

Walter Schottky Institut
Zentralinstitut für Physikalische Grundlagen der Halbleiterelektronik
der
Technischen Universität München

Vertikaler Transport und extreme Magnetfelder in Halbleitern

Christian Strahberger

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Physik der Technischen
Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender:

Prüfer der Dissertation: Univ.-Prof. Dr. P. Vogl
Univ.-Prof. Dr.
Univ.-Prof. Dr.

Die Dissertation wurde am bei der Technischen Universität
München eingereicht und durch die Fakultät für Physik am
angenommen.

SUMMARY

This work can be divided into two parts. In the first part a multi-band scattering formalism in the framework of empirical tight-binding is employed to calculate ballistic tunneling currents and to study systematically the current voltage characteristics of metal/insulator based resonant tunneling diodes. It is predicted that ultra-thin metal(CoSi_2)/insulator(CaF_2) heterostructures on (111)-silicon substrates are excellent candidates for room temperature quantum effect devices. The results are in good agreement with experimental data. The physical origin of the distinct current resonances is explained in detail and the robustness of the resonance characteristics with regard to layer thickness variations and substrate orientations is predicted. The same theoretical method is used to model ballistic electron emission microscopy.

In the second part optical and electronic properties of bulk semiconductors in ultra-high magnetic fields are presented and discussed. The magnetic band-structure is calculated in a semi-empirical tight-binding model with the Peierls-Phase. For this Peierls original construction is extended to non-primitive crystals and the involved errors are estimated. Furthermore, the magnetic point and translation groups in a zincblende crystal are discussed. For comparison with experimental data, the transverse dielectric function for finite magnetic fields is derived within the tight-binding framework. The resulting absorption spectra of GaAs and GaSb agree very well with experimental data up to several hundred Tesla. In applying this theory to the Hofstadter system and its three-dimensional extension, it is predicted that the Hofstadter-Butterfly is visible in the optical absorption spectrum. Furthermore it is predicted that the conduction band and absorption spectrum of GaAs becomes chaotic above 1500 T.

*Was ist das Schwerste von allem?
Was dich das Leichteste dünkt,
mit den Augen zu sehen,
was vor den Augen liegt.*

Johann Wolfgang von Goethe

INHALTSVERZEICHNIS

Summary	iii
Einleitung	1
1 Empirisches Tight-Binding	3
1.1 Empirisches Tight-Binding des ungestörten Kristalls	3
1.1.1 Spin-Bahn-Koppelung	6
1.1.2 Parametersätze	6
1.2 Inkorporation von Störungen und Felder	7
1.2.1 Grenzflächen	7
1.2.2 Verspannungen	8
1.2.3 Ternäre Systeme	8
1.2.4 Elektrische Felder	9
1.2.5 Ausblick: Magnetische Felder	9
I Resonanter Transport in Heterostrukturen	11
Einleitung	13
2 Streuformalismus in Tight-Binding	14
2.1 Streuformalismus im Festkörper	14
2.2 Stromdichte	16
2.3 Berechnung des Transmissionskoeffizienten in Tight-Binding	18
3 Siliziumkompatible Tunnelbauelemente auf $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$ Basis	22
3.1 Grenzflächen und Bandkanten	22
3.2 Zwei-Barrieren Strukturen	25
3.3 Drei-Barrieren Tunnelndioden	27

3.3.1	Ursachen des resonanten Transports	28
3.3.2	Stabilität der Resonanz	31
3.3.3	Substrat-Orientierung	34
4	Analyse von Au/GaAs Grenzflächen mittels BEEM	37
4.1	Theoretische Beschreibung	38
4.2	Vergrabene Tunneldioden	40
4.3	Tunnel-Strukturen nahe der Oberfläche	41
II	Halbleiter in magnetischen Feldern	45
	Einleitung	47
5	Kanonische Operatoren	50
6	Die magnetische Translations-Gruppe	53
7	Magnetische Felder in Tight-Binding	57
7.1	Peierls-Phase und Peierls-Substitution	57
7.2	Erweiterung der Peierls-Phase auf nichtprimitive Gitter	58
7.2.1	Lokale Hamilton-Matrixelemente	59
7.2.2	Hopping-Matrixelemente	61
7.3	Periodizität der Hopping-Matrixelemente	63
7.3.1	Symmetrische Eichung	64
7.3.2	Asymmetrische Eichung	66
8	Die magnetische Punkt-Gruppe	68
8.1	Symmetrien der Peierls-Phase	68
8.1.1	Drehungen um die Magnetfeldachse	69
8.1.2	Spiegel-Symmetrien	69

