



GEORG-AUGUST-UNIVERSITÄT
GÖTTINGEN

Magneto-Seebeck Effekt: Simulationen und Experimente zum Temperaturverlauf

I. Physikalisches Institut

Bachelorarbeit

vorgelegt von

Anissa Zeghuzi

aus

Hannover

2011

Bearbeitungszeit: 10. Juni 2011 bis 2. September 2011

Betreuer: Marvin Walter

Erstgutachter: Prof. Dr. Markus Münzenberg

Zweitgutachter: Prof. Dr. Cynthia A. Volkert

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theorie: Comsol Lösungsverfahren für Wärmetransfer	3
2.1	Finite-Elemente-Methode	3
2.1.1	Grundlagen der Finite-Elemente-Methode	3
2.1.2	Finite-Elemente-Methode von Wärmetransfer	4
2.2	Numerische Lösungsverfahren	6
2.2.1	Das <i>Newton-Raphson</i> -Verfahren	6
2.2.2	<i>Fixed-leading Coefficient</i> Form der <i>BDF</i>	7
2.3	Zeitabhängige Comsol Solver - IDA und Generalized- α	10
2.3.1	IDA	10
2.3.2	Generalized- α	11
2.3.3	Vergleich der beiden Verfahren	12
3	Theorie: Seebeck-Effekte	13
3.1	Der klassische Seebeck-Effekt	13
3.2	Der Spin-Seebeck Effekt	14
3.3	Der Magneto-Seebeck Effekt	14
4	Comsol Simulationen	21
4.1	Modell und Mesh	21
4.1.1	Modell	21
4.1.2	Mesh	21
4.2	Modus: Heat Transfer in Solids	25
4.3	Realisierung der äußeren Wärmequelle	26
4.3.1	Die Dauerstrich Laserdiode	26
4.3.2	Der gepulsten Lasers	26

4.4	Zeitabhängige Solver Einstellungen: BDF	28
5	Experimentelle Vorgehensweise und Auswertung	29
5.1	Versuchsaufbau	29
5.2	Versuchsdurchführung	30
5.2.1	Messung der fluenzabhängigen Seebeck-Spannung	30
5.2.2	Reflektivitätsmessung	31
5.3	Versuchsauswertung: Bestimmung der Oberflächentemperatur . . .	31
5.3.1	Das Zwei-Temperatur-Modell	32
6	Ergebnisse	35
6.1	Simulationsergebnisse	35
6.1.1	Stationäre Comsol-Simulation	35
6.1.2	Zeitabhängige Comsol-Simulation	35
6.2	Ermittlung der Relaxationszeiten aus den Reflektivitätsmessungen .	38
6.3	Messungen des Magneto-Seebeck Effekts	41
6.3.1	Messungen für die Probe vz101007b	41
6.3.2	Messungen für die Probe mw110509b	45
7	Diskussion	53
7.1	Temperatursimulationen mit Comsol	53
7.2	Bestimmung der Relaxationszeiten aus den Reflektivitätsdaten . . .	54
7.3	Messungen des Magneto-Seebeck Effekt	55
7.3.1	Messungen an der Probe vz101007b	55
7.3.2	Messungen an der Probe mw110509b	56
8	Zusammenfassung und Ausblick	59
	Abbildungsverzeichnis	ii
	Tabellenverzeichnis	iii
	Literaturverzeichnis	v
	Danksagung	viii

1 Einleitung

Schon in den 20er Jahren des 19. Jh. entdeckte *Thomas Johann Seebeck* zufällig, dass in einem, aus zwei verschiedenen elektrischen Leitern bestehenden Stromkreis eine Spannung induziert werden kann, die temperaturabhängig ist.

Erst in den letzten Jahren wurden bei der Untersuchung von Wärmefluss in magnetischen Nanostrukturen eine Vielzahl von spinabhängigen thermischen Effekten beobachtet. Dieses Zusammenspiel von magneto- und thermoelektrischen Effekten resultierte in einer ganz neuen Forschungsrichtung. Ein wichtiger Effekt aus diesem Bereich ist der *Magneto-Seebeck Effekt*, der in dieser Arbeit näher untersucht werden soll.

Der Magneto-Seebeck Effekt tritt auf, wenn die magnetische Ausrichtung eines Materials die ladungsabhängigen Seebeck Koeffizienten verändert. Im Besonderen in Tunnelbarrieren kann der Magneto-Seebeck Effekt bei der Änderung der Magnetisierungsrichtung der beiden magnetischen Schichten von parallel zu antiparallel beobachtet werden. In diesem Zusammenhang kann der Magneto Seebeck-Effekt in Analogie zum magnetischen Tunnelwiderstand verstanden werden. Es hat sich gezeigt, dass der Magneto-Seebeck Effekt in besonderen Tunnelbarrieren aus Magnesiumoxid mit Elektroden aus Eisen-Kobalt Legierungen, die auch ein sehr großes TMR Verhältnis zeigen, besonders stark ist. Aus diesem Grund werden genau jene Tunnelbarrieren in dieser Arbeit näher untersucht.

Die Größe und das Vorzeichen des Effekts können durch die Zusammensetzung der Materialien nahe der Tunnelbarriere, sowie durch die Temperatur verändert werden. Es wurde theoretisch berechnet, dass der Magneto-Seebeck Effekt hingegen früherer Erwartung durchaus in der Größenordnung des klassischen Seebeck Effekts liegt [1] und somit an Bedeutung gewinnt. Theoretisch wurden Werte von bis zu $100 \mu\text{VK}^{-1}$ (1000%) Magneto-Seebeck Effekt berechnet [1] und experimentell bisher $-8,7 \mu\text{VK}^{-1}$ (8,8%) gemessen [2].

Die Kombination von magneto- und thermoelektrischen Effekten bietet Möglich-

keiten in der Anwendungen. So könnten z.B. in der Zukunft Nanometer große Bereiche einzeln lokal durch magnetische Änderungen gekühlt werden.

Zur Berechnung der Seebeck Koeffizienten ist es nötig, den Wärmetransfer innerhalb der Tunnelbarrieren zu simulieren. Dies soll mit Hilfe des Programms *Comsol* erfolgen, dass in Forschung, Lehre und Entwicklung eingesetzt wird und auf der Finite-Elemente-Methode (FEM) basiert. Der Umgang mit Comsol soll beispielhaft einen Einblick darin verschaffen, wie komplizierte physikalische Probleme mit Hilfe von numerischen Verfahren berechnet werden.

Ziel dieser Arbeit ist es, die Temperaturabhängigkeit des Magneto-Seebeck Effekts experimentell aufzuzeichnen, um diese Abhängigkeit mit den theoretischen Vorhersagen zu vergleichen. Es wird erwartet, dass durch die Änderung der Zusammensetzung der Materialien nahe der Tunnelbarriere auch höhere Werte für den Magneto-Seebeck Effekt zu erhalten sind, als es bisher möglich war.

2 Theorie: Comsol Lösungsverfahren für Wärmetransfer

2.1 Finite-Elemente-Methode

In diesem Abschnitt wird zunächst allgemein beschrieben, wie es mit der Finite-Elemente-Methode möglich ist, eine Differentialgleichung für einen Raum zu lösen, der eine unendliche Anzahl von unbekanntem Parametern hat. Es wird also darauf eingegangen, wie das eigentliche Problem durch eines approximiert wird, das eine endliche Anzahl von unbekanntem Parametern hat. Im zweiten Abschnitt wird darauf eingegangen, welche Differentialgleichung für die Simulation von Wärmetransfer gelöst wird und wie das hierfür genutzte numerische Verfahren aussieht.

2.1.1 Grundlagen der Finite-Elemente-Methode

Zur Anwendung der FEM muss zunächst die zu untersuchende Geometrie in ein Netz kleinerer Einheiten unterteilt werden ("mesh elements") (siehe [4] S. 322-324). Zur besseren Veranschaulichung wird im Folgenden als Beispiel gezeigt, wie die Variable u mit linearen Elementen in 1D approximiert wird.

Angenommen das Netz besteht nur aus einem Element $-1 < x < 1$. Um u zu charakterisieren sind die Werte von u an den Knotenpunkten zu ermitteln, $U_1 = u(-1)$ und $U_2 = u(1)$. Die Beschreibung erfolgt mit Hilfe von *Basisfunktionen* $\varphi_i(x)$. Diese sind stückweise linear und haben am i ten Knotenpunkt den Wert 1 und an allen anderen Knotenpunkten den Wert 0. Für eine größere Genauigkeit können die Basisfunktionen auch Polynome höherer Ordnung sein.

Die Beschreibung von Basisfunktionen wird durch die Einführung von *lokalen Koordinaten* vereinfacht. Die lokalen Koordinaten sind je nach Dimension ein Standard- n -Simplex (für $n=1$ das Einheitsintervall, $n=2$ ein gleichseitiges Dreieck, $n=3$ ein

Tetraeder u.s.w.). In diesem Fall ist die natürliche Koordinate das Einheitsintervall ξ gegeben als $(-1,1)$. Die Basisfunktionen werden nun in Abhängigkeit von ξ aufgestellt. Aufgrund der Randbedingungen ($\varphi_1(-1) = 1$ und $\varphi_1(1) = 0$) ergibt sich dann $\varphi_1(\xi) = \frac{1}{2}(1 - \xi)$ und analog $\varphi_2(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \xi)$. Für die Variable u ergibt sich schließlich:

$$u = U_1\varphi_1(\xi) + U_2\varphi_2(\xi)$$

2.1.2 Finite-Elemente-Methode von Wärmetransfer

Das Prinzip der virtuellen Temperatur

Zur Beschreibung des Wärmetransfers wird ein dreidimensionaler Körper angenommen, dessen Material dem Fourierschen Wärmeleitungsgesetz gehorcht (siehe [6]). Die Oberfläche des Körpers wird in einen Anteil S_θ und einen Anteil S_q unterteilt. Die Temperatur von S_θ ist bekannt und wird mit θ^S bezeichnet. Der obere Index S steht für Oberfläche, B wird im Folgenden für den gesamten Körper verwendet. Die Wärmestromdichte durch die Oberfläche S_q ist q^S . k_x, k_y, k_z beschreiben die thermischen Leitfähigkeiten bezogen auf die Raumrichtungen x, y und z . q_x, q_y, q_z sind die Ableitungen des Wärmeflusses pro Einheitsvolumen:

$$q_x = -k_x \frac{\partial \theta}{\partial x} \quad q_y = -k_y \frac{\partial \theta}{\partial y} \quad q_z = -k_z \frac{\partial \theta}{\partial z}$$

Für die erzeugte Wärmerate im Inneren des Körpers q^B gilt unter Annahme des Gleichgewichtszustandes:

$$-q^B = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) \quad (2.1)$$

Es wird eine beliebige ‘virtuelle Temperaturverteilung $\bar{\theta}$ ’ angenommen für die gilt: $\bar{\theta} = 0$ für S_θ . Die differentielle Wärmeflussgleichung des Gleichgewichts (2.1) kann über ein Volumenintegral ausgedrückt werden:

$$\int_V \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) + q^B \right] \bar{\theta} dV = 0$$

Nach einigen Umformungen und der Annahme, dass $\bar{\theta}$ auf S_θ verschwindet, folgt das ‘Prinzip der Virtuellen Temperatur’ [6]:

$$\int_V \bar{\theta}^T \mathbf{k} \bar{\theta} dV = \int_V \bar{\theta} q^B dV + \int_{S_q} \bar{\theta}^S q^S dS \quad (2.2)$$

wobei

$$\bar{\theta}^T = \begin{pmatrix} \frac{\partial \theta}{\partial x} & \frac{\partial \theta}{\partial y} & \frac{\partial \theta}{\partial z} \end{pmatrix}$$

und

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} k_x & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{pmatrix}$$

Die Aufgabe eines numerischen Verfahrens ist es nun die Parameter so zu lösen, dass sich der interne Wärmefluss (linke Seite von Gleichung (2.2)) mit dem externen (rechte Seite) im Gleichgewicht befindet:

$$\underbrace{\int_V \bar{\theta}^T \mathbf{k} \bar{\theta} dV}_{Q_{int}} - \underbrace{\int_V \bar{\theta} q^B dV + \int_{S_q} \bar{\theta}^S q^S dS}_{Q_{ext}} = 0 \quad (2.3)$$

Randbedingungen

Verschiedene Randbedingungen müssen für den Wärmetransfer beachtet werden. So kann die Temperatur an bestimmten Punkten und Oberflächen S_θ , sowie der Eintrag des Wärmestroms q^S vorgegeben werden. In q^S gehen sowohl Randbedingungen durch Konvektion, als auch durch äußere Wärmestrahlung ein. Der Wärmefluss durch Wärmekonvektion aus der äußeren Umgebung in den Körper wird beschrieben durch [6]:

$$q^S = h(\theta_e - \theta^S)$$

h ist hierbei der Konvektionskoeffizient. Die Umgebungstemperatur θ_e ist in diesem Fall bekannt, wohingegen θ_S unbekannt ist.

Für den Wärmefluss durch äußere Wärmestrahlung gilt ganz analog [6]:

$$q^S = \kappa(\theta_r - \theta^S)$$

wobei κ das Verhältnis von Wärmefluss und der Temperaturdifferenz von Strahler und bestrahlter Oberfläche wiedergibt.¹

2.2 Numerische Lösungsverfahren

Es gibt eine Reihe an numerischen Lösungsverfahren, die von den Comsol Solvern genutzt werden. Zwei der wichtigsten Verfahren sollen im Folgenden beschrieben werden, das *Newton-Raphson-Verfahren* und die *Fixed-leading Coefficient Form* der *Backward Differentiation Formulas* (BDF). Im nächsten Abschnitt 2.3 wird auf die Funktionsweise der beiden zeitabhängigen *Solver* IDA und Generalized- α eingegangen.

2.2.1 Das Newton-Raphson-Verfahren

Der Comsol *Solver* benutzt das Newton-Raphson-Verfahren für die Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems.

In jedem Zeitinkrement $\Delta t := h_n = t_n - t_{n-1}$ wird das Newton-Raphson-Verfahren (siehe z.B. [7]) so lange angewendet, bis das Residuum hinreichend klein ist, um dann mit dem nächsten Zeitschritt fortzufahren. Zum Zeitpunkt t_{n-1} hat der Parameter den Wert $y(t_{n-1}) = y_{n-1}$, zum Zeitpunkt $t_{n-1} + h_n$ ist der Wert $y(t_{n-1} + h_n) = y_n$. Für die m -te Approximation von y_n zum Zeitpunkt t_n schreiben wir $y_{n,m}$. Der erste durchlaufende Index n beschreibt in welchem Zeitschritt das Verfahren approximiert, wobei der zweite Index m angibt bei der wievielten Approximation in einem gegebenen Zeitschritt n sich das Verfahren befindet. Angenommen die Gleichung $G(y_{n-1}) = 0$ ist zum Zeitpunkt $t - \Delta t$ gültig, so wird die Lösung für

$$G(y_n) = 0 \tag{2.4}$$

gesucht, wobei $y_n = y_{n-1} + \Delta y_n$.

Geometrisch besteht das Newton-Raphson-Verfahren darin, an der Stelle y_m eine Tangente zu bilden, die Nullstelle zu ermitteln und diese dann für y_{m+1} einzusetzen. Diese Prozedur wird solange fortgeführt, bis Gleichung (2.4) hinreichend gut erfüllt

¹Für κ gilt, $\kappa = h_r[(\theta_r)^2 + (\theta^S)^2](\theta_r + \theta^S)$. Die Variable h_r ist von der Stefan Boltzmann Konstante, dem Emissionsvermögen der Strahlungsquelle und des bestrahlten Körpers und der Geometrie des Körpers abhängig. [6] S.644

ist, um dann mit dem nächsten Zeitinkrement zu beginnen.

Die Funktion G wird also an der Stelle $y_{n+1,m+1}$ durch Taylorexansion linearisiert:

$$G(\underbrace{y_{n,m} + \Delta y_{n,m}}_{:=y_{n,m+1}}) = G(y_{n,m}) + G'(y_{n,m})\Delta y_{n,m} \quad (2.5)$$

Wobei $G'(y_m)$ die erste Ableitung von G an der Stelle y_m ist. Einsetzen von (2.5) in (2.4) liefert:

$$\begin{aligned} G'(y_{n,m})\Delta y_{n,m} &= -G(y_{n,m}) \\ &:= r_{n,m} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Wobei $r_{n,m}$ das Residuum ist. Dieses soll hinreichend klein werden.

Mit

$$\Delta y_{n,m} = y_{n,m+1} - y_{n,m}$$

folgt schließlich

$$y_{n,m+1} = y_{n,m} + \frac{-G(y_{n,m})}{G'(y_{n,m})} \quad (2.7)$$

Gleichung (2.7) kann nun anstatt $y_{n,m}$ in (2.6) eingesetzt werden, um das Residuum für den $(m + 1)$ -ten Schritt zu berechnen. Es wird geprüft, ob $r_{n,m+1}$ hinreichend klein ist. Tritt dieser Fall ein, wird zum nächsten Zeitinkrement $t_{n+1} = t_n + h_{n+1}$ übergegangen. Ist dies nicht der Fall, so wird mit der Newton-Raphson-Methode fortgefahren, bis sich der Gleichgewichtszustand eingestellt hat, d.h. bis Gleichung (2.4) hinreichend gut erfüllt ist.

Das Gelingen des Newton-Raphson-Verfahrens hängt maßgeblich von der Wahl der Anfangswerte ab.

2.2.2 Fixed-leading Coefficient Form der BDF

Die Fixed-leading Coefficient Form (FLC-Form) ist ein Prädiktor-Korrektor Verfahren und wird über Polynominterpolation realisiert.² Die Ordnung q des Polynoms ist durch die Ordnung des BDF-Verfahrens gegeben. Angenommen es wurde die

²<http://sundials.wikidot.com/bdf-flc-derivation>

Lösung für $y_j \approx y(t_j)$ approximiert, wobei $j = 1, \dots, n - 1$. Die letzte Schrittweite sei $h_j = t_j - t_{j-1}$ und $h_n = t_n - t_{n-1}$ die gegenwärtige Schrittweite. Es soll nun die Lösung für $y_n \approx y(t_n)$ approximiert werden.

