ist im Mittel Null. Unterhalb einer kritischen Temperatur, der sogenannten Curie-Temperatur, können sich die Spins spontan ordnen und die mittlere Magnetisierung wird dann ungleich Null.

Theo FKpy

Translationsinvarianz, d. h. die gleiche Atomgruppe wird periodisch wiederholt.

Die Grundidee der Tight-binding-Methode ist es, die Blochfunktionen aus an den Atomrümpfen lokalisierten Zuständen zu konstruieren

Supraleitung

Meissner-Effekt

die Änderung der inneren Energiedichte im normalleitenden und supraleitenden Zustand in Anwesenheit eines magnetischen Feldes.

schwachen Pauli-Paramagnetismus

Streng bedeutet; das Elektron muss sein k Vektor und seine Energie ändern.

Die anisotrope Magnetisierung kann sozugen mit D-Orbitalen zu tun.
(**Anisotropie** (von **altgriechisch** ἀν- *an-* „un-“ [*Alpha privativum*], ἴσος *isos* „gleich“ und τρόπος *tropos* „Drehung, Richtung“) ist die Richtungsabhängigkeit einer **Eigenschaft** oder eines Vorgangs.)

Halbwegs , doch das ist so. hahaah

Mit Hohe Magnetfeld —>

Das war damals eine große Aufregung in der Physik

Die Arbeitsschicht (free)(Richtung ändern)

Fixierte Schicht (Referenz)

Die **Born-Oppenheimer-Näherung** oder **Born-Oppenheimer-Approximation** (nach **Max Born** und **J. Robert Oppenheimer**) oder **adiabatische Näherung** ist eine **Näherung** zur Vereinfachung der **Schrödingergleichung** von Systemen aus mehreren **Teilchen**. Sie nutzt aus, dass schwere und leichte Teilchen in einem System ihre Bewegungsrichtung auf sehr unterschiedlichen Zeitskalen ändern, und dass die Bewegungsgleichungen der schnellen, leichten daher ohne Berücksichtigung der Bewegung der langsamen, schweren sinnvoll gelöst werden kann.

Die Born-Oppenheimer-Approximation wird bei der **quantenmechanischen** Behandlung von **Molekülen** und **Festkörpern** angewendet, da diese aus mindestens zwei **Atomkernen** und einer Vielzahl sehr viel leichter **Elektronen** bestehen. Auch in der **physikalischen Chemie** findet die Näherung breite Anwendung, da hier lediglich für die einfachsten Systeme, z. B. das **Wasserstoffatom**, eine **analytisch exakte Lösung** der Schrödinger-Gleichung bekannt ist.^[1] Die Born-Oppenheimer-Approximation wurde erstmals 1927 in den **Annalen der Physik** veröffentlicht.^[2]

Als **Magnon** bzw. Magnon-**Quasiteilchen** bezeichnet man einen kollektiven **Anregungszustand** eines **magnetischen** Systems mit Eigenschaften eines **bosonischen** Quasiteilchens. Dieser Anregungszustand entspricht in **Festkörpern** der **quantisierten** Form einer magnetischen **Spinwelle**, analog zu den **Phononen** als quantisierten **Schallwellen**.

Einfacher ausgedrückt handelt es sich um eine Störung in Form einer Abweichung des Spins einzelner Teilchen, welche sich wie eine **Schallwelle** durch den Festkörper ausbreitet.

Unter einem **Quasiteilchen** versteht man eine Anregung eines **Vielteilchensystems**, die eine Energie-Impuls-Beziehung (**Dispersionsrelation**) wie ein **Teilchen** aufweist. Bei einem Quasiteilchen handelt es sich meist um einen **kollektiven Zustand** vieler Teilchen, eine **elementare Anregung** oder manchmal auch um den **gebundenen Zustand** eines Teilchenpaares. Charakteristisch für Quasiteilchen ist jedoch, dass sie außerhalb ihres Vielteilchensystems nicht auftreten können. Ein bekanntes Beispiel sind die **Defektelektronen** („Löcher“) in einem **Halbleiter**, in dem sich die negativ geladenen **Valenzelektronen** kollektiv so in eine Richtung bewegen, als würde sich ein positiv geladenes Teilchen in die entgegengesetzte Richtung bewegen. Andere Beispiele sind **Phononen**, **Magnonen**, **Cooper-Paare** und **Exzitonen**.