8.1.3	Zeitumkehr-Symmetrie	69
8.2	Symmetrien des gesamten Hamilton-Operators	71
8.2.1	Zinkblende-Kristall im [001]-Magnetfeld	73
8.2.2	Zinkblende-Kristall im [011]-Magnetfeld	75
8.3	Symmetrie-Operationen bei asymmetrischer Eichung	76
9	Klassifikation der Zustände	80
9.1	Magneto-Transfermatrix für s -artige Bänder	81
9.2	Näherung für kleine Magnetfelder	84
9.3	Bandkanten nahe Zustände	87
9.4	Vergleich mit numerischen Lösungen	87
10	Ableitung der dielektrischen Funktion in Tight-Binding	89
10.1	Der elektromagnetische Störterm im Kontinuumsmodell	90
10.2	Der Stromdichte-Operator in Tight-Binding	92
10.3	Ableitung der Kubo-Formel im Magnetfeld	97
10.4	Die Korrelationsfunktion für $T > 0$ im Matsubara Formalismus	98
10.5	Suszeptibilität	101
10.6	Zusammenhang mit messbaren Größen	102
11	Implementierung	105
11.1	Einheitszellen von Zinkblende-Gittern im Magnetfeld	105
11.1.1	Feld parallel zur [001]-Achse	105
11.1.2	Feld parallel zur [011]-Achse	108
11.2	Berechnung der magnetischen Bandstruktur	108
11.2.1	Numerik	108
11.2.2	Rationalitätsbedingung	110
11.3	Berechnung der Suszeptibilität	111
11.3.1	Bestimmung der Polarisations-Vektoren	112

11.3.2 Brillouin-Zonen Integration	113
11.4 F-Summen-Regel	114
11.5 Überprüfung der Auswahlregeln der Absorption	115
11.5.1 Magnetoabsorption im Enveloppen-Modell	116
11.5.2 Vergleich mit den numerischen Ergebnissen	118
11.6 Effektiver g -Faktor in Tight-Binding	121
12 Anwendung: Elektronische Struktur von Halbleitern	124
12.1 Magnetobandstruktur von GaAs	124
12.1.1 Das Leitungsband	125
12.1.2 Das Valenzband	128
12.1.3 Einfluss der Magnetfeldrichtung	128
12.1.4 Effektive Masse	129
12.1.5 Absorptionsspektren	131
12.1.6 Effektiver g -Faktor	135
12.2 Elektronische Struktur von GaSb	136
12.2.1 Leitungsbandkanten von GaSb	136
13 Anwendung: Fraktale Energiespektren in 2D und 3D	139
13.1 Der Hofstadter-Schmetterling	139
13.1.1 Zweidimensionales Elektronengas	139
13.1.2 Dreidimensionales Elektronengas	140
13.2 Fraktales Spektrum in GaAs Volumenmaterial	143
13.2.1 Eigenenergien am Γ -Punkt	143
13.2.2 Absorption	144
Zusammenfassung	145
A Freie Elektronen im Magnetfeld	147

B Bahn-Komponente des Stromresponses	151
C Stromdichte und Ladungserhaltung	154
D Nomenklatur	157
Eigene Veröffentlichungen	159
Literaturverzeichnis	160
Danksagung	167