Zunächst wird ein Prädiktor-Polynom ω_p durch die letzten q berechneten Werte gelegt. Die Ableitung des Polynoms muss der Ableitung des letzten berechneten Wertes genügen, d.h.:

$$\begin{aligned}\omega_p(t_{n-i}) &= y_{n-i} \quad \text{für } i = 1, \dots, q \\ \dot{\omega}_p(t_{n-1}) &= \dot{y}_{n-1}\end{aligned}\tag{2.8}$$

Dann wird ein Korrektor Polynom ω_k gebildet, dass im Abstand der gegenwärtigen Schrittgröße h_n , die letzten q Werte des Prädiktorpolynoms annimmt und gleichzeitig durch die noch zu berechnende Lösung für den Zeitpunkt t_n verläuft:

$$\begin{aligned}\omega_k(t_n - ih_n) &= \omega_p(t_n - ih_n) \quad \text{für } i = 1, \dots, q \\ \omega_k(t_n) &= y_n\end{aligned}\tag{2.9}$$

Da sowohl das Prädiktor-Polynom ω_p als auch das Korrektor Polynom ω_k von der Ordnung q sind, können sie durch ein neues Polynom $c(t)$ folgendermaßen in Relation gesetzt werden:

$$\omega_k(t) = \omega_p(t) + c(t)[\omega_k(t_n) - \omega_p(t_n)]\tag{2.10}$$

Wird diese BDF-Gleichung in eine gewöhnliche Differentialgleichung eingesetzt, so führt dies zu einer nichtlinearen Gleichung der gewünschten Lösung y_n . Im folgenden soll also diese nichtlineare Gleichung für y zur Zeit t_n gelöst werden. Nach Konstruktion ist dies $\omega_k(t_n)$. Als Anfangswert wird der Wert des Prädiktor-Polynoms ω_p zum Zeitpunkt t_n gewählt:

$$\begin{aligned}y_{n(0)} &= \omega_p(t_n) \\ \dot{y}_{n(0)} &= \dot{\omega}_p(t_n)\end{aligned}\tag{2.11}$$

Wobei $y_{n(m)}$ mit den Iterationsschritten $m = 1, 2, \dots, M$ gelöst wird. Bei $y_{n(M)} = y_n$ ist das Verfahren konvergiert. Mit den obigen Definitionen wird 2.10 zu:

$$\omega_k(t) = \omega_p(t) + c(t)[y_n - y_{n(0)}] \quad (2.12)$$

Nun werden 2.8 und 2.9 genutzt, um Bedingungen für $c(t)$ abzuleiten. Auswerten von 2.12 an der Stelle $t_n - ih_n$ für $i = 0, 1, \dots, q$ unter der Berücksichtigung von 2.8 und 2.9 liefert folgende $(q + 1)$ -Bedingungen für das Polynom $c(t)$:

$$\begin{aligned} c(t_n) &= 1 \\ c(t_n - h_n) &= c(t_n - 2h_n) = \dots = c(t_n - qh_n) = 0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Mit der Relation 2.12 folgt für die BDF-Formel dann:

$$\dot{y}_n = \dot{y}_{n(0)} + \dot{c}(t_n)[y_n - y_{n(0)}] \quad (2.14)$$

Um nun die vollständige Ableitung der BDF-Formel zu erhalten, muss nur noch die Ableitung von $c(t)$ zum Zeitpunkt t_n unter den Bedingungen 2.13 ermittelt werden. Aus den Bedingungen 2.13 kann $c(t)$ folgendermaßen konstruiert werden:

$$c(t) = K \prod_{i=1}^q [t - (t_n - ih_n)] \quad (2.15)$$

Wobei K zunächst eine beliebige Konstante ist, die im folgenden ermittelt wird. Für $t = t_n$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} c(t_n) = K \cdot h_n \cdot 2h_n \cdot \dots \cdot qh_n \\ \Leftrightarrow K &= \frac{1}{q! \cdot (h_n)^q} \end{aligned} \quad (2.16)$$

$c(t)$ ist damit vollständig bestimmt. Für $\dot{c}(t)$ ergibt sich damit:

$$\begin{aligned} \dot{c}(t_n) &= \frac{1}{h_n} \left(1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{q} \right) \\ \Leftrightarrow h_n \cdot \dot{c}(t_n) &= \frac{1}{\beta_0} \end{aligned} \quad (2.17)$$

mit $\beta_0 = 1 + 1/2 + \dots + 1/q$. Wird nun 2.14 mit h_n multipliziert und 2.17 eingesetzt und umgeformt, so erhält man die vollständige BDF-Formel:

$$y_n - y_{n(0)} = h_n \beta_0 [\dot{y}_n - \dot{y}_{n(0)}] \quad (2.18)$$

2.3 Zeitabhängige Comsol Solver - IDA und Generalized- α

Zur Lösung der Differentialgleichung können bei Comsol zwei unterschiedliche Solver genutzt werden, IDA und Generalized- α (siehe [4] S.365).

2.3.1 IDA

IDA ist ein Open Source Solver und gehört zu den SUNDIALS (*SU*ite of *N*onlinear and *D*ifferential/*AL*gebraic equation Solvers). IDA wurde im Lawrence Livermore National Laboratory entwickelt und ist eine moderne Implementierung des DASPK Solvers für Differential-algebraische Gleichungen [9]. IDA benutzt BDF-Verfahren. Dies sind implizite Mehrschrittverfahren zur numerischen Lösung des Anfangswertproblems für ein differential-algebraischen Gleichungssystem (DAG System) der allgemeinen Form:

$$F(t, y, \dot{y}) = 0 \quad y(t_0) = y_0 \quad \dot{y}(t_0) = \dot{y}_0 \quad (2.19)$$

Wobei für den Fall des Wärmetransfers gilt (siehe 2.4):

$$F(t, y, \dot{y}) = Q_{int,n} - Q_{ext,n} = 0$$

Da die Lösungsverfahren implizit sind, muss ein nichtlineares Gleichungssystem zu jedem Zeitschritt t gelöst werden. In IDA ist ein Solver integriert der mit Hilfe der Newton-Raphson-Methode für jeden Zeitschritt das nichtlineare Gleichungssystem löst (siehe 2.2.1).

Die Integrationsmethode von IDA benutzt BDF-Verfahren mit variabler Schrittgröße und variabler Ordnung [9] in *Fixed-leading Coefficient* Form (siehe 2.2.2).

Die Ordnungen reichen von eins bis fünf, wobei die erste Ordnung der *Backward Euler* Methode entspricht. Die Methode besteht darin, durch die letzten q Approximationen y_{n-q} ein Interpolationspolynom zu legen. Die Ableitung des Polynoms muss dann folgende Differentialgleichung zum Zeitpunkt t_n erfüllen:

$$\sum_{i=0}^q \alpha_{n,i} y_{n-i} = h_n \dot{y}_n \quad (2.20)$$

wobei $h_n = t_n - t_{n-1}$ die Schrittweite ist. Die Koeffizienten $\alpha_{n,i}$ hängen nur von der Ordnung des Verfahrens und von den vorangegangenen Schritten ab. Es ergibt sich für y_n bei der einfachsten BDF Methode (BDF-1), der *Backward Euler* Methode, beispielsweise:

$$y_n = y_{n-1} + h_n \dot{y}_n$$

Wendet man BDF-Verfahren (2.20) auf das DAG System (2.19) an, so ergibt sich ein nichtlineares algebraisches Gleichungssystem, das zu jedem Schritt n gelöst werden muss [9]:

$$G(y_n) = F \left(t_n, y_n, \frac{1}{h_n} \sum_{i=0}^q \alpha_{n,i} y_{n-i} \right) = 0$$

Das nichtlineare Gleichungssystem wird mit einer Form des *Newton*-Verfahrens gelöst, sodass sich ein lineares System für jede *Newton* Korrektur ergibt (siehe 2.7):

$$J \cdot (y_{n,m+1} - y_{n,m}) = -G(y_{n,m})$$

Für die Jacobi Matrix J gilt mit $\alpha = \alpha_{n,0}/h_n$:

$$J = \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{\partial F}{\partial y} + \alpha \frac{\partial F}{\partial \dot{y}}$$

α ist ein Skalar, dass sich abhängig von der Schrittgröße und der Ordnung des Verfahrens ändert.

2.3.2 Generalized- α

Der zweite mögliche Solver benutzt die *Generalized- α* Methode. Die *Generalized- α* Methode ist ein implizites Iterationsverfahren zweiter Ordnung [4].

Hier wird ein Parameter α genutzt, um kontrollieren zu können wie viele hohe Frequenzen gedämpft werden. Ist $\alpha = 1$ so wird das Verfahren nicht numerisch gedämpft. Für ein lineares Problem entspricht dies der *midpoint* Methode (siehe z.B. [7] S. 923f). Ist $\alpha = 0$ so wird das Verfahren maximal gedämpft. Für ein lineares Problem wird die höchste Frequenz schon im ersten Schritt ausgelöscht. Die Methode wurde zunächst für Differentialgleichungen zweiter Ordnung in der Strukturmechanik formuliert [10] und später auf Systeme erster Ordnung ausgeweitet [11].

2.3.3 Vergleich der beiden Verfahren

Die beiden Verfahren unterscheiden sich hauptsächlich durch die Realisierung der numerischen Dämpfung. BDF-Verfahren, vor allem aber die *Backward Euler* Methode, haben große Dämpfungseffekte bei hohen Frequenzen. Dies kann dazu führen, dass Lösungen mit theoretisch sehr großem Gradienten fälschlicherweise geglättet werden. Die Generalized alpha Methode hat ähnliche Eigenschaften wie BDF-Verfahren zweiter Ordnung. Ein grundlegender Unterschied allerdings ist der Gebrauch des Parameters α , der die Ordnung der Dämpfung bei hohen Frequenzen kontrolliert. Das Verfahren dämpft verglichen mit BDF-Verfahren erster und zweiter Ordnung sehr viel weniger und ist somit in Fällen großer Gradienten genauer, aber auch weniger stabil.³ Da sich die Lösung des differential-algebraischen Gleichungssystems für einen gepulsten Laser als ohnehin instabil herausgestellt hat, wird für die Lösung des Systems der IDA Solver benutzt.

³Comsol Support Knowledge Base, Solution Number: 1062 - *BDF vs. Generalized Alpha time discretization.*, April 8, 2010, <http://www.comsol.com/support/knowledgebase/1062/>

3 Theorie: Seebeck-Effekte

3.1 Der klassische Seebeck-Effekt

In den 20er Jahren des 19. Jh. entdeckte *Thomas Johann Seebeck*, dass in einem aus zwei verschiedenen elektrischen Leitern bestehenden Stromkreis eine Spannung induziert wird.

Werden zwei unterschiedliche Materialien (in Abbildung 3.1 A und B) in Kontakt

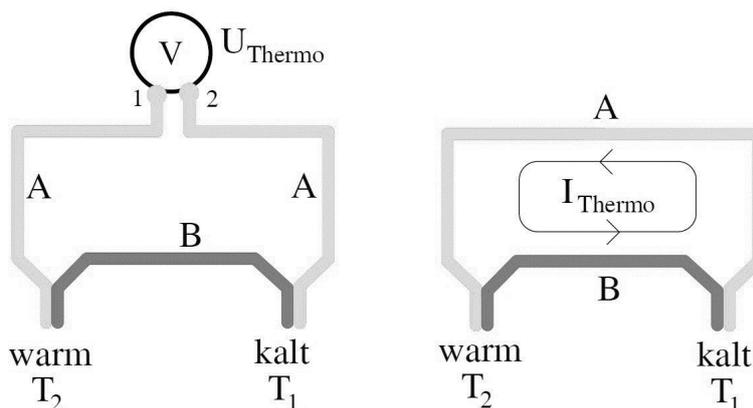


Abbildung 3.1: Links ist ein Thermoelement gezeigt, das für Temperaturen $T_1 \neq T_2$ eine Spannung anzeigt. Rechts entsteht durch kurzschließen von rechter und linker Seite ein stationärer thermoelektrischer Kreisstrom [12].

gebracht, so kommt es aufgrund der unterschiedlichen chemischen Potentiale μ zur Diffusion von Ladungsträgern und eine Spannung baut sich auf. Diese Kontaktspannung ist gegeben durch [12]:

$$U_K = -\frac{1}{e} \cdot (\mu_B - \mu_A)$$

Wird die Temperatur erhöht, so erhöhen sich auch quantenmechanische Effekte

und das chemische Potential verringert sich. An der Grenzfläche der beiden Materialien wird das chemische Potential bei Erhöhung der Temperatur kleiner, der energetische Abstand vergrößert sich allerdings und die Kontaktspannung erhöht sich. Die Kontaktspannung ist damit auch temperaturabhängig.

3.2 Der Spin-Seebeck Effekt

Der *Spin-Seebeck Effekt* kann in Analogie zum klassischen Seebeck Effekt verstanden werden.

Die Ursache hierfür ist eine Asymmetrie in der Zustandsdichte der beiden Spin Kanäle \uparrow und \downarrow in der Nähe der Fermienergie. Im Gegensatz zum klassischen Seebeck Effekt, wo Ladungen räumlich getrennt werden, sind beim Spin-Seebeck Effekt die Spins am gleichen Ort ungleich verteilt. Diese Asymmetrie in der Spinverteilung führt zu unterschiedlichen Seebeck Koeffizienten für die beiden Spinpolarisationen S_{\uparrow} und S_{\downarrow} [1], sodass der Spin-Seebeck Koeffizient folgendermaßen definiert wird:

$$S_s = S_{\uparrow} - S_{\downarrow} \quad (3.1)$$

3.3 Der Magneto-Seebeck Effekt

In magnetischen Tunnelkontakten kann unter Zuhilfenahme eines äußeren Magnetfeldes die Magnetisierungsrichtung der beiden magnetischen Schichten von parallel zu antiparallel geschaltet werden. Der Magneto-Seebeck Effekt tritt nur in solchen Tunnelkontakten auf und ist den beiden magnetoresistiven Effekten, dem GMR-Effekt (engl. *giant magnetoresistance*) und dem TMR-Effekt (engl. *tunneling magnetoresistance*) ähnlich. Diese Effekte zeigen eine Widerstandsabhängigkeit in Bezug auf die relative Magnetisierungsrichtung der beiden ferromagnetischen Schichten der Tunnelbarriere.

Die oben angesprochene Asymmetrie innerhalb der Spinkanäle ist besonders stark in den untersuchten Tunnelbarrieren aus MgO und FeCo [2], die auch ein sehr großes TMR Verhältnis zeigen.

In Abbildung 3.2 ist die Bandstruktur einer Fe bcc Struktur in der [001] (Γ -H) Richtung gezeigt. Da sowohl die Bänder der Minoritätselektronen als auch die der

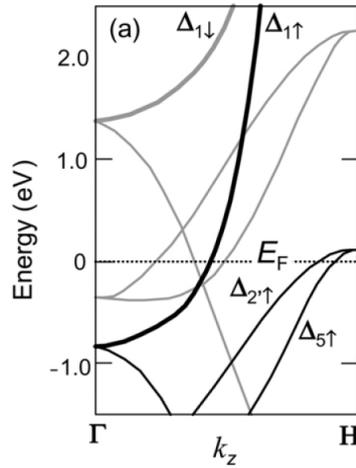


Abbildung 3.2: Bandstruktur einer Fe bcc Struktur in der [001] (Γ -H) Richtung

Majoritätselektronen Zustände an der Fermikante E_F haben, ist die gesamte Spinpolarisation von Fe klein. Man sieht allerdings, dass das Δ_1 Band (spd hybridisierte Zustände) für die Majoritätselektronen an der Fermikante liegt, das für die Minoritätselektronen allerdings energetisch höher ist. Aus diesem Grund ist das Δ_1 Band vollständig spinpolarisiert [13].

Dies ist nicht nur in bcc Fe (0 0 1) der Fall, sondern auch in vielen anderen ferromagnetischen Materialien und Legierungen, die auf Fe basieren, so z.B. auch in Fe-Co und CoFeB [13]. Das MgO dient in den Tunnелеlementen als Symmetriefilter, der bevorzugt Δ_1 Zustände transmittiert [14].

Bei antiparalleler Ausrichtung der Fe-Schichten allerdings finden die Majoritätselektronen im $\Delta_{1\uparrow}$ Zustand, die aus der einen Fe-Schicht tunneln, keine passenden Zustände in der anderen Fe-Schicht, da der $\Delta_{1\downarrow}$ Zustand der Minoritätselektronen energetisch höher liegt [14]. Folglich ist die Transmissionwahrscheinlichkeit bei paralleler Ausrichtung T_P höher als die bei antiparalleler Ausrichtung T_{AP} .

Der Magneto-Seebeck Effekt beschreibt die Abhängigkeit der Seebeck Koeffizienten von der Magnetisierungsrichtung der Ferromagneten. Der Magneto-Seebeck Koeffizient wird damit definiert, als:

$$S_{MS} = \frac{S_P - S_{AP}}{\min(S_P, S_{AP})} \quad (3.2)$$

An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, dass magnetoresistive Effekte, der Spin-Seebeck-Effekt und der Magneto-Seebeck Effekt zwar ähnliche Eigenschaften haben, es sich hier aber um ganz unterschiedliche Effekte mit unterschiedlichen Ursachen handelt. Aus diesem Grund ist es auch nicht möglich Relationen zwischen den Effekten zu finden und einen aus einem anderen abzuleiten. Die Transport

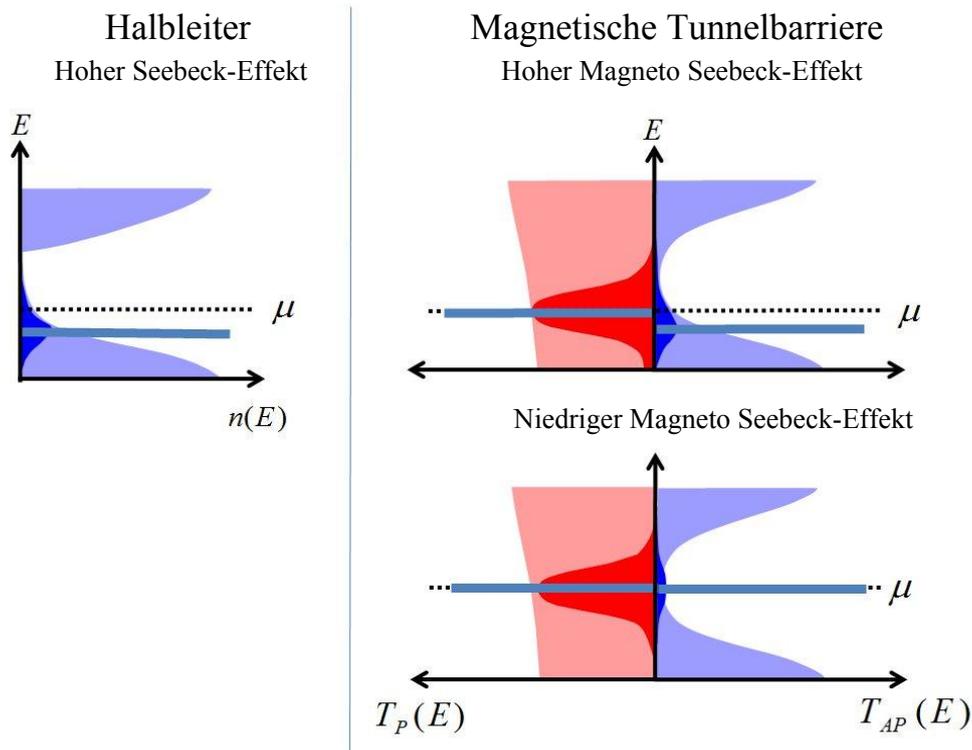


Abbildung 3.3: Links ist die Transmissionsfunktion für einen Halbleiter gezeigt. Es ist bekannt, dass Halbleiter im Allgemeinen hohe Seebeck-Effekte zeigen. Rechts sind zwei unterschiedliche Fälle gezeigt, die in Tunnelkontakten auftreten können. Die dicke durchgezogene Linie markiert das geometrische Zentrum der Transmissionsfunktion und entspricht $S_{P,AP}$. In dunklerer Farbe ist die Funktion $T(E)(-\partial_E f(E, \mu, T))$ dargestellt. Im ersten Fall sind die Energie Asymmetrien in den beiden magnetischen Konfigurationen unterschiedlich und das elektrochemische Potentials μ hat für die beiden magnetischen Konfigurationen verschiedene Werte. Hier sind das Magneto-Seebeck Verhältnis und der TMR-Effekt hoch. Im zweiten Fall verschwindet das Magneto Seebeck Verhältnis S_{MS} , der TMR-Effekt ist aber trotzdem hoch.