Ein **Exziton** (engl. *exciton* von *excitation*, Anregung) ist ein **gebundenes Elektron-Loch-Paar** in einem **Isolator** bzw. einem **Halbleiter**. Es ist somit eine **elementare Anregung** des **Festkörpers** und außerdem wie ein **Phonon** oder ein **Polaron** ein **Quasiteilchen**. Ein Exziton kann sich durch den **Kristall** bewegen und transportiert dabei seine **Anregungsenergie** durch diesen hindurch, ohne dass ein Ladungstransport stattfindet, da das Exziton elektrisch neutral ist. Exzitonen haben einen ganzzahligen Spin. Ein Exziton spielt eine große Rolle bei der **Absorption von Licht** in Halbleitern. Es kann z. B. entstehen, wenn ein **Photon** in einen Halbleiter eindringt und ein Elektron zum Übergang aus dem **Valenzband** in das **Leitungsband** anregt. Das Elektron und das im Valenzband entstandene, entgegengesetzt **geladene Loch** ziehen sich durch die **Coulomb-Kraft** gegenseitig an. Diese Situation ähnelt einem **Wasserstoffatom** und lässt sich auch **quantenmechanisch** analog beschreiben. Das gebundene Elektron/Loch-Paar hat eine etwas geringere Energie als der ungebundene Zustand. Allerdings ist die **Bindungsenergie** in der Regel viel kleiner und die räumliche Ausdehnung viel größer als beim Wasserstoffatom, da die Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch teilweise abgeschirmt ist („Screening“).

<https://www.uni-muenster.de/Physik.AP/Demokritov/Forschen/Forschungsschwerpunkte/mBECwasw.html>

<https://www.uni-muenster.de/Physik.AP/Demokritov/Forschen/Forschungsschwerpunkte/mBECwasw.html>

Bindungen im Festkörper

https://qnap.e3.physik.tu-dortmund.de/suter/Vorlesung/Festkoerperphysik_WS01_02/3_Bindungen.pdf

<https://www.uni-muenster.de/Physik.AP/Demokritov/Forschen/Forschungsschwerpunkte/mBECwam.html>

<https://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index-en.html>

<https://demonstrations.wolfram.com/MillerIndicesForASimpleCubicLattice/>

https://www.researchgate.net/figure/Rocking-curves-of-the-asymmetric-1-0-5-reflection-peaks-in-AlN-epilayers-grown-with-and_fig4_258260784

https://www.researchgate.net/post/peak_position_of_AlN

<https://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index-en.html>

<https://ieeexplore.ieee.org/stamp/stamp.jsp?tp=&arnumber=7886528>

<https://www.rigaku.com/newsletters/mabu/april2015/thin.film.training.book.pdf>

<https://www.freiberginstruments.com/x-ray-diffraction/omegatheta-x-ray-diffractometer/omegatheta-rocking-curve-measurement.html>

<https://wiki.anton-paar.com/en/x-ray-diffraction-xrd/>

—

X-Ray Analysis

—————>

X-ray diffraction results when an monochromatic, collimated X-Ray beam strikes a crystalline sample and the lattice spacings between atomic planes produce constructive interference with the incident beam at specified angles, in accordance with Bragg's Law.

The XRD system scans over a range of diffraction angles, yielding diffraction peaks that can be correlated to distinct families of atomic planes in crystalline specimens.

By analyzing the XRD peak pattern, one can: identify and quantify crystalline phases, calculate residual stress (macrostrain) in the material from measured lattice parameters, characterize the crystallite size and microstrain from peak broadening effects, and map the measured lattice parameters in reciprocal space to analyze pseudo-morphic growth of epitaxial films.

Additionally, advanced modeling can be performed from high-resolution XRD data to obtain layer composition and thickness information for epitaxial films, and rocking-curves procedures can be used to show the quality of the films.

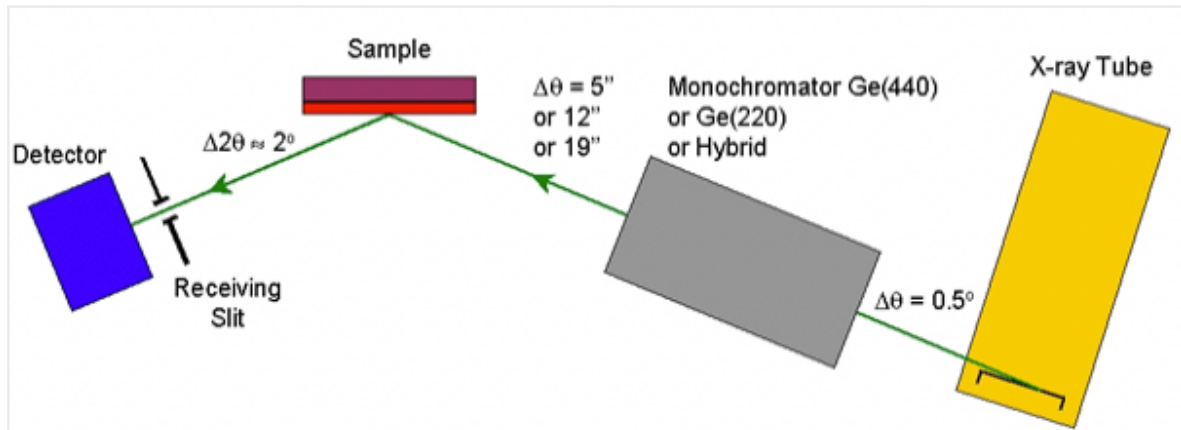
Rocking Curve

RC measurement reveals broadening of the diffraction peaks. The increase in the peak widths can be caused by:

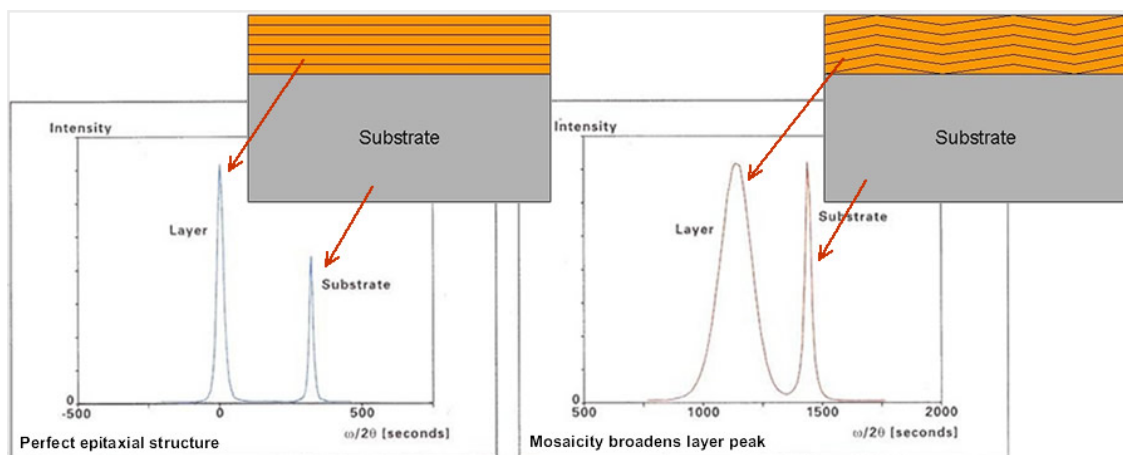
Mosaicity (misorientation of crystallites)

Strain

Limited layer thickness



Typically XRD peak width is quantitatively described by Full-Width-at Half-Maximum (FWHM). From RC measurement it is impossible to separate mosaicity (variation in w) and lattice strain (variation in $w/2q$). These effects can be separated by analyzing Reciprocal Space Maps (RSM).



Empirically, mosaicities can be determined by measuring *rocking curves*.

Rocking Curve(Omega Scan) is an useful way to study perfection when the planes are not parallel. It's done by fixing the detector at the center of the expected Bragg reflection and the sample is tilted.

Defects like mosaicity, dislocations, and curvature create disruptions in the perfect parallelism of the atomic planes.

Rocking Curve(Omega Scan) is an useful way to study perfection when the planes are not parallel. It's done by fixing the detector at the center of the expected Bragg reflection and the sample is tilted.

The rocking curve is a way to explore a small region of reciprocal space at a constant Q-value. This is the only way to get information about the misorientation of different domains or zones of the film/crystal.

I try to explain this with an example. If you collect a $\theta/2\theta$ scan you will find diffraction peaks corresponding to the family of planes parallel to the surface. This scan corresponds to a travel in the reciprocal space in the direction perpendicular to the surface. For example, in a cubic/tetragonal/orthorhombic cell, and a (001) surface, the travel will be along (001)*. For every point in the scan the modulus of Q will be $2\sin\theta/\lambda$. In general peaks will be thin (for very thin films, they will be wide due to the finite size effect). With this technique one can detect only interplanar distances, and that there are regions of the crystal with the right orientation (parallel to sample surface). To detect different orientations of those planes it is mandatory to make scans conserving the value of the Q modulus. There are different ways to perform that and one of those is a rocking curve. Moving omega keeping 2θ fix makes a travel in the reciprocal space that is a circumference around the ideal position of the diffraction peak. How quickly it disappears the intensity around this ideal position of the peak inform you about how disperse is the orientation of the corresponding planes: a rapid drop of the intensity means small dispersion, and a slow drop a large dispersion. To compare, if you have a polycrystalline sample (every possible orientation of the planes is present), there will be no variation of the intensity along the curve (the only variation will be due to geometrical reasons).

[https://www.researchgate.net/post/](https://www.researchgate.net/post/What_is_the_best_way_to_interpret_REAL_TIME_3D_X_Y_o-2TH_o_ph_ch_reciprocal_space_relative_intensity_data_from_HR_XRD_rocking_curve_analyses)

[What_is_the_best_way_to_interpret_REAL_TIME_3D_X_Y_o-2TH_o_ph_ch_reciprocal_space_relative_intensity_data_from_HR_XRD_rocking_curve_analyses](https://www.researchgate.net/post/What_is_the_best_way_to_interpret_REAL_TIME_3D_X_Y_o-2TH_o_ph_ch_reciprocal_space_relative_intensity_data_from_HR_XRD_rocking_curve_analyses)