EINLEITUNG

Seit den Anfängen der Festkörperphysik waren elektrische und magnetische Felder elementare Werkzeuge zur Untersuchung elektronischer Struktur-Eigenschaften der Festkörper. Um Experimente mit zuverlässigen Vorhersagen anzuregen und für das Verständnis der oftmals komplexen experimentellen Resultate ist ein adäquates elektronisches Strukturmodell unumgänglich. Die in dieser Arbeit eingesetzte empirische Tight-Binding (TB) Methode ist hier die ideale Ausgangsbasis: Erstens erlaubt sie durch ihre numerische Effizienz realistische Bandstrukturen auch von größeren Systemen wie Heterostrukturen oder magnetischen Einheitszellen zu berechnen. Zweitens erleichtert ihre physikalische Transparenz die Interpretation der Ergebnisse signifikant.

Im ersten Teil dient das Tight-Binding Modell als Grundlage der streutheoretischen Beschreibung des elektrischen Transports. Untersucht werden zum einen resonante Tunnelstrukturen auf Metall (CoSi_2) / Isolator (CaF_2) Basis. Diese Quanten-Schalter sind kommerziell wie wissenschaftlich von großem Interesse: Wegen der rapide voranschreitenden Miniaturisierung der Halbleiter-Bauelemente ist abzusehen, dass in etwa zehn bis 15 Jahren ein Regime erreicht wird, in dem die seit Beginn der industriellen Halbleiter-Fertigung genutzten MOS-Strukturen nicht weiter verkleinert werden können, da Quanteneffekte und statistisch verstreute Dotier-Atome zu Fluktuationen in den Bauelement-Charakteristika führen. Um diese Grenze zu überwinden müssen Quanteneffekte zumindest berücksichtigt, am besten aber ausgenutzt werden.

Die untersuchten Strukturen basieren auf wenige Atomlagen dicke Metall / Isolator-Schichten, welche auf eine Siliziumoberfläche aufgewachsen werden. Durch Kontaktieren der einzelnen Schichten lassen sich Tunnel-Dioden, -Transistoren und sogar NAND-Gatter realisieren. Die außergewöhnlich hohen Leitungsband-Offsets der CaF_2 -Barrieren in Verbindung mit den extrem dünnen Quantenfilmen lassen den kohärenten elektrischen Transport selbst noch bei Raumtemperatur dominieren, was zu Schaltzeiten im Terrahertz-Bereich führen sollte. Zusammen mit der möglichen hohen Integrationsdichte besitzen sie das Potenzial als Prototyp

neuartiger Quanten-Bauelemente für hochintegrierte logische Gatter zu dienen.

Wie sich herausstellt, ist eine realistische Beschreibung der CoSi_2 -Bandstruktur unerlässlich für das Verständnis der Strom-Spannungs-Charakteristiken, da der Resonanzpfad der Tunnelioden unerwartet komplex und von den stark lokalisierten Co- d -Orbitalen dominiert ist.

Mit einer kleinen Modifikation kann das Streumodell auch dazu verwendet werden, ballistische-Elektronen-Emissions-Mikroskopie (BEEM) zu beschreiben. Von besonderem Interesse ist hier der Einfluss von Grenzflächen-Zuständen an den Kontaktstellen stark unterschiedlicher Materialien wie Au/GaAs auf die transmittierten Elektronen. Hier zeigt sich, dass letztere zu Fokussierungs-Effekten im \mathbf{k}_{\parallel} -Raum führen können.

Der zweite Teil dieser Arbeit untersucht die Auswirkungen von Megagauß-Magnetfeldern auf die elektronischen und optischen Eigenschaften von Volumen-Halbleitern. Unter beachtlichem experimentellen Aufwand lassen sich mittlerweile gepulste Felder von bis zu 2800 Tesla erzeugen, was allerdings mit der Zerstörung der Probe einhergeht. Das rasche An- und Abschwelen des Magnetfeldes führt unvermeidlich zu hohen Induktions-Spannungen in den Messleitungen, was Experimente zum elektrischen Transport stark erschwert. Informationen über die elektronische Struktur der Probe lassen sich daher nur auf optischen Wege gewinnen.