Koeffizienten zur Beschreibung der unterschiedlichen Effekte werden zwar alle aus der Transmissionsfunktion $T(E)$ der Tunnелеlemente bestimmt, die Integrale haben aber alle andere Werte [1].

Die Leitfähigkeit g ist gegeben durch:

$$g = e^2 \int T(E)(-\partial_E f(E, \mu, T))dE$$

$T(E)$ ist die Transmissionsfunktion und $f(E, \mu, T)$ die Fermi-Verteilungsfunktion bei gegebener Energie E , chemischem Potential μ und Temperatur T .

Nach [1] hängen die Seebeck Koeffizienten $S_{P,AP}$ folgendermaßen mit den Transmissionswahrscheinlichkeiten $T_{P,AP}$ zusammen:

$$S_{P,AP} = - \frac{\int T_{P,AP}(E)(E - \mu)(-\partial_E f(E, \mu, T))dE}{eT \int T_{P,AP}(E)(-\partial_E f(E, \mu, T))dE} \quad (3.3)$$

Man kann sagen, der Seebeck-Koeffizient ist die geometrische Mitte der Funktion $T(E)(-\partial_E f(E, \mu, T))$ [1]. Abbildung 3.3 zeigt diesen Sachverhalt für zwei unterschiedliche Fälle. Die geometrische Mitte für parallele und antiparallel Ausrichtung (S_P und S_{AP}) ist durch die dicke durchgezogene Linie gekennzeichnet. Rechts oben ist eine Transmissionsfunktion gezeigt, die sowohl verschiedene Energie Asymmetrien in den beiden magnetischen Konfigurationen hat, als auch verschiedene Positionen des elektrochemischen Potentials μ für die beiden magnetischen Konfigurationen. Hier ergeben sich sowohl ein hohes Magneto-Seebeck Verhältnis, als auch ein hoher TMR-Effekt. Unten ist ein Fall dargestellt, bei dem das Magneto Seebeck Verhältnis S_{MS} aufgrund der Verschiebung des Fermi Niveaus verschwindet, der TMR-Effekt aber trotzdem hoch ist. Das heißt, dass auch Fälle existieren bei denen es keinen Magneto-Seebeck Effekt gibt, aber einen hohen TMR-Effekt und umgekehrt.

Tunnelbarrieren können also so hergestellt werden, dass sie einen hohen Magneto-Seebeck Effekt zeigen. Zunächst werden durch Temperaturdifferenz induzierte Spannungen in solchen Tunnelbarrieren untersucht, die auch einen hohen TMR-Effekt zeigen. In dieser Arbeit wurden Tunnelbarriere aus CoFeB/MgO/CoFeB untersucht.

In Abbildung 3.4 sind die berechneten Seebeck Koeffizienten und der prozentuale Magneto-Seebeck Effekt S_{MS} in Abhängigkeit der Temperatur aufgetragen [1]. Die

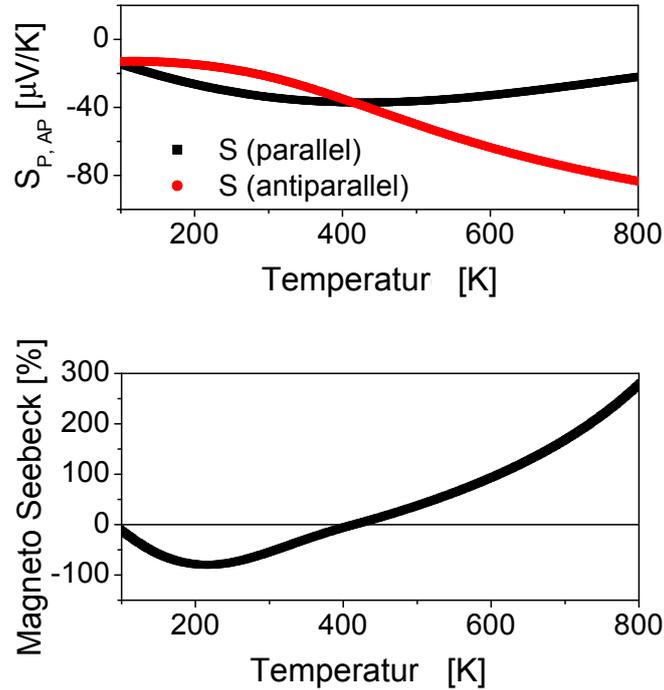


Abbildung 3.4: Berechnung der Seebeck Koeffizienten in Abhängigkeit der Temperatur für eine Tunnelbarriere aus FeCo/MgO/FeCo mit jeweils 20 Monolagen FeCo und 10 Monolagen MgO als Barriere. Die FeCo Zusammensetzung liegt so vor, dass an der Schnittstelle zur MgO Barriere Co:Fe zu den Anteilen 1:1 zu finden ist. Oben sind die Seebeck-Koeffizienten für parallele und antiparallele Ausrichtung gezeigt. Unten der prozentuale Magneto-Seebeck Effekt S_{MS} .

Berechnungen wurden für eine Tunnelbarriere aus FeCo/MgO/FeCo mit jeweils 20 Monolagen FeCo und 10 Monolagen MgO als Barriere gemacht. Auch wenn S_P und S_{AP} keinen Vorzeichenwechsel zeigen, so wechselt S_{MS} das Vorzeichen bei $S_P = S_{AP}$ und 400K.

In Tabelle 3.1 sind die Berechnung der Seebeck Koeffizienten für parallele S_P und antiparallele S_{AP} Konfiguration für verschiedene Kompositionen der Eisen Kobalt Elektroden bei einer Temperatur von 300 K gezeigt (aus [2]). In dieser Arbeit werden Tunnelelemente mit der Zusammensetzung $\text{Co}_{0,5}\text{Fe}_{0,5}$ untersucht.

Die Berechnungen zeigen die sensitive Abhängigkeit des Magneto Seebeck Effekts von der Komposition der Elektroden. Den berechneten Werten zur Folge kann die Komposition der Elektroden direkt an der Schnittstelle zur MgO Barriere nicht nur den betragsmäßigen Wert der Seebeck Koeffizienten verändern, sondern auch

	S_P [$\mu\text{V}/\text{K}$]	S_{AP} [$\mu\text{V}/\text{K}$]	$S_P - S_{AP}$ [$\mu\text{V}/\text{K}$]	S_{MS} [%]
CoFe	-19,7	-32,4	12,7	64,1
FeCo	45,9	-50,0	95,9	209,0
CFFC	9,4	-44,6	54,0	573,2
$\text{Co}_{0,5}\text{Fe}_{0,5}$	-34,0	-21,9	-12,1	-55,2

Tabelle 3.1: Berechnung der Seebeck Koeffizienten für parallele S_P und antiparallele S_{AP} Konfiguration für verschiedene Kompositionen der Eisen Kobalt Elektroden bei einer Temperatur von 300 K aus [2]. Die Berechnungen zeigen die sensitive Abhängigkeit des Magneto Seebeck Effekts von der Komposition der Elektroden. Die Berechnungen wurden für 20 Monolagen FeCo und 10 Monolagen MgO als Barriere gemacht. Die Abkürzung CoFe bedeutet, dass Co direkt an der Schnittstelle zur Tunnelbarriere vorliegt. Die Zusammensetzung FeCo liegt hingegen vor, wenn Fe direkt an der Schnittstelle zur Tunnelbarriere zu finden ist. Die Abkürzung CFFC bedeutet, dass Fe an einer Schnittstelle zur Barriere vorliegt und Co an der anderen. Die Zusammensetzung $\text{Co}_{0,5}\text{Fe}_{0,5}$ liegt vor, wenn die Anteile Co:Fe an der Schnittstelle 1:1 zu finden sind.

in einem Vorzeichenwechsel resultieren.

4 Cmsol Simulationen

In diesem Abschnitt wird beschrieben, wie die Erwärmung der Probe mit Hilfe des zeitabhängigen Heat Transfer Modus von Cmsol Multiphysics 4.2 simuliert wird. Es wird das axialsymmetrische Modell genutzt, da dieses ohne Informationsverlust weniger Rechenzeit benötigt.

4.1 Modell und Mesh

4.1.1 Modell

Als Raumdimension wird ein auf zwei Dimensionen reduziertes axialsymmetrisches Modell gewählt (Abszisse: r-Achse; Ordinate: z-Achse). Die zylinderförmigen Schichten des Pseudo Spin Valves und seiner Isolierung werden hier auf Rechtecke reduziert. Durch Rotation um die z-Achse bei $r = 0$ kann das Modell dann vollständig reproduziert werden. Es wurden zwei unterschiedliche Modelle für die Proben vz101007b (siehe Tabelle 4.1) und mw110509b (siehe Tabelle 4.2) erstellt. Der Querschnitt des Modells für die Probe vz101007b ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

Jeder Domäne wird ein Material zugeordnet (siehe Abb. 4.1), das aus dem *Material Browser* entnommen werden kann. Sind die benötigten Materialien nicht zu finden, so können sie mit den Größen ihrer thermischen Leitfähigkeit k , ihrer Dichte ρ und ihrer Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p in der Materialbibliothek *User-Defined Library* gespeichert werden, um dann auch später darauf zugreifen zu können. Die für die Simulation genutzten Werte sind Tabelle 4.3 zu entnehmen.

4.1.2 Mesh

Bei Cmsol existieren für zweidimensionale Modelle zwei unterschiedliche Arten das benötigte Mesh aufzubauen: *triangular* und *quadrilateral*. Während der Simulation

Position (r;z) [nm]	Höhe der Domäne [nm]	Breite der Domäne [nm]	Material
Tunnelement			
(0;-100)	100	500	Au
(0;-105)	5	500	Cr
(0;-132)	27	500	Au
(0;-135)	3	500	Ru
(0;-140)	5	500	Ta
(0;-145,4)	5,4	500	CoFeB
(0;-147,5)	2,1	500	MgO
(0;-150)	2,5	1500	CoFeB
(0;-155)	5	1500	Ta
(0;-655)	500	1500	SiO ₂
Isolierung			
(500;-42,5)	42,5	1000	Au
(500;-47,5)	5	1000	Cr
(500;-147,5)	100	1000	SiO ₂

Tabelle 4.1: Positionen der Domänen für die Probe vz101007b. Position (r;z) bezeichnet den untersten, linken Punkt der Domäne. Die Domänen reichen in den negativen Bereich der z-Achse, da der Laser an der Position $z = 0$ heizt.

Position (r;z) [nm]	Höhe der Domäne [nm]	Breite der Domäne [nm]	Material
Tunnelement			
(0;-20)	20	500	Au
(0;-25)	5	500	Cr
(0;-52)	27	500	Au
(0;-55)	3	500	Ru
(0;-60)	5	500	Ta
(0;-65,4)	5,4	500	CoFeB
(0;-67,5)	2,1	500	MgO
(0;-70)	2,5	1500	CoFeB
(0;-76,6)	6,6	1500	Ta
(0;-576,6)	500	1500	SiO ₂
Isolierung			
(500;-32,5)	20	1000	Au
(500;-37,5)	5	1000	Cr
(500;-67,5)	30	1000	SiO ₂

Tabelle 4.2: Positionen der Domänen für die Probe mw110509b. Position (r;z) bezeichnet den untersten, linken Punkt der Domäne. Die Domänen reichen in den negativen Bereich der z-Achse, da der Laser an der Position $z = 0$ heizt.

Material	Leitfähigkeit k [W/m·K]	Dichte ρ [kg/m ³]	Wärmekapazität c_p [J/kg·K]
Gold (Au)	320	19320	128
Chrom (Cr)	94	7150	449
Ruthenium (Ru)	117	12370	238
Tantal (Ta)	57	16650	140
Magnesiumoxid (MgO)	4	3580	935
Cobalt-Eisen-Bohr (Co ₂₀ Fe ₆₀ B ₂₀)	86,67	8216	439,66
Siliziumoxid (SiO ₂)	1,38	2200	1052

Tabelle 4.3: Materialien mit ihren Größen der thermischen Leitfähigkeit k , ihrer Dichte ρ und ihrer Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p .

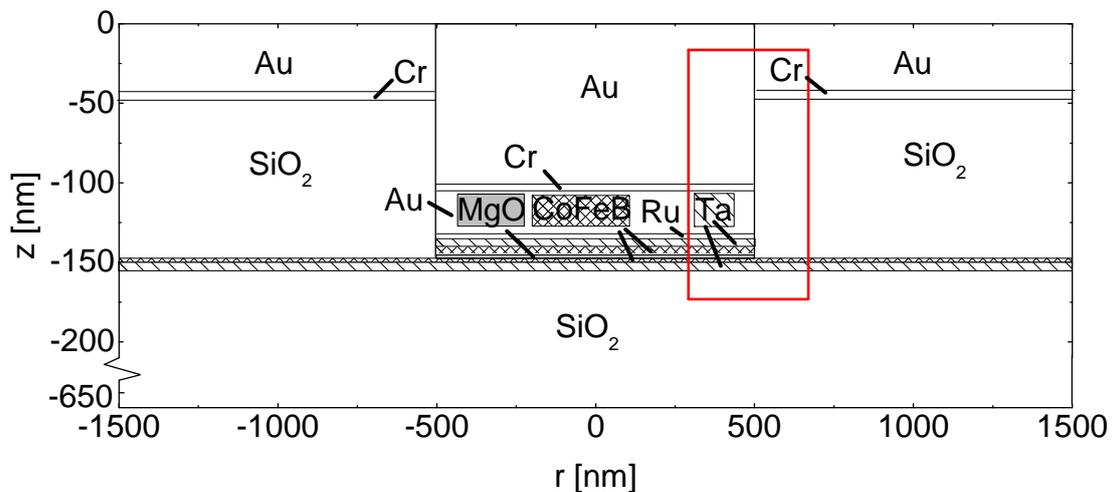


Abbildung 4.1: Modell der Probe vz101007b mit Materialien. Die äußeren Schichten stellen die Isolierung dar. Der markierte Ausschnitt ist in Abbildung 4.2 erneut mit Mesh dargestellt.

zeigte sich, dass es für den Solver in diesem Modell leichter ist ein quadrilaterales Mesh zu lösen, als ein triangulares. Ein quadrilaterales Mesh ist gut zur Lösung eines Modells geeignet, das zylindrische Symmetrie aufweist, da quadrilaterale Mesh Elemente besser symmetrisch angeordnet werden können.¹ Es ist allerdings sehr viel schwieriger ein quadrilaterales Mesh aufzubauen, da es weniger Möglichkeiten gibt die Seiten der Mesh Elemente (*mesh edges*) und deren Ecken (*mesh vertices*) zu kombinieren, um auch Formen auszufüllen, die nicht den Formen der Mesh Elemente gleichen. Auftretende Fehler sind, dass manche Hohlräume nicht ausgefüllt werden können oder Mesh Elemente erzeugt werden, die nicht der Struktur entsprechen.

Vor allem an den Grenzschichten müssen die Mesh Elemente besonders klein sein, da die Lösung sonst nicht konvergiert. Innerhalb der einzelnen Schichten können sie größer gewählt werden, um die Berechnungszeit zu verkürzen. Die Mesh Elemente verteilen die *Basisfunktionen* (siehe 2.1.1) örtlich. Aus diesem Grund ist es wichtig, dass jene trotzdem nicht zu unregelmäßig konstruiert werden, da die Lösung

¹Ivar Kjelberg - Moderator of Comsol Discussion Forum

¹(<http://www.comsol.nl/community/forums/general/thread/9224/>)

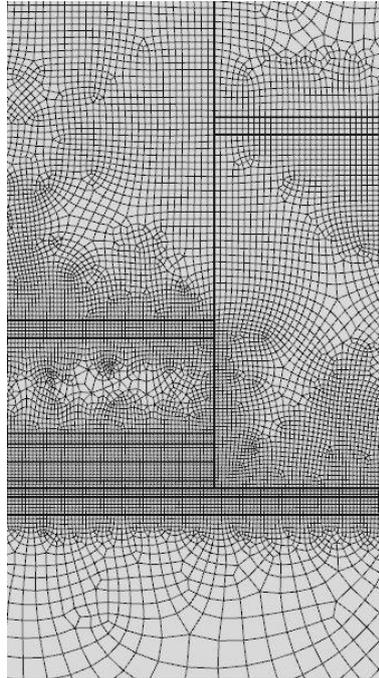


Abbildung 4.2: Mesh: Ausschnitt aus Abb. 4.1. An den Grenzschichten sind die Mesh Elemente besonders klein. Innerhalb der einzelnen Schichten sind sie größer gewählt.

sonst ungenau wird. Das Mesh des in Abbildung 4.1 markierten Ausschnitts ist in Abbildung 4.2 dargestellt.