Die Peierls-Phase erlaubt es Magnetfelder nichtperturbativ in das Tight-Binding Modell zu integrieren. Nicht berücksichtigt werden jedoch Modifikationen der einzelnen Orbitale sowie der Koppelungen durch das Magnetfeld. Dennoch erlaubt diese Methode die semi-quantitative Berechnung von Magnetobandstrukturen über 1000 T hinaus. Um einen Vergleich mit experimentellen Daten zu ermöglichen wird die lineare Response-Theorie im Tight-Binding Formalismus auf Festkörper im Magnetfeld erweitert und zudem die im Magnetfeld verbleibenden Symmetrie-Operationen herausgearbeitet. Die berechnete Absorption stimmt bis hinauf zu 700 T gut mit Experimenten überein. Zudem werden Vorhersagen gemacht, ob und in welchem Regime, Spuren des berühmten Hofstadter-Schmetterlings optisch in Volumen-Halbleitern gefunden werden können.

KAPITEL 1

EMPIRISCHES TIGHT-BINDING

Für die in dieser Arbeit behandelten Fragestellungen bezüglich des elektrischen und optischen Responses, ist ein adäquates Modell für die elektronische Struktur von großer Bedeutung. Die vorliegenden Problemstellungen legen die Wahl der empirischen Tight-Binding Methode nahe, weil deren physikalische Transparenz die korrekte Interpretation der numerischen Resultate vereinfacht. Darüberhinaus erleichtert die Reduktion der Basis auf wenige, lokalisierte Atom-Orbitale mit fester Symmetrie die Interpretation der Wellenfunktionen und hilft die involvierten Effekte zu verstehen. Zudem reduziert sich der numerische Aufwand gegenüber *ab-initio* Rechnungen substanziell, ohne dabei die Bandstruktur signifikant zu modifizieren, wie dies z.B. in $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methoden der Fall ist.

In diesem Kapitel soll das elektronische „Fundament“ der gesamten Arbeit kurz skizziert werden. Für eine eingehendere Behandlung des empirischen Tight-Binding Modells sei auf Ref. [1] verwiesen.

1.1. Empirisches Tight-Binding des ungestörten Kristalls

Ausgangspunkt im empirischen Tight-Binding ist ein kleiner Satz quasi-atomarer Orbitale $|I, \alpha\rangle$. Dabei ist $I(L, \lambda)$ ein Positionsindex, der sowohl die Einheitszelle L als auch das Basisatom λ bestimmt. Eine 0 statt I bezeichnet ein am Ursprung lokalisiertes Orbital. Im Magnetfeld bilden viele konventionelle Einheitszellen eine so genannte magnetische Einheitszelle (MEZ). Die einzelnen Einheitszellen innerhalb der MEZ werden mit einem zusätzlichen Index m versehen, der in den Positionsindex $I(L, m, \lambda)$ integriert wird. Im Magnetfeld spezifiziert L die magnetische Einheitszelle.

Der zweite Multi-Index $\alpha (\lambda, \beta, s)$ definiert die lokale Symmetrie $\beta \in \{s, p_x, p_y, p_z, d_{xy}, \dots\}$ sowie den Spin $s \in \{\uparrow, \downarrow\}$ der Wellenfunktion. Um ein unnötiges Aufblähen der Gleichungen mit Indizes zu vermeiden wurde auch in α der Basisatom-Index λ aufgenommen. Bei Summen über I und α wird aber nur einmal über alle Basisatome summiert. Der Spin-Index deutet an, dass die Orbitale $|I, \alpha (\lambda, \beta, s)\rangle$ Spinoren mit definiertem σ_z Eigenwert sind, also z.B.

$$|I, \alpha (\lambda, \beta, s = \uparrow)\rangle = \begin{pmatrix} |I, \lambda, \beta\rangle \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

Wie Löwdin [2] zeigen konnte ist es möglich, diese quasi-atomaren Orbitale zueinander und zu verschiedenen Gitterplätzen (\mathbf{R}_I) zu orthogonalisieren, ohne dabei die Symmetrie-Eigenschaften zu zerstören:

$$\langle I, \alpha | I', \alpha' \rangle = \langle 0, \alpha (\lambda, \beta, s) | T_{-\mathbf{R}_I + \mathbf{R}_{I'}} | 0, \alpha' (\lambda', \beta', s') \rangle = \delta_{L, L'} \delta_{\lambda, \lambda'} \delta_{\beta, \beta'} \delta_{s, s'} \quad (1.2)$$

Mit \mathbf{R}_I wurde die Summe aus Gittervektor \mathbf{R}_L und Basisvektor $\boldsymbol{\tau}_\lambda$ bezeichnet. Aus den quasi-atomaren Orbitalen konstruiert man durch Superposition Eigenfunktionen des Hamilton-Operators H und des Translations-Operators $T_{\mathbf{R}}$. Die neuen Quantenzahlen dieser Blochfunktionen sind der Wellenvektor \mathbf{k} und der Bandindex n :

$$|n, \mathbf{k}\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha n}(\mathbf{k}) |\alpha, \mathbf{k}\rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha n}(\mathbf{k}) \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_L e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_L} |I, \alpha\rangle \quad (1.3)$$

In der Normierung des Zustands taucht wie üblich die Zahl N der Einheitszellen im Kristall auf. Die Entwicklungs-Koeffizienten der Blochfunktionen $C_{\alpha n}(\mathbf{k})$ erhält man durch Lösen der zugehörigen Säkulargleichung $H |n, \mathbf{k}\rangle = E_n(\mathbf{k}) |n, \mathbf{k}\rangle$. Der effektive Einteilchen-Hamilton-Operator $H = T + V_{\text{eff}}$ setzt sich aus einem kinetischen Term T und einem effektiven Potenzial V_{eff} zusammen, in das soweit wie möglich alle Vielteilchen-Effekte absorbiert wurden.

Die Besonderheit des empirischen Tight-Binding ist, dass weder V_{eff} noch die Orbital-Wellenfunktionen $|I, \alpha\rangle$ bekannt sind. Einzig die *Hamilton-Matrixelemente* zwischen zwei Orbitalen

$$\langle I, \alpha | H | I, \alpha \rangle = \epsilon_{\alpha}, \quad (1.4)$$

$$\langle I, \alpha | H | I', \alpha' \rangle = t_{I\alpha, I'\alpha'}(\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I) \quad (1.5)$$

sind die Parameter des Systems [3]. Sie werden also nicht aus Fundamental-konstanten berechnet, sondern durch Anpassen der Bandstruktur entlang von Hochsymmetrie-Linien an *ab-initio* Rechnungen und Messgrößen bestimmt. Bekannte Schwächen der einzelner Methoden werden somit eliminiert und ihre Stärken in diesem empirischen Modell kombiniert. So kann z.B. die Dispersion der Bänder einer Pseudopotenzial-Rechnung und die Bandlücke Absorptions-Experimenten entsprechen. Wichtig ist dabei lediglich, dass die Parameter in einen physikalisch sinnvollen Bereich fallen, d.h. die Orbital-Energien sollten den chemischen Trends folgen und in der Nähe des jeweiligen isolierten Atoms liegen. Wird dies nicht beachtet können abgeleitete Größen, wie das Impuls-Matrixelement, Artefakte aufweisen.

Die Gleichungen (1.4,1.5) lassen bei einer hinreichend großen Zahl von Orbitalen prinzipiell beliebig genaue Lösungen zu. Aus Effizienzgründen werden jedoch eine Reihe von Vereinfachungen vorgenommen:

- Durch Reduktion der verwendeten Zustände auf eine *kleine Basis* (4–20 Zustände pro Atom) kann der numerische Aufwand drastisch reduziert werden ohne dafür starke Abweichungen im relevanten Energiebereich in Kauf nehmen zu müssen. Dabei wird für die oberen Valenzbänder und für die niedrigsten Leitungsbänder jeweils nur *ein* Zustand in die Basis aufgenommen [4]. Realistische Bandstrukturen erhält man folglich auch nur in einem Intervall um die Fermikante.
- Gl. (1.5) lässt zwar Koppelungen zwischen beliebig weit entfernten Atomen zu, jedoch werden diese bei lokalisierten Orbitalen rasch klein. Für die meisten Verbindungen kann man sich sogar auf die *Koppelungen zu den nächsten Nachbarn* beschränken, was die Anzahl der freien Parameter und die Willkür in ihrer Wahl deutlich einschränkt. Zudem wird das Anschließen zweier Kristalle an Hetero-Grenzflächen entscheidend vereinfacht.
- Über das effektive Potenzial enthalten die Hamilton-Matrixelemente in Gl. (1.5) Drei- und Vier-Zentren-Terme, die jedoch vom Betrag her kleiner sind als diejenigen zu einem oder zwei Gitterplätzen. Vernachlässigt man Ersterer, bekommt V_{eff} den Charakter eines zweiatomigen Moleküls. Das Potenzial besitzt dann die Form einer Doppelmulde an den beteiligten Atomen. Durch Bildung geeigneter Linear-Kombinationen der Orbitale erhalten die Wellenfunktionen einen definierten Drehimpuls entlang der Kernachse. (σ -, π - und δ -Bindungen)

1.1.1. Spin-Bahn-Koppelung

Enthält eine Verbindung schwere Atome oder wirken externe Magnetfelder, ist die Berücksichtigung relativistischer Effekte, insbesondere der Spin-Bahn Koppelung, unerlässlich. Letztere kann näherungsweise durch den Störterm

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \nabla V \times \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (1.6)$$

beschrieben werden [5]. Mit m , c und $\boldsymbol{\sigma}$ wurde dabei die Elektronenmasse, die Lichtgeschwindigkeit bzw. die Pauli-Spinmatrix bezeichnet¹. Für ein radialsymmetrisches Potenzial $V(r)$ kann der Spin-Bahn Koppelungsterm als Vektor-Produkt zwischen dem Bahndrehimpuls \mathbf{L} und dem Spin $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ geschrieben werden:

$$H_{SO} = \frac{1}{2m^2c^2r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (1.7)$$

Um spinabhängige Korrekturen in das Tight-Binding Schemata einzubinden, [6] müssen die Matrixelemente von H_{SO}

$$\left\langle I, \alpha \left| T_{\tau_{\lambda'}} \frac{\hbar}{4m^2c^2r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right| 0_{\lambda'}, \alpha' \right\rangle \quad (1.8)$$

in die Hamilton-Matrix aufgenommen werden. Letztere koppeln die beiden Spinorräume $s \in \{\uparrow, \downarrow\}$ miteinander. Aufgrund der Lokalisierung kann man sich auf Beiträge zum gleichen Atom beschränken und die Matrixelemente der d -Orbitale vernachlässigen. Die von Null verschiedenen Beiträge sind dann Matrixelemente zwischen p -Orbitalen von der Form:

$$\langle I, p_x, \uparrow | H_{SO} | I, p_z, \downarrow \rangle = \frac{1}{3} \Delta_\lambda \quad (1.9)$$

$$\langle I, p_x, \uparrow | H_{SO} | I, p_y, \downarrow \rangle = i \frac{1}{3} \Delta_\lambda \quad (1.10)$$

wobei $\frac{1}{3}\Delta_\lambda$ der Spin-Orbit Koppelungs-Parameter des Atoms λ ist.

1.1.2. Parametersätze

Die Qualität der Bandstrukturen hängt allein von dem verwendeten Modell und den Parametersätzen ab. Für alle Halbleiter wurden daher die $sp^3d^5s^*$ -Parametersätze von Jancu *et al.* [7] verwendet. Sie zeichnen sich vor allem dadurch aus,

¹Zur Nomenklatur siehe auch Anhang D

dass die energetische Lage der Leitungsband-Seitentäler sowie alle effektiven Massen und g -Faktoren gut mit experimentellen Daten sowie *ab-initio* Rechnungen übereinstimmen. Entscheidend sind diese Kenngrößen für den Transport und das Band-Mischen bei hohen Magnetfeldern.