4.2 Modus: Heat Transfer in Solids

Für die Untersuchung der Probe wird der Modus Heat Transfer in Solids genutzt. In diesem Modus wird die Differentialgleichung

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -(\nabla \cdot \vec{q}) + Q$$

gelöst, wobei ρ die Dichte des durchdrungenen Stoffes, c_p die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck und \vec{q} der Wärmefluss innerhalb des Stoffes ist. Q gibt die externe Wärmequelle an. In diesem Fall ist dies der Laserpuls (siehe 4.3.2). Wie schon in Kapitel 2.1.2 beschrieben, wird die Wärmeleitfähigkeit durch das Fouriersche Gesetz beschrieben. Dieses geht davon aus, dass q proportional zum

Temperaturgradienten ist:

$$q_i = -k \frac{\partial T}{\partial x_i}$$
$$\Rightarrow \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q$$

Die benötigten Werte für k , ρ und c_p werden hier aus dem Modell übertragen und verwendet.

Das Modell ist von außen thermisch isoliert, hier gilt:

$$-\vec{n} \cdot (-k \nabla T) = 0$$

Der Boden der Probe hat konstant Raumtemperatur $T_B = 293,15\text{K}$. Zu Beginn der Simulation haben alle Domänen Raumtemperatur $T_0 = 293,15\text{K}$.

4.3 Realisierung der äußeren Wärmequelle

4.3.1 Die Dauerstrich Laserdiode

Die Dauerstrich Laserdiode wurde als eine Wärmequelle an der Oberfläche der Probe simuliert (*Boundary Heat Source*), sodass die Eindringtiefe des Laserlichts in der Modellierung der Quelle nicht beachtet werden muss. Für die absorbierte Leistung pro Fläche gilt:

$$Q = \frac{1}{3} \cdot \frac{P}{\pi \cdot (w_0/2)^2}$$

Es wurde gemessen, dass etwa ein Drittel der Laserleistung absorbiert wird. $w_0 = 12\mu\text{m}$ ist der minimale Strahldurchmesser.

4.3.2 Der gepulsten Lasers

Mit einer Frequenz von 250kHz emittiert der benutzte Titan:Saphir-Laser für diese Rechnung beispielhaft eine Gesamtleistung von $P_{tot} = 50\text{mW}$, sodass pro Puls eine Energie von $E_{Puls} = 0,2\mu\text{J}$ deponiert wird.

Der Laserpuls wird zeitlich durch die BREIT-WIGNER Verteilung modelliert. Für diese gilt:

$$I(t) = \frac{\Gamma^2}{2\pi[(t - t_0)^2 + \Gamma^2/4]}$$

$\Gamma = 60\text{fs}$ ist die Halbwertsbreite. t_0 ist der Wert der Abzisse beim Intensitätsmaximum. Der räumliche Intensitätsverlauf wird durch eine Gaußfunktion modelliert. Für diesen gilt lateral genau auf der Oberfläche, d.h. für $z = 0$ [15]:

$$I(r) = \frac{2P}{\pi(w_0/2)^2} \exp\left(-\frac{2r^2}{(w_0/2)^2}\right)$$

w_0 ist der minimale Strahldurchmesser. Durch Messungen ergab sich ein Wert von $w_0 \approx 15\mu\text{m}$. P ist die Leistung eines Laserpulses, für die gilt: $P = E_{\text{Puls}}/\Gamma = 0,2\mu\text{J}/60\text{fs} = 3333\text{MW}$.

Der Laserpuls wird als *Heat Source* modelliert, sodass die Eindringtiefe des Laserstrahls in das Material beachtet werden muss. Die Eindringtiefe wurde mit $d_a = 20\text{nm}$ angesetzt. Der Abfall der Intensität in z -Richtung ist exponentiell:

$$I(z) = \frac{1}{d_a} \exp(z/d_a)$$

Insgesamt ergibt sich also für die Modellierung des Laserpulses:

$$Q(t, r, z) = \frac{2P}{\pi(w_0/2)^2 d_a} \exp\left(-\frac{2r^2}{(w_0/2)^2}\right) \exp(z/d_a) \frac{\Gamma^2}{2\pi[(t - t_0)^2 + \Gamma^2/4]}$$

Gold reflektiert infrarotes Licht sehr gut (99% bei einer Wellenlänge von 800nm in Luft und bei Raumtemperatur [16]). Der Titan:Saphir-Laser emittiert um ein Maximum von 800nm. Es wurde allerdings gemessen, dass etwa zwei Drittel der Laserleistung von der Probe reflektiert werden. Wird mit diesen Werten simuliert, so ergeben sich unrealistische Maximaltemperaturen von mehr als 5000K. Leider kann nicht festgestellt werden, wieviel der Laserleistung durch die Probe transmittiert wird. Da es sich bei dieser Probe um eine dünne Goldschicht handelt, kann davon ausgegangen werden, dass etwas mehr Leistung als nur 2% absorbiert wird. Die Simulationen wurden mit einem geschätzten Wert von $Q_{\text{abs}} \approx 0,12 \cdot Q$ durchgeführt. Hierbei muss aber beachtet werden, dass die Simulationsergebnisse lediglich qualitativ analysiert werden dürfen.

4.4 Zeitabhängige Solver Einstellungen: BDF

In Abschnitt *Time-Dependent Solver* kann der gewünschte Solver gewählt und seine Eigenschaften eingestellt werden. Für die Simulation des Laserpulses werden, wie in Abschnitt 2.3 schon beschrieben, Backward Differential Formulas (BDF) mit maximaler Ordnung 2 und minimaler Ordnung 1 gewählt.

Speziell für diese Simulation sind aber die gewählten Zeitschritte sehr wichtig, da der Puls nur eine Halbwertsbreite von 60fs hat, aber mit einer Repitionsrate von $4\mu\text{s}$ pulst. Die Berechnungsschritte müssen also wegen des hohen Temperaturgradienten während des Pulses, sowie kurz davor und kurz dahinter, sehr klein gewählt werden gegenüber den Berechnungsschritten zwischen den Pulsen.

Aus diesem Grund muss unter dem Punkt *Steps taken by solver* die Einstellung von *free* auf *strict* gesetzt werden, damit der Solver die vorgegebenen Schritte wählt. Diese werden gleich im ersten Punkt bei *Study Settings* eingestellt. Während des Laserpulses wurden Zeitschritte von 5fs gewählt. Zwischen den Pulsen wurden Zeitschritte von 0,1 μs gewählt. Da diese gewählten Zeitschritte sehr weit auseinander liegen, müssen sie einander langsam angeglichen werden, so dass weitere Bandbreiten an Zeitschritten eingefügt werden.

5 Experimentelle Vorgehensweise und Auswertung

Für diese Bachelorarbeit wurden zwei unterschiedliche Experimente durchgeführt. Zum Ersten wurde der Magneto-Seebeck Effekt in Abhängigkeit der Fluenz untersucht und zum Zweiten die Reflektivität der Probe gemessen. Aus der Reflektivität kann die Oberflächentemperatur des Pseudo Spin Valves berechnet werden, um daraufhin mit Hilfe der ermittelten Oberflächentemperatur die Simulation mit Comsol zu eichen.

5.1 Versuchsaufbau

Der Versuchsaufbau besteht aus zwei unterschiedlichen Teilen, die in Abbildung 5.1 rot (Messung der Reflektivität) und blau (Messung der fluenzabhängigen Magneto-Seebeck Spannung) dargestellt sind.

Für die fluenzabhängige Messung wird lediglich ein Strahl benötigt, der die Probe aufheizt. An der Probe wird er reflektiert und gelangt dann in eine Photodiode und eine Kamera.

Für den Reflektivitätsaufbau wird der Strahl kurz vor dem Chopper an Position 2 in einen Pump- und einen Abfragestrahl geteilt. Der Pumpstrahl gelangt über eine verfahrbare Verzögerungsplattform auf die Probe, wird von ihr reflektiert und geht so in die Kamera. Der Abfragestrahl hingegen gelangt durch ein $\lambda/2$ Plättchen und anschließend durch einen Polarisator auf die Probe, sodass seine Intensität variiert werden kann. Vor und nach der Reflektion des Strahls an der Probe wird die Strahlintensität mit Hilfe von Photodioden bestimmt.

Die im Experiment untersuchte Probe ist ein Pseudo Spin Valve, der neben den beiden ferromagnetischen CoFeB-Schichten und dem Isolator MgO noch aus weiteren

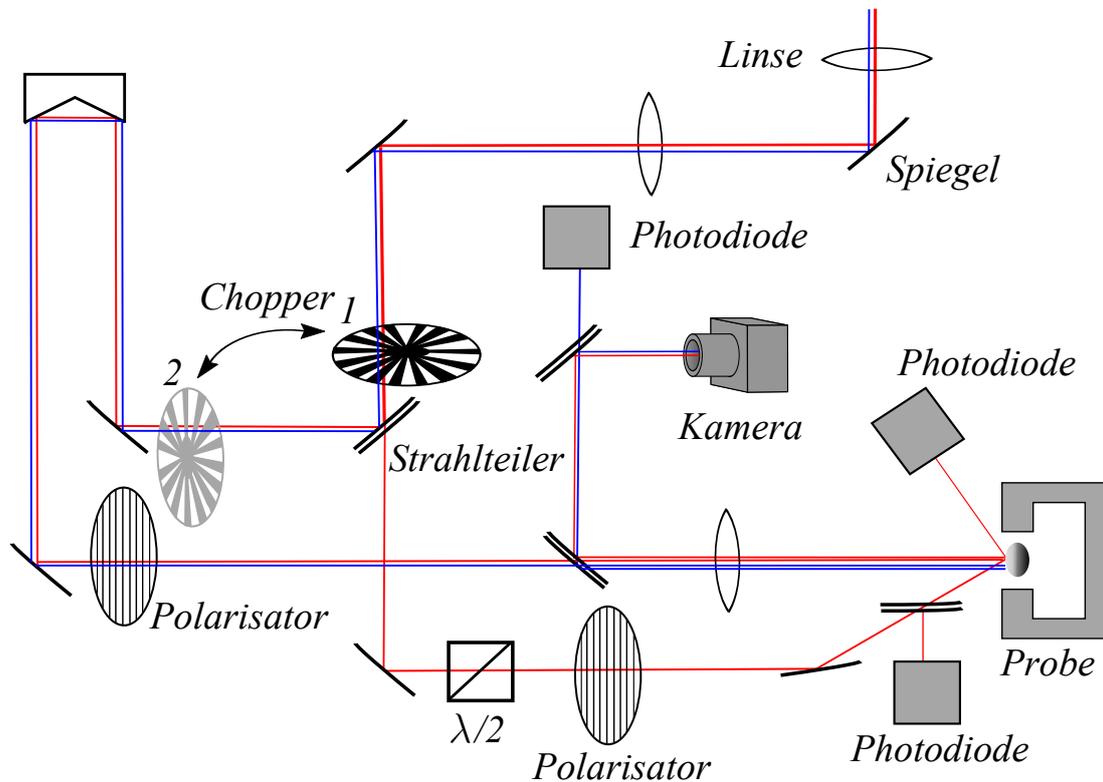


Abbildung 5.1: Versuchsaufbau

Materialien besteht (siehe Abbildung 4.1). Um unerwünschte Seebeck Spannungen durch andere magnetische Materialien zu vermeiden, ist der Pseudo Spin Valve von einem Ruthenium-Tantal Puffer umschlossen [2]. Das Ruthenium verhindert außerdem Oxidation der Struktur beim aus- und einbauen. Die äußere Gold Schicht dient als Kontaktierungspunkt.

5.2 Versuchsdurchführung

5.2.1 Messung der fluenzabhängigen Seebeck-Spannung

Für die fluenzabhängige Messung der Seebeck-Spannung trifft ein Strahl auf die Probe und heizt sie auf. Um die Probe wird ein Magnetfeld angelegt, das in Schritten von 0,2 mT von -40 mT auf 40 mT steigt und dann wieder auf das Ausgangs-

feld zurückfällt. Abhängig von der Temperatur der Probe soll sich die Spannung verändern. Damit erkennbar ist, welcher Teil der Probe aufgeheizt wird, wird der reflektierte Strahl und damit auch die Probe mit der Kamera sichtbar gemacht. Um ermitteln zu können, ob die Spannungsänderung des Probensignals positiv oder negativ ist, wird der reflektierte Strahl von einer Photodiode eingefangen und mit einem Oszilloskop analysiert.

5.2.2 Reflektivitätsmessung

Die Messung der Reflektivität gelingt mit einem Pump- und einem Abfragestrahl. Der Pumpimpuls wird genutzt um die Probe aufzuwärmen. Mit Hilfe einer verfahrenbaren Verzögerungsplattform kann die Zeitverzögerung des Pumpimpulses relativ zum Abfrageimpuls variiert werden, um zeitaufgelöste Messungen zu ermöglichen. Das Signal der Referenzdiode, die die Intensität vor dem Einfall des Strahls auf die Probe misst und das Signal der Diode, die das reflektierte Signal misst, müssen aufeinander abgestimmt sein. Über die Differenz beider Dioden während der Messung kann die relative Reflektivität der Probe ermittelt werden. Die Reflektivität der Probe wird sich dann in Abhängigkeit der Temperatur ändern.

5.3 Versuchsauswertung: Bestimmung der Oberflächentemperatur

In diesem Abschnitt soll beispielhaft gezeigt werden, wie die Oberflächentemperatur mit Hilfe der Messung der Reflektivität ermittelt werden kann. Die Bestimmung der Oberflächentemperatur ist wichtig, um die Simulationsergebnisse zu eichen. Aus diesem Grund wird hier kurz auf die Theorie des Zwei-Temperatur-Modells eingegangen. In Kapitel 6.2 wird dann gezeigt, wie aus dem Verlauf der Reflektivität die charakteristischen Größen für die Relaxation des Systems ermittelt werden können. Da der gemessene Reflektivitätsverlauf für die Goldschicht ein untypisches Verhalten zeigt, wird die Berechnung beispielhaft an der Reflektivitätsmessung für Siliziumoxid gezeigt.

5.3.1 Das Zwei-Temperatur-Modell

Das Zwei-Temperatur-Modell dient zur Beschreibung der Temperatur in einem Festkörper nach Anregung durch einen sehr kurzen Lichtpuls im Bereich von Pico- zu Femtosekunden [18]. In diesem Modell werden dem Elektronen- und dem Gittersystem zwei unterschiedliche Temperaturen zugewiesen. Durch Phonon-Elektron-Wechselwirkung [19] wird die Energie an das Gittersystem übertragen.

Das Modell kann durch folgendes Differentialgleichungssystem beschrieben werden (siehe z.B. [20]):

$$\begin{aligned} c_e \cdot \frac{\partial T_e}{\partial t} &= \Delta(\kappa_e \Delta T_e) + g_{ep}(T_p - T_e) + P(t, r) \\ c_p \cdot \frac{\partial T_p}{\partial t} &= \Delta(\kappa_l \Delta T_l) - g_{ep}(T_p - T_e) \end{aligned}$$

g_{ep} ist die Phonon-Elektronen Kopplungskonstante, c_e und c_p sind die spezifischen Wärmekapazitäten und κ_e und κ_p die Wärmeleitfähigkeiten, jeweils für das Phonon- und das Elektronensystem.

Der Laserpuls $P(t,r)$ wird durch eine Delta-Funktion genähert. Zur Lösung des Gleichungssystems wird angenommen, dass die spezifische Wärme des Gitters so groß ist, dass gilt: $\partial T_p / \partial t \approx 0$. Das System reduziert sich dann auf die Variable $\Delta T = T_e - T_p$. Durch einen Exponentialansatz folgt [20]:

$$\begin{aligned} T_e(t) &= T_e(-\infty) + \frac{\Delta T_e}{c_e + c_p} (c_e + c_p e^{-t/\tau_e}) \\ T_p(t) &= T_e(-\infty) + \frac{T_e(0)}{c_e + c_p} (c_e - c_p e^{-t/\tau_e}) \end{aligned}$$

Wobei die Relaxationszeit durch, $\tau_e = -g_{ep}(c_e + c_p)/(c_e c_p)$, gegeben ist. $T_e(-\infty)$ gibt die Gleichgewichtstemperatur an, $T_e(0)$ die Abfangtemperatur und ΔT_e beschreibt die Differenz von Maximaltemperatur zur Gleichgewichtstemperatur.

Zur Bestimmung der Relaxationszeit aus den Reflektivitätsmessung wird angenommen, dass sich der Reflexionskoeffizient der Probe linear mit der Temperatur ändert. Allerdings muss hier darauf hingewiesen werden, dass diese Annahme nur für kleine Laserfluenzen bedingt gilt [19].

Da Silizium ein Halbleiter ist, gibt es keinen direkten Übergang vom Leitungsband

in das Valenzband, sodass für Silizium zwei überlagerte Abklingprozesse mit zwei unterschiedlichen Relaxationszeiten betrachtet werden müssen. Der schnellere Prozess entspricht der Diffusionszeit von Ladungsträgern aus dem Anregungsgebiet, der langsamere ergibt sich aus der Relaxation über die Bandlücke [21].

In Kapitel 6.2 wird die Reflektivitätsmessung ausgewertet und die zwei unterschiedlichen Relaxationszeiten werden berechnet.

6 Ergebnisse

6.1 Simulationsergebnisse

6.1.1 Stationäre Comsol-Simulation

Der Temperaturverlauf innerhalb des Tunnелеlements wurde für verschiedene Pumpfluenszen mittels Comsol im Gleichgewichtszustand simuliert und in Abbildung 6.1 beispielhaft für eine Pumpfluenszen von 40mW aufgetragen.

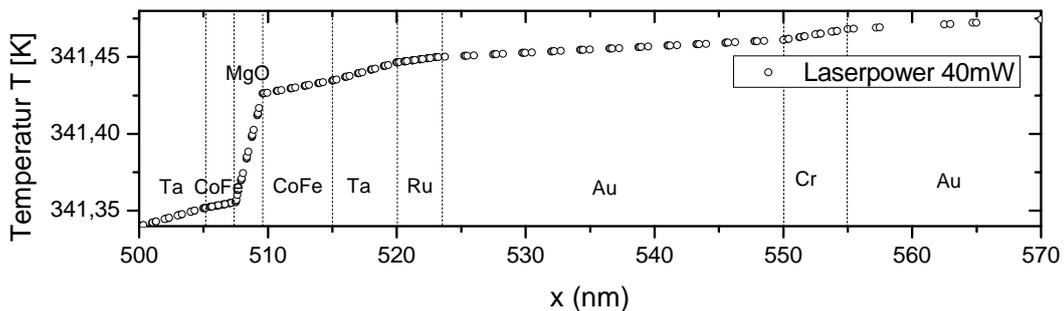


Abbildung 6.1: Temperaturverlauf durch das Tunnелеlement bei einer Pumpleistung von 40mW nach Einstellen des Gleichgewichtszustandes. Die größte Temperaturdifferenz erkennt man innerhalb der MgO Schicht, aber auch in den anderen Schichten sind deutlich Temperaturunterschiede zu erkennen.

6.1.2 Zeitabhängige Comsol-Simulation

Zunächst wurde der Temperaturverlauf innerhalb der Probe für nur einen Laserpuls simuliert. Zur Untersuchung des Magneto-Seebeck Effekts sind die Temperaturen an der Oberfläche, sowie die Temperaturdifferenz innerhalb der MgO-Schicht wichtig.

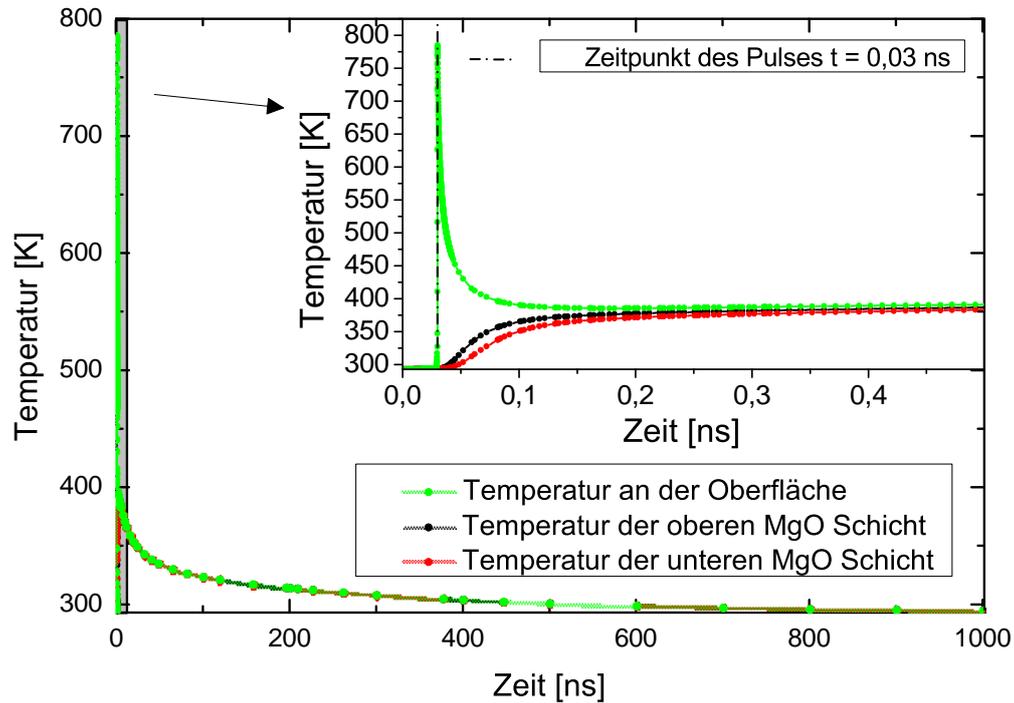


Abbildung 6.2: Temperaturverlauf an der Oberfläche, sowie oberhalb und unterhalb der MgO-Schicht von 0 bis 1 μ s und von 0 bis 0,5 ns.

In Abb. 6.2 sind der Temperaturverlauf an der Oberfläche, sowie der Verlauf oberhalb und unterhalb der MgO-Schicht aufgetragen. Zunächst sind die Verläufe für einen Bereich von 0 bis 1 μ s dargestellt, um zu sehen wie schnell die Temperatur abfällt. Des weiteren ist ein Ausschnitt aufgetragen, der von 0 bis 0,5 ns reicht. Hier ist gut zu erkennen, wie die Temperatur oberhalb und unterhalb der MgO-Schicht verläuft. Außerdem ist zu erkennen wie schnell sich der Temperaturgradient ausgleicht.

In Abb. 6.3 ist die Temperaturdifferenz innerhalb der MgO-Schicht aufgetragen. Zunächst ist der Verlauf für einen Bereich von 0 bis 10 ns dargestellt. Hier sieht man wie schnell sich der Temperaturgradient ausgleicht. Außerdem ist der Verlauf für einen kleineren Bereich von 0 bis 0,2 ns aufgetragen. Man sieht, dass die Temperaturdifferenz innerhalb der MgO-Schicht bei etwa 50 ps ein Maximum von fast 22K erreicht.

In Abb. 6.4 ist der Querschnitt der Probe mit seiner Temperaturverteilung nach etwa 10ns gezeigt. Innerhalb des Pseudo Spin Valves ist der Temperaturgradient

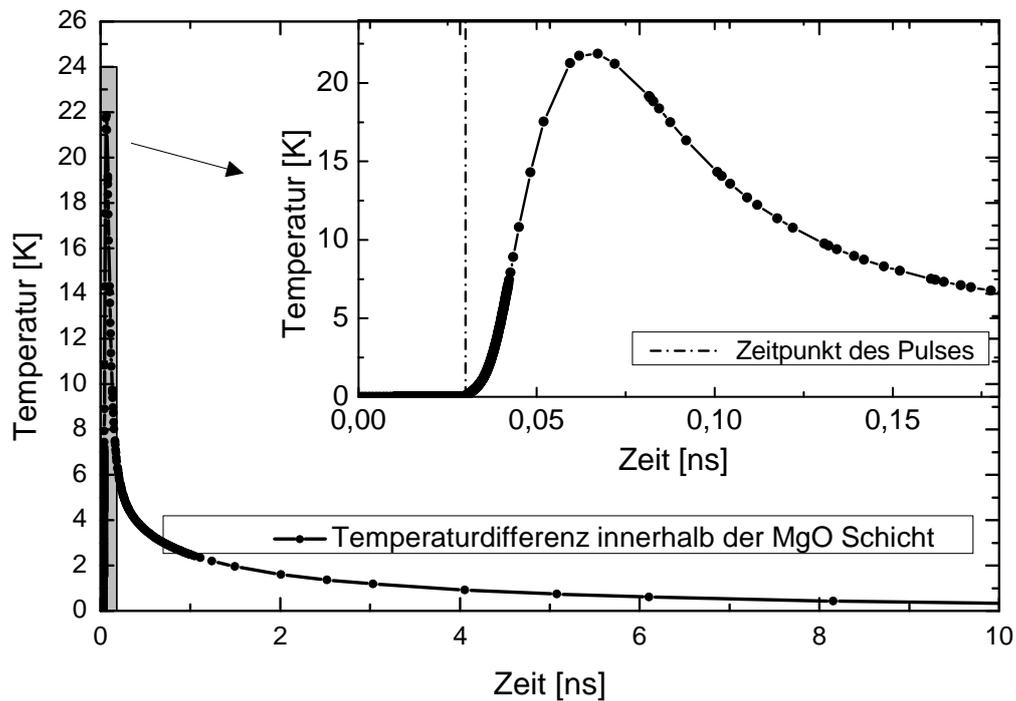


Abbildung 6.3: Auftragung der Temperaturdifferenz innerhalb der MgO-Schicht. Man sieht, dass die Temperaturdifferenz innerhalb der MgO-Schicht bei etwa 50 ps ein Maximum von fast 22K erreicht.

ausgeglichen. Es zeigt sich, dass die Isolierung durch das Siliziumoxids gut realisiert ist. Aufgrund seiner geringen Wärmeleitfähigkeit bleiben die Siliziumoxidschichten noch kalt im Gegensatz zum Rest der Probe, sodass sich die Gold- und Chromschicht aufheizt.

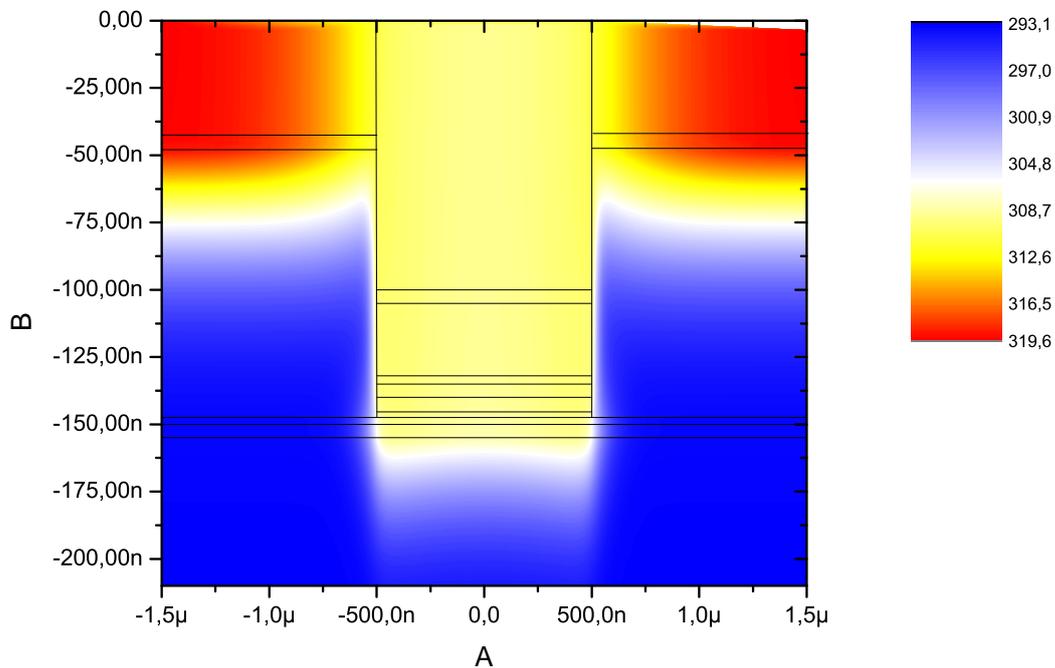


Abbildung 6.4: Temperaturverteilung nach 10ns. Innerhalb des Pseudo Spin Valves ist der Temperaturgradient ausgeglichen. Aufgrund der geringen Wärmeleitfähigkeit von Siliziumoxid bleiben diese Schichten noch kalt im Gegensatz zum Rest der Probe.

6.2 Ermittlung der Relaxationszeiten aus den Reflektivitätsmessungen

In Kapitel 5.3 wurde schon auf die Theorie des Zwei-Temperatur-Modells eingegangen. Nun sollen mit Hilfe des Verlaufs der Reflektivität die charakteristischen Größen für die Relaxation des Systems ermittelt werden. In Kapitel 5.3 wurde schon darauf hingewiesen, dass der gemessene Reflektivitätsverlauf für die Goldschicht ein untypisches Verhalten zeigt und somit die Berechnung beispielhaft an der Reflektivitätsmessung für Siliziumoxid gezeigt wird.

Zur Ermittlung der beiden Relaxationszeiten wurden fünf Reflektivitätsmessungen mit einer Eingangsleistung von 78mW gemacht, von denen eine Messung beispielhaft in Abbildung 6.5 aufgetragen ist. Die Werte wurden mit einer zweifach exponenti-

6.2 Ermittlung der Relaxationszeiten aus den Reflektivitätsmessungen

Nr. der Messung	τ_1 [10^{-12} s]	σ_{τ_1} [10^{-12} s]	τ_2 [10^{-12} s]	σ_{τ_2} [10^{-12} s]
1	25,64	1,01	201,54	8,63
2	12,39	0,23	115,02	1,54
3	3,63	0,09	51,55	0,81
4	4,11	0,17	53,33	1,39
5	6,93	0,23	64,96	2,00

Tabelle 6.1: Ermittelte Werte der Relaxationszeiten durch zweifach exponentielle Fitfunktion.

ellen Funktion angefitet. Die Werte für τ_1 und τ_2 , sowie deren jeweilige Fehler sind in Tabelle 6.1 angegeben. Für die jeweiligen gewichteten Mittelwerte ergibt sich:

$$\tau_1 = (5,08 \pm 0,07) \cdot 10^{-12} \text{ s}$$

$$\tau_2 = (62,11 \pm 0,46) \cdot 10^{-12} \text{ s}$$

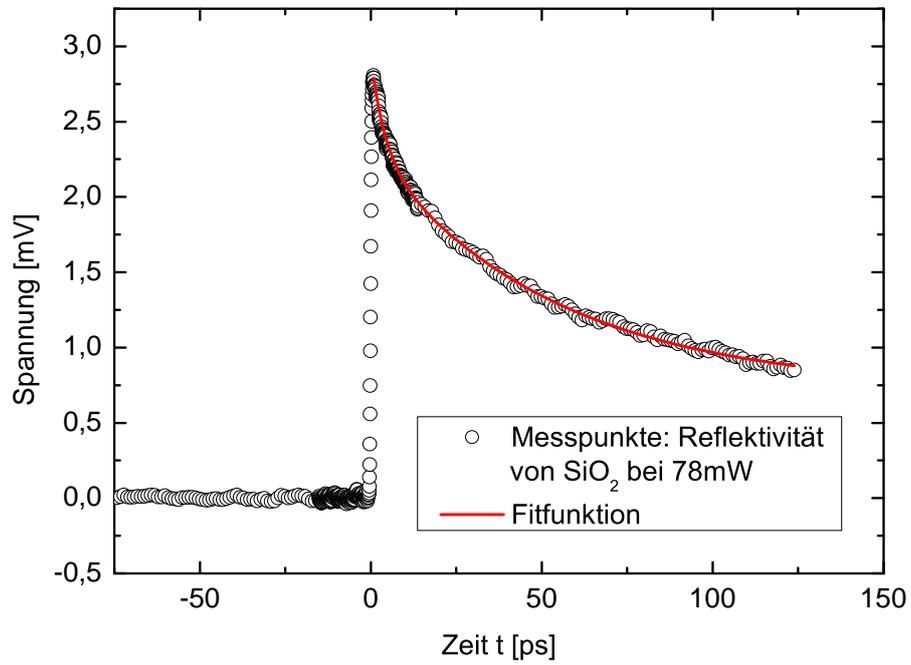


Abbildung 6.5: Aus den Reflektivitätsmessungen von SiO₂ können durch eine zweifach exponentielle Fitfunktion die Relaxationszeiten τ_1 und τ_2 bestimmt werden.

6.3 Messungen des Magneto-Seebeck Effekts

Die Temperaturdifferenz, die sich innerhalb der MgO-Schicht ausbildet, ist für die Temperaturabhängigkeit der Seebeck Koeffizienten verantwortlich. Es wurde mit zwei unterschiedliche Lasern gearbeitet: einer Dauerstrich-Laserdiode (cw-Laser)¹ und einem gepulsten Titan:Saphir-Laser (fs-Laser)².

Die durch den Magneto-Seebeck Effekt entstandenen Spannungen wurden in Abhängigkeit eines äußeren Magnetfeldes bei diesen Pumpleistungen für zwei unterschiedliche Proben (vz101007b und mw110509b) gemessen.

6.3.1 Messungen für die Probe vz101007b

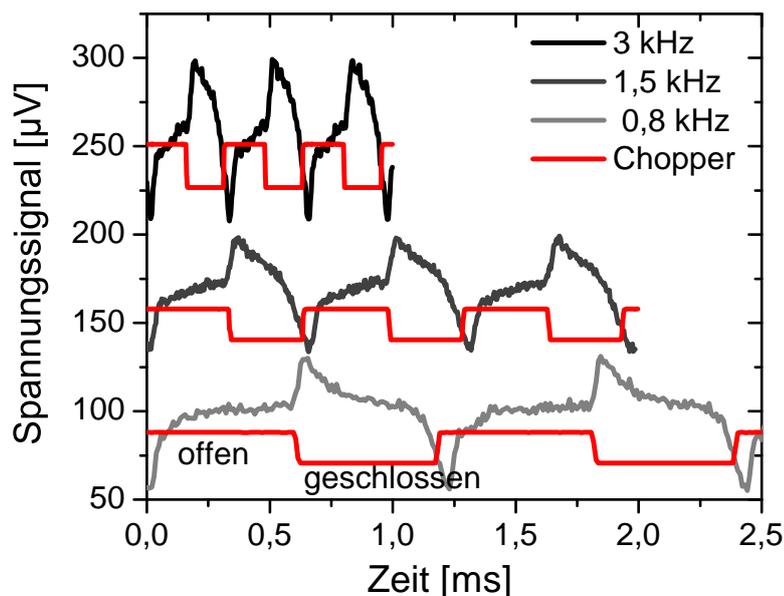


Abbildung 6.6: Das Spannungssignal der Probe bei unterschiedlichen Modulationsfrequenzen des Lock-In Verstärkers. Das Signal des Choppers zeigt an, ob er geschlossen ist oder offen.

In Abbildung 6.6 sind zunächst das Spannungssignal der Probe, sowie das Signal des Choppers für unterschiedliche Modulationsfrequenzen des Lock-In Verstärkers

¹bei Laserleistungen von 5mW, 10mW, 15mW, 20mW, 25mW, 30mW, 35mW und 40mW

²bei Laserleistungen von 10mW, 30mW, 90mW, 120mW und 150mW

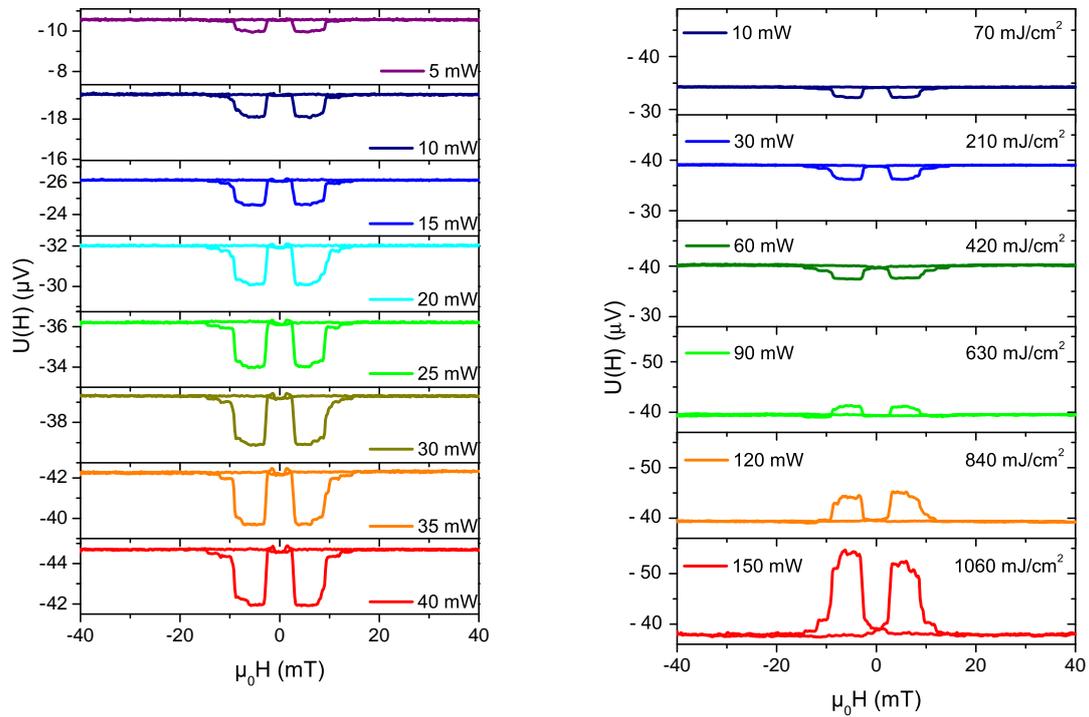


Abbildung 6.7: Messungen der durch den Magneto-Seebeck Effekt hervorgerufenen Spannungen $U(H)$ im Tunnелеlement der Probe vz101007b in Abhängigkeit des angelegten Magnetfeldes bei unterschiedlichen Leistungen der Laserdiode (links) und des Titan:Saphir-Laser (rechts).

aufgetragen. Anhand dieser Auftragung ist erkennbar, dass die Spannungsänderung des Probensignals negativ ist. Diese Bestimmung wird später wichtig sein, um das Vorzeichen der Seebeck Koeffizienten zu ermitteln. In Abschnitt 6.3.2 werden zudem ebenfalls Messungen bei zwei unterschiedlichen Modulationsfrequenzen des Lock-In Verstärkers gemacht. Die Messungen der Probe vz101007b am Element R07E02 (Elementgröße $1 \times 1 \mu\text{m}^2$) wurden alle mit einer Modulationsfrequenz von 1,5 kHz durchgeführt.

In Abbildung 6.7 sind die Spannungsmessungen der Probe vz101007b sowohl beim Aufheizen mit der Dauerstrich-Laserdiode als auch beim Aufheizen durch den Titan:Saphir-Laser gezeigt.

Eine Auftragung der Seebeck Spannungen für parallele und antiparallele Ausrichtung zeigt hier ein nicht lineares Verhalten (Abbildung 6.8). Das bedeutet, dass auch die Seebeck Koeffizienten $S_{P,AP}$ eine nicht-lineare Abhängigkeit von der Pumpleis-

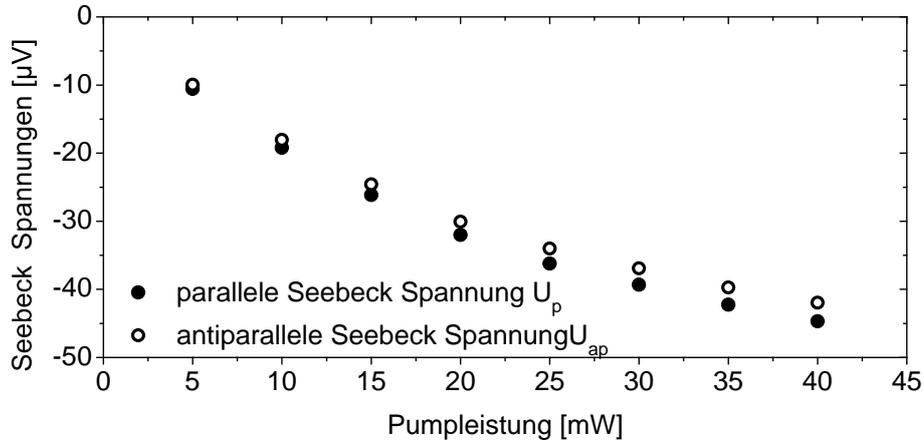


Abbildung 6.8: Auftragung der Seebeck Spannungen U_P und U_{AP} gegen die Pumpleistung P für parallele und antiparallele Ausrichtung zeigt nicht-lineares Verhalten.

tung zeigen müssen.

Mit steigender Pumpfluenz P erhöht sich sowohl der Temperaturunterschied innerhalb der Tunnelbarriere ΔT als auch die mittlere Temperatur der MgO-Schicht T_{MgO} . Beide Abhängigkeiten erweisen sich als linear, sodass die Seebeck-Spannung geschrieben werden kann als:

$$U_{P,AP} = S_{P,AP} \Delta T = S_{P,AP} \cdot a (T_{MgO} - 293,15 K) \quad (6.1)$$

Aus den Daten der Comsol Simulation ergeben sich die Werte:

$$\Delta T = 0,0018 \text{ K/mW} \cdot P$$

$$T_{MgO} = 1,2 \text{ K/mW} \cdot P + 293,15 \text{ K}$$

Für a ergibt sich somit ein Wert von:

$$a = 0,0015$$

Mit Hilfe der Comsol Simulationen ist es somit möglich die Seebeck Koeffizienten S_P , S_{AP} zu berechnen. Außerdem können diese, sowie der prozentuale Magneto-Seebeck Effekt S_{MS} , nun in Abhängigkeit von der Temperatur der MgO-Schicht aufgetragen und mit der Theorie verglichen werden.

In Abbildung 6.9 sind die mit Gleichung (6.1) berechneten Seebeck Koeffizienten S_P und S_{AP} in Abhängigkeit der mittleren Temperatur der MgO-Schicht aufgetragen. Es zeigen sich für S_P und S_{AP} sehr ähnliche Verläufe. Beide Koeffizienten zeigen einen nicht-linearen Anstieg mit einer negativen zweiten Ableitung. Der Seebeck-Koeffizient bei antiparalleler Ausrichtung der CoFeB-Schichten S_{AP} steigt weniger stark an, als der für parallele Ausrichtung, sodass sich beide Verläufe bei einer Temperatur von etwa 400 K schneiden.

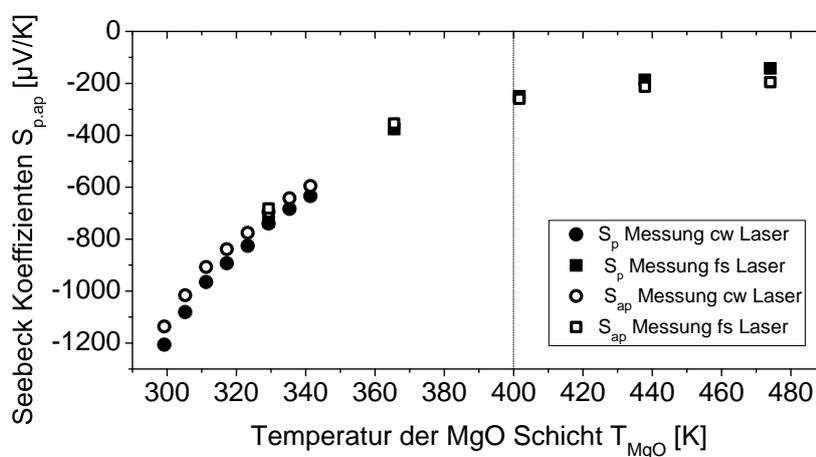


Abbildung 6.9: Auftragung der mit Gleichung (6.1) berechneten Seebeck Spannungen gegen T_{MgO} . Die Verläufe von S_P und S_{AP} schneiden sich bei einer Temperatur von $T_{MgO} \approx 400$ K.

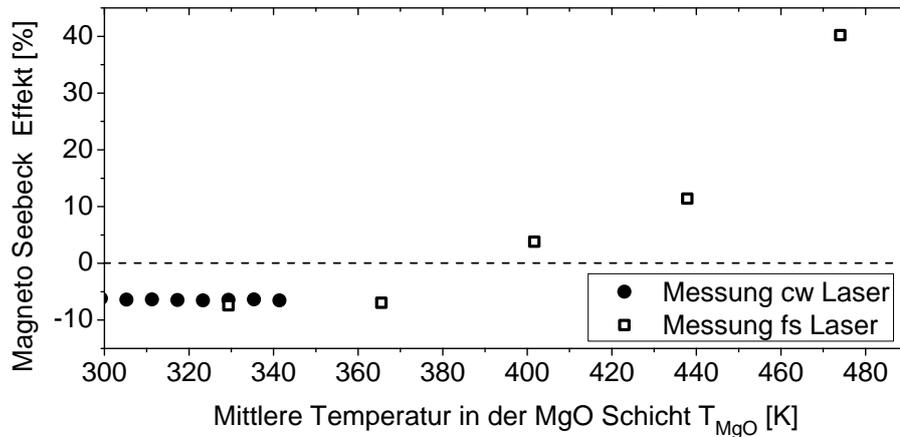


Abbildung 6.10: Prozentualer Magneto-Seebeck Effekt in Abhängigkeit der Temperatur. Bei etwa 400 K wechselt S_{MS} das Vorzeichen.

6.3.2 Messungen für die Probe mw110509b

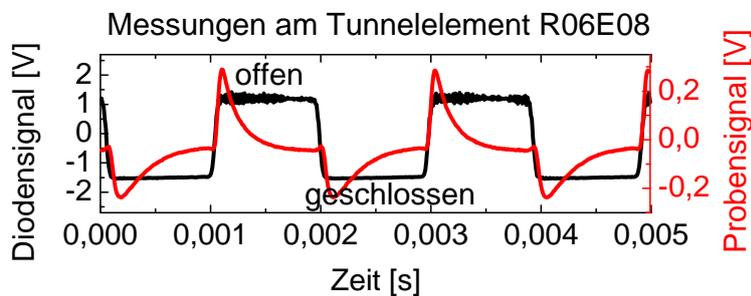


Abbildung 6.11: Auftragung von Spannungssignal der Probe und Diodensignal. Das Diodensignal ist proportional zum Signal des Choppers und zeigt an, ob er geschlossen ist oder offen. Das Diodensignal zeigt im offenen Zustand des Choppers große Schwankungen, diese sind durch Übersteuerung des Oszilloskops zu erklären und für die weitere Betrachtung nicht von Belang.

Für die Probe mw110509b wurden mit Hilfe des Titan:Saphir-Lasers fluenzabhängige Messungen an drei Elementen gemacht. Die Elemente sind alle baugleich (Elementgröße $2 \times 2 \mu\text{m}^2$) und werden nur zur besseren Nachvollziehbarkeit angeführt.

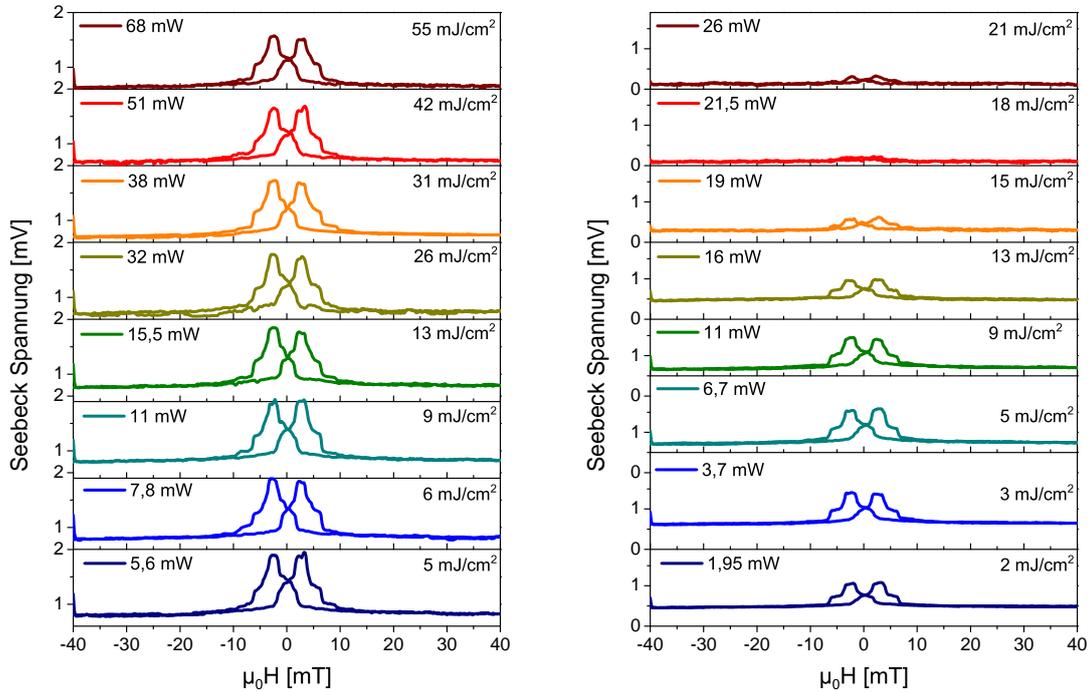


Abbildung 6.12: Messungen der durch den Magneto-Seebeck Effekt hervorgerufenen Spannungen $U(H)$ des Tunnелеlements der Probe mw110509b für die Elemente R06E08 (links) und R06E09 (rechts) in Abhängigkeit des angelegten Magnetfeldes bei unterschiedlichen Leistungen des Titan:Saphir-Laser.

Zunächst sind in Abbildung 6.11 beispielhaft für das Element R06E08 das Spannungssignal der Probe sowie das Diodensignal aufgetragen. Anhand dieser Auftragung ist erkennbar, dass die Spannungsänderung des Probensignals positiv ist.

Die Messungen der Seebeck Spannungen für die Elemente R06E08 und R06E09 sind in Abbildung 6.12 gezeigt. Die dritte Messung wurde am Element R06E03 durchgeführt und ist in Abbildung 6.15 gezeigt. Bei dieser Messung wurde bei 1,5 und 0,5 kHz Lock-In Modulation gemessen. Die Seebeck Spannungen der Elemente R06E08 und R06E09 der Probe mw110509b wurden bei einer Lock-In Modulation von 0,5 kHz gemessen. Die Seebeck Spannungen der Probe vz101007b hingegen wurden bei einer Lock-In Modulation von 1,5 kHz gemessen.

Im Gegensatz zur Messung an der Probe vz101007b zeigt die Auftragungen der See-

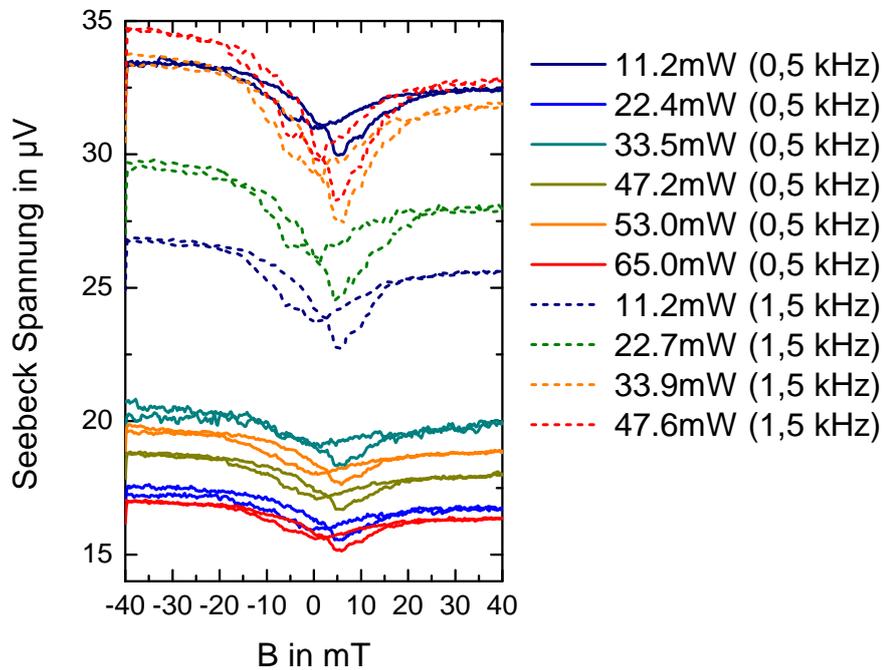


Abbildung 6.13: Auftragung der durch den Magneto-Seebeck Effekt hervorgerufenen Spannungen $U(H)$ des Tunnelements der Probe mw110509b für das Element R06E03 bei 1,5 kHz (gestrichelte Linie) und 0,5 kHz (durchgezogene Linie) Lock-In Modulation.

beck Spannungen gegen die Leistung bei dem Tunnelement R06E08 ein lineares Verhalten und kein Verschwinden der Seebeck-Spannung bei $P = 0$. Der Seebeck Effekt sollte aber bei verschwindender Leistung ebenfalls verschwinden, da kein Temperaturgradient innerhalb der MgO-Schicht erzeugt wird. Leider wurde für die Seebeck Spannung keine Messung bei $P = 0$ vorgenommen. Da der temperaturabhängige Verlauf der Seebeck Spannung auf der Basis theoretischer Brechungen keineswegs linear verläuft, ist es durchaus denkbar, dass die Seebeck Spannung auch wenn dies anhand des Graphen nicht erkennbar ist, für verschwindende Leistung ebenfalls verschwindet.

Bei der Auftragung der Seebeck Spannungen für das Tunnelement R06E09 zeigt sich keine lineare Abhängigkeit, sondern ein oszillierendes Verhalten und die Seebeck-Spannung verschwindet für $P = 0$.

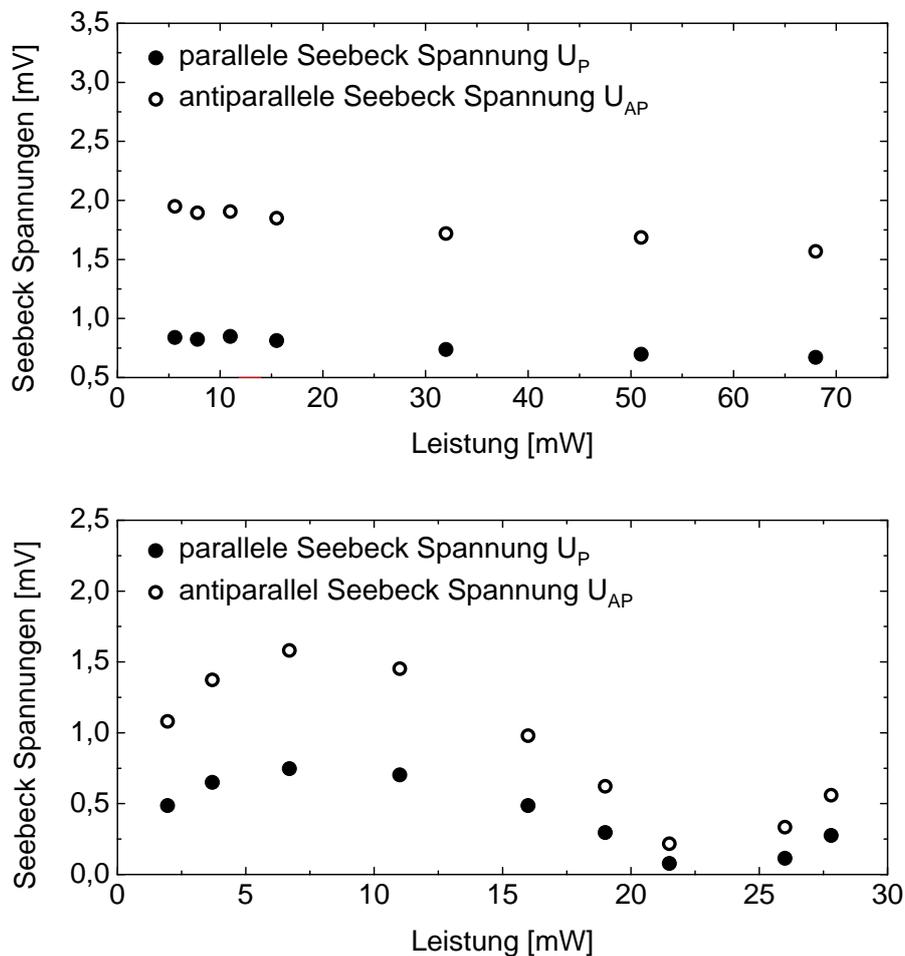


Abbildung 6.14: Auftragung der Seebeck Spannungen U_P und U_{AP} des Tunnelelements der Probe mw110509b für die Elemente R06E08 (oben) und R06E09 (unten) gegen die Pumpleistung P für parallele und antiparallele Ausrichtung.

In Abbildung 6.15 sind die Seebeck Spannungen U_P und U_{AP} des Tunnelelements der Probe mw110509b für das Element R06E03 gegen die Pumpleistung P aufgetragen. Oben ist die Auftragung der Seebeck Spannungen gezeigt, die bei einer Lock-In Modulation von 1,5 kHz gemessen wurden. Unten ist die Auftragung der Seebeck Spannungen gezeigt, die bei einer Lock-In Modulation von 0,5 kHz gemessen wurden.

Für die obere Messung (mit $f = 1,5$ kHz) ist wie bei Element R06E08 (mw110509b) fälschlicherweise ein linearer Zusammenhang erkennbar. Hier wird wiederum ange-

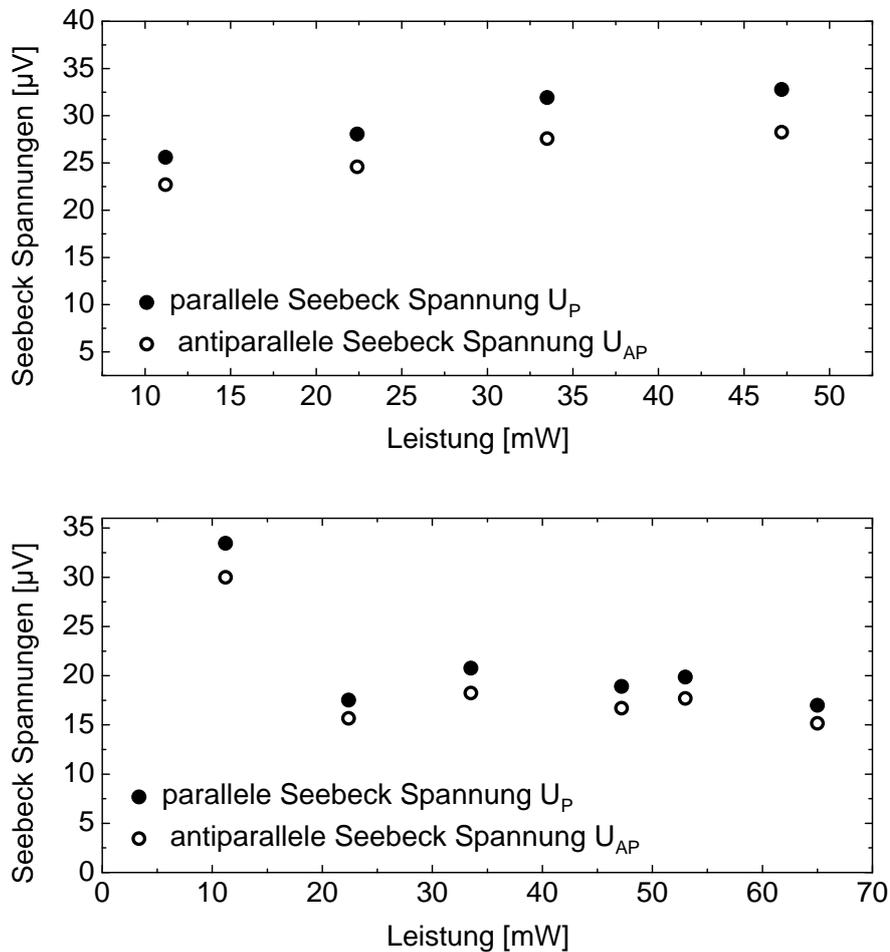


Abbildung 6.15: Auftragung der Seebeck Spannungen U_P und U_{AP} des Tunnelelements R06E03 der Probe mw110509b gegen die Pumpleistung P für 1,5 kHz (oben) und 0,5 kHz (unten) Lock-In Modulation.

nommen, dass die Seebeck-Spannung für $P = 0$ verschwindet.

Bei der Auftragung der Seebeck Spannungen, die bei einer Lock-In Modulation von 0,5 kHz gemessen wurden, zeigt sich keine lineare Abhängigkeit. Hier hat die Seebeck Spannung bei etwa 10 mW ein Maximum und wird dann ebenfalls für $P = 0$ verschwinden.

Mit Hilfe von Gleichung 6.1 und den Simulationen mit Comsol können nun die Seebeck Koeffizienten S_P und S_{AP} für parallele und antiparallele Ausrichtung bestimmt

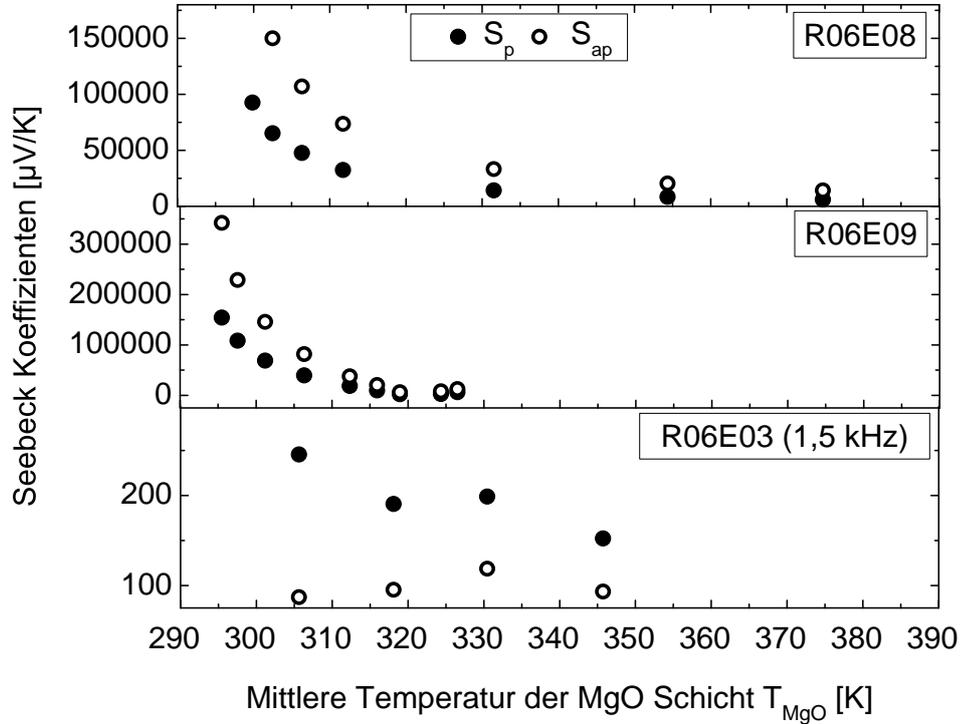


Abbildung 6.16: Auftragung der Seebeck Koeffizienten für parallele und antiparallele Ausrichtung S_P und S_{AP} der Tunnelelemente R06E09, R06E08 und R06E03 der Probe mw110509b gegen die berechnete Temperatur. Es zeigen sich zum Teil sehr hohe Seebeck Koeffizienten von mehr als $300000 \mu\text{VK}^{-1}$.

werden. Aus den Comsol Simulation ergaben sich folgende Werte:

$$\begin{aligned}
 \Delta T &= 0,0016 \text{ K/mW} \cdot P \\
 T_{\text{MgO}} &= 1,11 \text{ K/mW} \cdot P + 293,15 \text{ K} \\
 a &= 0,00145
 \end{aligned} \tag{6.2}$$

Nach Gleichung 3.2 wird der prozentuale Magneto-Seebeck Koeffizient folgendermaßen bestimmt:

$$S_{MS} = \frac{S_P - S_{AP}}{\min(S_P, S_{AP})} \tag{6.3}$$

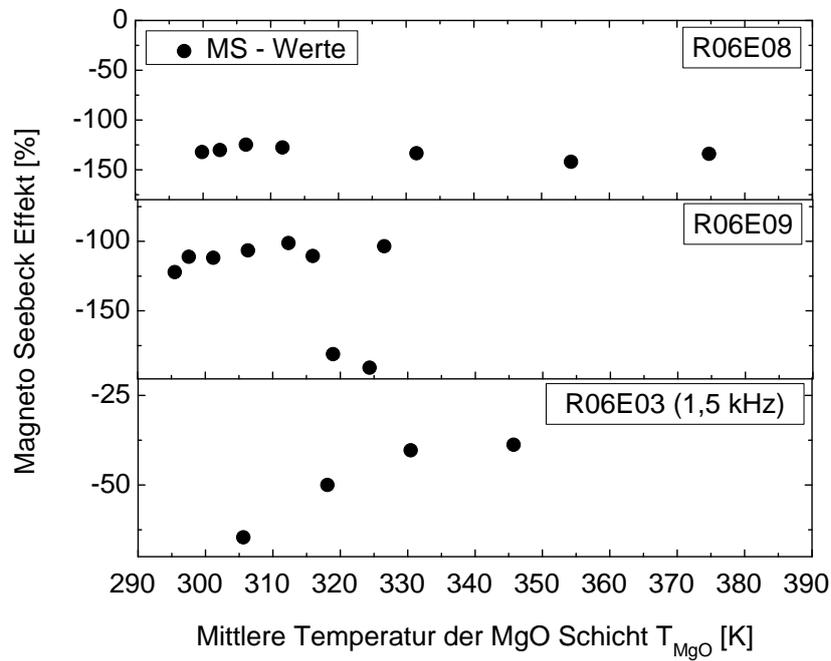


Abbildung 6.17: Auftragung des prozentualen Magneto-Seebeck Effekts der Tunnellelemente R06E09, R06E08 und R06E03 der Probe mw110509b gegen die berechnete Temperatur. Für das Element R06E09 zeigen sind maximale Werte von etwa 200%.

7 Diskussion

Die Ergebnisse der stationären und zeitabhängigen Comsol Simulationen, sowie die Ergebnisse aus den Daten der Reflektivitätsmessungen und die fluenzabhängigen Messungen des Magneto-Seebeck Effekts sollen in diesem Abschnitt noch einmal zusammengetragen und abschließend analysiert werden. Wenn dies möglich ist, so sollen die Ergebnisse zu einander in Verbindung gesetzt und mit anderen experimentellen oder theoretischen Werten verglichen werden.

7.1 Temperatursimulationen mit Comsol

Die stationären Comsol Simulationen liefern eine Temperaturverteilung innerhalb des Tunnelements (Abb. 6.1). Man erkennt, dass sich die größte Temperaturdifferenz innerhalb der MgO Schicht ausbildet, in den anderen Schichten aber auch Temperaturdifferenzen erkennbar sind. Diese zusätzlichen Temperaturdifferenzen können ebenfalls eine Seebeck-Spannung hervorrufen und somit die Grundspannung bei der Messung des Seebeck Effekts erhöhen.

Die zeitabhängigen Comsol Simulationen geben einen guten qualitativen Einblick in die Temperaturverteilung innerhalb des Tunnelements bei Gebrauch des Titan:Saphir Lasers. Da der genaue Absorptionskoeffizient der oberen Goldschicht experimentell nicht ermittelt werden konnte, liefern diese Simulationen leider keine quantitativen Werte.

Es ist aber erkennbar, dass die Temperaturdifferenz innerhalb der MgO-Schicht bei etwa 50 ps ein im Vergleich zu den Werten der stationären Simulation hohes Maximum erreicht. Der ermittelte Wert der Simulation lag für die Einstrahlung einer gemittelte Laserleistung von 50 mW direkt auf die Oberfläche bei mehreren Kelvin. Im Vergleich dazu zeigen die stationären Simulationen Temperaturdifferenzen, die im Bereich von nur Bruchteilen von Kelvin liegen.

Des Weiteren zeigt sich, dass sich der Temperaturgradient innerhalb des Pseudo

Spin Valves nach etwa 10 ns ausgleicht (Abb. 6.4).

Die Berechnungen der Seebeck Koeffizienten in Abschnitt 6.3 wurden mit Hilfe der stationären Simulationen durchgeführt. Es wurden also die resultierenden Temperaturdifferenzen aus der Einstrahlung der gemittelten Leistung zur Berechnung genutzt, obwohl die Messungen mit einem gepulsten Laser durchgeführt wurden. Es stellt sich nun die Frage, ob das hinsichtlich der oben angeführten Ergebnisse legitim ist. Es muss aber in diesem Zusammenhang darauf hingewiesen werden, dass die Elektronik des Aufbaus so kurze Zeitaufösungen nicht möglich macht, da das Lock-In Signal innerhalb der gegebenen Modulation von 0,5 oder 1,5 kHz gemittelt wird. Da die theoretisch berechnete Temperaturabhängigkeit des Magneto-Seebeck Effekts (siehe 3.4) ein nicht lineares Verhalten zeigt und sogar ab einer gewissen Temperatur das Vorzeichen ändert, kann es dennoch einen Unterschied machen, ob der Effekt mit einer Dauerstrich Laserdiode oder einem gepulsten Lasern gemessen wird.

7.2 Bestimmung der Relaxationszeiten aus den Reflektivitätsdaten

In dieser Arbeit ist beispielhaft gezeigt, wie mit Hilfe des Zwei-Temperatur-Modells aus gemessenen Reflektivitätsdaten die Relaxationszeiten des Systems ermittelt werden können.

Dies konnte leider nur für Reflektivitätsmessungen auf Siliziumoxid durchgeführt werden, da die Reflektivitätsmessungen auf der Goldschicht nicht ausgewertet werden konnten.

Es ist möglich, dass die Schwankungen des Lasers in der Größenordnung des gemessenen Signals liegen und die Messungen mit mehr Laserleistung durchgeführt werden müssen. Der Versuchsaufbau so wie er in dieser Arbeit vorgestellt wird, macht es nicht weiter möglich die Reflektivität der Probe für eine größere eingestrahlte Laserleistung zu bestimmen. Für weitere Analysen muss die Reflektivitätsmessung in einem separaten Aufbau durchgeführt werden.

Für die beiden Relaxationszeiten von Siliziumoxid wurde $\tau_1 = (5,08 \pm 0,07) \cdot 10^{-12}$ s und $\tau_2 = (62,11 \pm 0,46) \cdot 10^{-12}$ s ermittelt.

In der Literatur ist für den schnelleren Prozess für die Elektronen-Phonon Energie-relaxationszeit ein Wert von $5 \cdot 10^{-13}$ s zu finden [22]. Der in dieser Arbeit ermittelte Wert weicht um eine Größenordnung von der Relaxationszeit aus [22] ab. Für den langsameren Prozess der sich aus der Relaxation über die Bandlücke ergibt, sind Werte im Bereich von 10^{-9} s bis 10^{-6} s zu finden [23]. Der für τ_2 ermittelte Wert ist also um drei Größenordnungen zu klein. In diesem Zusammenhang ist aber zu beachten, dass es sich bei der untersuchten Siliziumschicht um dotiertes Silizium handelt (p-dotiert mit Bor: $N_d = (4 - 6) \cdot 10^{15}$ N/cm²). Durch die Dotierung verringert sich die Relaxationszeit, da die Elektronen durch die Störstellen schneller relaxieren¹.

7.3 Messungen des Magneto-Seebeck Effekt

In diesem Abschnitt sollen die theoretischen Berechnungen zur Temperaturabhängigkeit der Seebeck Koeffizienten und des Magneto Seebeck Effekts mit den experimentell ermittelten Werten verglichen, sowie eventuelle Abweichungen erklärt werden.

7.3.1 Messungen an der Probe vz101007b

In Abbildung 6.9 sind die ermittelten Seebeck Koeffizienten S_P und S_{AP} in Abhängigkeit der mittleren Temperatur der MgO-Schicht aufgetragen. Aufgrund des negativen Spannungssignals (siehe Abbildung 6.6) sind alle Koeffizienten ebenfalls negativ. Auch für die theoretisch berechneten Werte (Abbildung 3.4) ergeben sich nur negative Seebeck Koeffizienten.

Vergleicht man die Beträge der experimentellen Bestimmung aus Abbildung 6.9 mit Abbildung 3.4 so ist erkennbar, dass die experimentell bestimmten Seebeck Koeffizienten sehr viel größer sind, als die theoretisch berechneten. Dieser Sachverhalt ist nicht verwunderlich, da die im Experiment notwendigerweise hinzugefügten Materialien ebenfalls einen Beitrag zur Seebeck-Spannung liefern, in der theoretischen Berechnung aber nur das tatsächliche Pseudo Spin Valve aus CoFeB/MgO/CoFeB betrachtet wurde.

¹siehe: <http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/Si/electric.html>

Die Verläufe der experimentell bestimmten Seebeck Koeffizienten gleichen den theoretischen Berechnungen nicht. Die nicht erwünschten Seebeck Spannungen, durch die im Experiment hinzugefügten Materialien, zeigen anscheinend eine andere Fluenzabhängigkeit, als die Spannungen die in der CoFeB/MgO/CoFeB Lage entstehen.

Der Verlauf des experimentell bestimmten prozentualen Magneto-Seebeck Effekts deckt sich mit dem theoretisch berechneten. Dies ist vorhersehbar, da nach Gleichung (3.2) der Unterschied der erzeugten Spannungen für parallele und antiparallele Ausrichtung von Bedeutung ist. Die zusätzlichen Seebeck Spannungen zeigen aber keine Abhängigkeit von der Magnetisierungsrichtung der beiden magnetischen Schichten und gehen nicht in den prozentualen Magneto-Seebeck Effekt ein.

Die Beträge des prozentualen Magneto-Seebeck Effekts hingegen sind betragsmäßig kleiner, als die Werte aus den theoretischen Berechnungen. Dies ist ebenfalls nicht verwunderlich, da sich durch die zusätzlichen Seebeck Spannungen die Grundspannung erhöht. Da der prozentuale Magneto-Seebeck Effekt auf die Grundspannung normiert wird, hat dieser bei einer größeren Grundspannung einen kleineren Wert. Aufgrund der stationären und zeitabhängigen Comsol Simulationen wurde oben angesprochen, dass es einen Unterschied machen kann, ob der Effekt mit einer Dauerstrich Laserdiode oder einem gepulsten Lasern gemessen wird. Diese Befürchtungen scheinen aber unbegründet, da sich die Verläufe der Seebeck Koeffizienten für die Dauerstrich Laserdiode und den Titan:Saphir Laser gut decken (siehe Abbildung 6.9).

7.3.2 Messungen an der Probe mw110509b

Obwohl die theoretischen Berechnungen (Abbildung 3.4) nur negative Seebeck Koeffizienten vorhersagen, zeigt sich bei allen Messungen der Probe mw110509b ein positives Spannungssignals (siehe Abbildung 6.11).

Die Seebeck Koeffizienten (Abbildung 6.16) zeigen somit nicht das Verhalten, das durch die theoretischen Berechnungen vorhergesagt wurde.

Die Seebeck Koeffizienten der Proben R06E08/E09, die bei einer Modulationsfrequenz des Lock-In Verstärkers von 0,5 kHz gemessen wurden, sind sehr hoch im Gegensatz zu denen Koeffizienten aus Messungen des Elements R06E03 (mw110509b) und R07E02 (vz101007b), die mit einer Modulationsfrequenz des Lock-In Verstärkers

von 1,5 kHz gemessen wurden.

Für die Probe R06E08 wurden Seebeck Koeffizienten von etwa $150000 \mu\text{VK}^{-1}$ gemessen und für die Probe R06E09 sogar Seebeck Koeffizienten von mehr als $300000 \mu\text{VK}^{-1}$. Die Koeffizienten, die mit einer Modulationsfrequenz des Lock-In Verstärkers von 1,5 kHz gemessen wurden, liegen bei Maximalwerten von $250 \mu\text{VK}^{-1}$. Alle Koeffizienten haben allerdings einen höheren Wert, als es die theoretischen Berechnungen vorhersagen, da die im Experiment notwendigerweise hinzugefügten Materialien ebenfalls einen Beitrag zur Seebeck-Spannung liefern.

Die Verläufe der Werte der Proben R06E08/E09 für den prozentualen Magneto-Seebeck Effekt (siehe Abbildung 6.17) weichen auch von den Verläufen der theoretischen Berechnungen (siehe Abbildung 3.4) ab. Der temperaturabhängige Verlauf der Werte für den prozentualen Magneto-Seebeck Effekt der Probe R06E03 gleicht hingegen den theoretischen Berechnungen. Für den Magneto-Seebeck Effekt sind Maximalwerte von bis zu 200% zu finden.

Im Gegensatz zur Probe vz101007b zeigt sich hier, dass die experimentellen und theoretischen Ergebnisse einander entweder gar nicht (Elemente R06E08/E09) oder kaum (Element R06E03) gleichen. Es kann sein, dass die Proben durch die Bestrahlung des Lasers oder durch erzeugte Spannungen beim Anschließen Schaden genommen haben und deshalb ein unvorhergesehenes Verhalten zeigen.

Sind die Proben allerdings nicht kaputt gewesen, so muss eine Erklärung für die nicht vorhergesehene Abweichung gefunden werden. In diesem Zusammenhang sollen besonders zwei wichtige Sachverhalte separat herausgearbeitet werden. Zum Ersten soll auf den Einfluss der Zusammensetzung der Elektroden eingegangen werden. Die theoretisch berechneten Werte sind in Tabelle 3.1 zusammengetragen. Zum Zweiten soll der Einfluss der Lock-In Modulation diskutiert werden.

Einfluss der Zusammensetzung der Elektroden

In Tabelle 3.1 ist die sensitive Abhängigkeit des Magneto Seebeck Effekts von der Komposition der Elektroden gezeigt. Wie auch bei dieser Probe gemessen wurde, sind die Seebeck Koeffizienten zum Teil positiv. Es ist also durchaus möglich, dass sich bei der Herstellung der Probe mw110509b im Gegensatz zur Probe vz101007b die Eisen und Kobalt Atome nicht richtig angeordnet haben und Cluster von Eisen oder Kobalt Atomen entstanden sind.

Außerdem ist zu beachten, dass die untersuchten Elemente der Probe mw110509 eine Größe von $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ haben und somit doppelt so groß sind wie die untersuchten Elemente der Probe vz101007b. Die Größe der Elemente erhöht zusätzlich die Wahrscheinlichkeit zur Clusterbildung.

Des Weiteren muss auch beachtet werden, dass die Berechnungen für Legierungen ohne Bohr durchgeführt wurden und die experimentellen Werte somit abweichen können. Dies gilt aber gleichermaßen für beide Proben.

Einfluss der Lock-In Modulation

In Abbildung 6.13 sind Seebeck Spannungen für zwei unterschiedliche Modulationsfrequenzen des Lock-In Verstärkers aufgetragen. Man erkennt, dass die Spannungsdifferenzen $U_P - U_{AP}$ betragsmäßig größer sind für eine Modulation von 1,5 kHz. Man misst bei höherer Modulationsfrequenz einen größeren Magneto-Seebeck Effekt. Die Basisspannungen U_P variieren bei höherer Modulationsfrequenz stärker. Dieser Sachverhalt ist mit Abbildung 6.6 gut zu erklären. Der Betrag des Spannungssignals steigt beim Öffnen des Choppers stark an und fällt dann ab. Ist die Öffnung des Choppers für kürzere Zeitspannen offen (dies entspricht einer höheren Modulationsfrequenz), so wird mehr Signal registriert. Ist der Chopper für eine längere Zeit geöffnet, so spielen zusätzliche Seebeck Spannungen durch andere Materialien eine größere Rolle und die Seebeck Koeffizienten sind größer.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Bachelorarbeit wurden stationäre und zeitabhängige Simulationen mit Comsol gemacht, die einen guten Einblick in die Verteilungen der Temperatur innerhalb der Tunnelbarriere geben. Des Weiteren wurde ein Experiment aufgebaut, das die fluenzabhängige Messung des Magneto-Seebeck Effekts ermöglicht. Mit Hilfe der Simulationen konnte die Temperaturabhängigkeit des Magneto-Seebeck Effekts experimentell aufgezeichnet werden.

Zu diesem Zweck wurde zunächst in Kapitel 2 die Theorie der Finite Elemente Methode sowie die Lösungsalgorithmen von Comsol vorgestellt. In Kapitel 3 wurde die Ursache des Magneto-Seebeck Effekts theoretisch beleuchtet und theoretisch berechnete Abhängigkeiten gezeigt. In Kapitel 4 wurden daraufhin die Simulationen näher erläutert und in Kapitel 5 der experimentelle Aufbau beschrieben. In diesem Zusammenhang wurde beispielhaft gezeigt, wie es mit Hilfe von Reflektivitätsmessungen möglich sein kann, die Oberflächentemperatur zu bestimmen. Diese ist für die Eichung der Simulationen mit Comsol wichtig, um genauere quantitative Daten zu erhalten. Leider ist die direkte Temperaturbestimmung aus den Reflektivitätsmessungen in dieser Arbeit noch nicht gelungen. Hinsichtlich dieser Messungen besteht also weiterhin Klärungsbedarf.

Im Fokus dieser Arbeit standen neben den Temperatursimulationen mehrere Versuchsreihen, die die Temperaturabhängigkeit der Seebeck Koeffizienten und des prozentualen Magneto-Seebeck Effekts zeigten.

Es ließen sich zum Teil hohe Werte für den Magneto-Seebeck Effekt, von bis zu 200 % messen. Außerdem konnte auch experimentell eine sehr starke Abhängigkeit von der Temperatur festgestellt werden.

Es zeigte sich außerdem, dass die Zusammensetzung der Elektroden einen erheblichen Einfluss auf den Magneto-Seebeck Effekt hat. In diesem Bereich besteht weiterhin Forschungsbedarf. In folgenden Experimenten könnte der Magneto-Seebeck Effekt für verschiedene Zusammensetzung der Elektroden untersucht werden.

Abschließend kann man sagen, dass die wenigen fluenzabhängigen Messungen, die in dieser Arbeit vorgenommen wurden, schon einen kleinen Einblick in das temperaturabhängige Verhalten des Magneto-Seebeck Effekts geben. Für eine genauere Analyse der Temperaturabhängigkeit sind aber sehr viel mehr vergleichende Messungen nötig. In diesem Zusammenhang ist auch anzuführen, dass in dieser Arbeit sowohl bei der experimentellen Realisierung als auch bei der Struktur der Proben viele Parameter geändert wurden. In nachfolgenden Messungen wird es aber wichtig sein, vergleichbare Messungen zu machen, um aussagekräftigere Ergebnisse zu erzielen.

Abbildungsverzeichnis

3.1	Thermoelement	13
3.2	Bandstruktur einer Fe bcc Struktur in der (001) (Γ -H) Richtung aus [13]	15
3.3	Magneto Seebeck [2]	16
3.4	Berechnung der Seebeck Koeffizienten in Abhängigkeit der Temperatur nach Heiliger et al. [2]	18
4.1	Modell	24
4.2	Mesh	25
5.1	Versuchsaufbau	30
6.1	Temperaturverlauf bei 40mW	35
6.2	Temperaturverlauf an der Oberfläche, sowie oberhalb und unterhalb der MgO-Schicht	36
6.3	Temperaturdifferenz innerhalb der MgO-Schicht	37
6.4	Temperaturverteilung nach 10ns	38
6.5	Reflektivitätsmessung von SiO ₂	40
6.6	Das Spannungssignal der Probe bei unterschiedlichen Modulationsfrequenzen des Lock-In Verstärkers.	41
6.7	Fluenzabhängigkeit des Tunnelements für niedrige Fluenzen (Dauerstrich Laserdiode) aus [3]	42
6.8	Auftragung der Seebeckspannungen gegen die Pumpleistung	43
6.9	Auftragung von $S_{P,AP}$ gegen T_{MgO}	44
6.10	Prozentualer Magneto-Seebeck Effekt in Abhängigkeit der Temperatur	45
6.11	Auftragung von Spannungssignal der Probe und Diodensignal	45

6.12	Fluenzabhängigkeit des Tunnelements der Probe mw110509b für die Elemente R06E08 (links) und R06E09 (rechts)	46
6.13	Fluenzabhängigkeit des Tunnelements der Probe mw110509b für das Elemente R06E03 für 1,5 und 0,5 kHz Lock-In Modulation . . .	47
6.14	Auftragung der Seebeckspannungen gegen die Pumpleistung	48
6.15	Auftragung der Seebeckspannungen gegen die Pumpleistung für das Tunnelements R06E03 der Probe mw110509b für 1,5 und 0,5 kHz Lock-In Modulation.	49
6.16	Auftragung der Seebeck Koeffizienten gegen die Pumpleistung . . .	50
6.17	Auftragung des prozentualen Magneto-Seebeck Effekts in Abhängigkeit der Temperatur	51

Tabellenverzeichnis

3.1	Berechnung der Seebeck Koeffizienten für parallele S_P und antiparallele S_{AP} Konfiguration aus [2].	19
4.1	Positionen der Domänen für die Probe vz101007b	22
4.2	Positionen der Domänen für die Probe mw110509b.	23
4.3	Materialien mit ihren Größen der thermischen Leitfähigkeit k , ihrer Dichte ρ und ihrer Wärmekapazität bei konstantem Druck c_p	23
6.1	Ermittelte Werte der Relaxationszeiten.	39

Literaturverzeichnis

- [1] M. Czerner, M. Bachmann, C. Heiliger. *Spin caloritronics in magnetic tunnel junctions: Ab initio studies*. Phys. Rev. B 83, 132405 (2011)
- [2] M. Walter, J. Walowski, V. Zbarsky, M. Münzenberg, M. Schäfers, D. Ebke, G. Reiss, A. Thomas, P. Peretzki, M. Seibt, J. S. Moodera, M. Czerner, M. Bachmann, C. Heiliger *Seebeck effekt in magnetic tunnel junctions*. Nature Materials (2011)
- [3] M. Walter, J. Walowski, V. Zbarsky, M. Münzenberg, M. Schäfers, D. Ebke, G. Reiss, A. Thomas, P. Peretzki, M. Seibt, J. S. Moodera, M. Czerner, M. Bachmann, C. Heiliger *Seebeck effekt in magnetic tunnel junctions - supplementary information*. Nature Materials (2011)
- [4] *COMSOL Multiphysics Reference Guide*. COMSOL Multiphysics GmbH, Version: October 2010 COMSOL 4.1
- [5] *COMSOL Multiphysics User Guide*. COMSOL Multiphysics GmbH, Version: October 2010 COMSOL 4.1
- [6] K.-J. Bathe. *Finite Element Procedures*. Prentice-Hall of India, New Delhi, 2005
- [7] W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling, B. Flannery. *Numerical Recipes-The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 2007, S. 456ff
- [8] A.C. Hindmarsh, P.N. Brown, K.E. Grant, S.L. Lee, R. Serban, D.E. Shumaker, C.S. Woodward *SUNDIALS: Suite of Nonlinear and Differential/Algebraic Equation Solvers*. ACM T. Math. Software, vol. 31, S. 374ff, 2005.
- [9] P.N. Brown, A.C. Hindmarsh, and L.R. Petzold *Using Krylov Methods in the Solution of Large-Scale Differential-Algebraic Systems*. SIAM J. Sci. Comput., vol. 15, S. 1467–1488, 1994.

- [10] J. Chung, G.M. Hulbert *A Time Integration Algorithm for Structural Dynamics with Improved Numerical Dissipation: The Generalized- α Method*. J. Appl. Mech., vol. 60, S. 371–375, 1993.
- [11] K.E. Jansen, C.H. Whiting, G.M. Hulbert *A generalized- α method for integrating the filtered Navier–Stokes equations with a stabilized finite element method*. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., vol. 190, S. 305–319, 2000.
- [12] R. Pelster, R. Pieper, I. Hüttl *Thermospannungen - viel genutzt und fast immer falsch erklärt!* PhyDid 1/4 (2005) S.10-22, 2005
- [13] S. Yuasa, D.D. Djayaprawira *Giant tunnel magnetoresistance in magnetic tunnel junctions with a crystalline MgO(0 0 1) barrier*. Journal of Physics D: Applied Physics, 40(21):337, 2007.
- [14] W. H. Butler, X. G. Zhang, T. C. Schulthess, and J. M. MacLaren. *Spin-dependent tunneling conductance of Fe/MgO/Fe sandwiches*. Physical Review B, 63:0544146, 2001.
- [15] E. Hecht *Optik*, Oldenbourg Wissenschaftsverlag, München, 2005
- [16] C. L. Foiles *Ag-Ca*. Hellwege, K.-H., Olsen, J. L. (ed.). Springer Materials - The Landolt-Börnstein Database. DOI: 10.1007/10201705_31
- [17] K. E. Brenan, S. L. Campbell, L. R. Petzold *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA.
- [18] S. I. Anisimov, B.L. Kapeliovich, T. L. Perelman *Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses*. Sov. Phys. JETP 39 (1974), 375
- [19] J. Hohlfeld, S.-S. Wellershoff, J. Gudde, U. Conrad, V. Jahnke, E. Matthias, *Electron and lattice dynamics following optical excitation of metals* Chem. Phys. 251, 237–258 (2000).
- [20] G. Müller *Laser-induzierte Magnetisierungsdynamik in Halbmetallen und ferromagnetischen Nanostrukturen* 2007

- [21] P. Moschkau *Zeitaufgelöste Reflektivitätsmessungen an ferromagnetischen dünnen Filmen* 2004
- [22] H. M. van Driel *Kinetics of high density plasmas generated in Si by 1.06 and 0.53 pm picosecond laser pulses* Phys. Rev. E., vol. 35, pp. 8166-8176, 1987.
- [23] W. Eberhardt, R. Brickman, A. Kaldor *Photoemission from laser excited semiconductors: Dynamic response of the electronic structure in Si* Solid State Communications, Vol. 42, No. 3, pp. 169-173, 1982

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich zunächst ganz herzlich bei Marvin Walter für die hervorragende Betreuung meiner Bachelorarbeit bedanken. Seine Arbeit im Labor, sowie seine Hilfe und Diskussionsbereitschaft bei der Auswertung der Ergebnisse und Simulationen, sowie seine Korrekturvorschläge haben maßgeblich zur Entstehung dieser Arbeit beigetragen.

Bei Prof. Dr. Markus Münzenberg möchte ich mich ebenfalls ganz herzlich für die wunderbare Betreuung, die Erklärung meiner Fragen während der Forschungsphase und für die Hilfestellung bei der Analyse der Ergebnisse bedanken.

Für die Übernahme des Korreferats gebührt mein Dank Prof. Dr. Cynthia Volkert. Für eine nette und angenehme Arbeitsatmosphäre möchte ich der ganzen Arbeitsgruppe danken. Vor allem möchte ich mich bei Benjamin Lenk und Jakob Walowski bedanken. Benjamin Lenk hatte auch bei kleineren Fragen immer ein offenes Ohr und half mir die kleinen Probleme von z.B. Origin und Latex zu meistern. Jakob Walowski gebührt mein Dank für die Hilfestellung bei den Experimenten und der vielen Geduld, die er bei der ausführlichen Erklärungen meiner Fragen aufgebracht hat. Bei Christian Leutenantsmeyer möchte ich mich für die zur Verfügung gestellten Proben bedanken.

Erklärung nach §13(8) der Prüfungsordnung für den Bachelor-Studiengang
Physik an der Universität Göttingen:

Hiermit erkläre ich, dass ich diese Abschlussarbeit selbständig verfasst habe, keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe und alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten Schriften entnommen wurden, als solche kenntlich gemacht habe. Darüberhinaus erkläre ich, dass diese Abschlussarbeit nicht, auch nicht auszugsweise, im Rahmen einer nichtbestandenenen Prüfung an dieser oder einer anderen Hochschule eingereicht wurde.

Göttingen, den 25. August 2011

(Anissa Zeghuzi)