Für die Metalle Au und CoSi_2 wurden die in Ref. [8] bzw. Ref. [9] angegebenen Parameter verwendet, während für die Isolatoren CaF_2 und CdF_2 die in Ref. [10] abgeleiteten sp^3s^* - bzw. ss^* -Parameter eingesetzt wurden.

1.2. Inkorporation von Störungen und Felder

Die Volumen-Eigenschaften der Kristalle im Gleichgewicht sind in dieser Arbeit lediglich die Ausgangsbasis zur Beschreibung externer Störungen des Gitters. In welcher Weise Störungen in den Tight-Binding Formalismus integriert werden können, wird in dem folgenden Abschnitt kurz skizziert.

1.2.1. Grenzflächen

Die Tight-Binding Methode beschreibt den Kristall auf atomistischer Ebene und benötigt daher für die korrekte Inkorporation von Grenzflächen neben Informationen über den Verlauf von Kontinuums-Größen, wie z.B. Bandkanten, auch Kenntnisse über mögliche Rekonstruktionen, Relaxationen und die genaue Stapelungsfolge der Atome. Obwohl die letzteren Eigenschaften eine wichtige Rolle für den elektrischen Transport spielen, soll erst im konkreten Fall darauf eingegangen werden, da man hier auf aussagekräftige Experimente oder *ab-initio* Rechnungen angewiesen ist.

Kritisch sind die Koppelungen an den Grenzflächen unterschiedlicher Kristalle, da sie nicht an bekannte Volumen-Eigenschaften angepasst werden können. Üblicherweise werden die Koppelungen beider Materialien gemittelt oder es wird auf die universellen Koppelungen [1, 4] zurückgegriffen.

Die für den Transport dominante Grenzflächen-Eigenschaft ist wohl der Bandkanten-Verlauf. Ist dieser aus experimentellen Daten bekannt, können die Bandstrukturen durch Verschieben der Orbital-Energien $\epsilon_{I,\alpha} \rightarrow \epsilon_{I,\alpha} - e\Phi(\mathbf{R}_I)$ aneinander angepasst werden. Da im Allgemeinen die aneinandergrenzenden Kristalle unterschiedliche Gitterkonstanten besitzen, kommt es an Heteroübergängen zusätzlich zu Verspannungen.

1.2.2. Verspannungen

Zur näherungsweise Bestimmung der Koppelungs-Elemente $t_{\alpha\alpha'l}$ in Halbleitern mit sp^3 -Bindungen verglichen Froyen und Harrison [11] analytische Tight-Binding Ausdrücke an hoch-symmetrischen \mathbf{k} -Raum Punkten mit der Bandstruktur des freien Elektronengases. Aus der Bedingung, dass die maximalen Energielücken übereinstimmen, ergab sich folgende Bestimmungsgleichung der Koppelungsterme:

$$t_{I\alpha,I'\alpha'} = \eta_{\beta,\beta'} \frac{\hbar^2}{md^2}$$

Die universellen Parameter $\eta_{\beta,\beta'}$ sind dabei nur Funktionen der Koppelungs-Orbitaltypen und nicht der beteiligten Atome. Als einzige materialspezifische Größe geht der Abstand der Kerne d ein. Vogl *et al.* [12] und Majewski und Vogl [13] erweiterten diese Theorie und zeigten, dass $t_{\alpha\alpha'l}$ für $\beta, \beta' \in \{s, p\}$ über einen großen Bereich hinweg mit d^{-2} skaliert.

Für Wechselwirkungen, an denen d -Orbitale beteiligt sind, wurden eine Reihe von Abhängigkeiten vorgeschlagen. Die umfassendste postulierte Harrison [14]. Realistische Approximationen liefern die universellen Abstands-Abhängigkeiten jedoch nur für Nächste-Nachbar Wechselwirkungen, da für weiter entfernt liegende Atome zunehmend der exponentielle Abfall der Wellenfunktionen zum Tragen kommt.

Von Bedeutung ist die Skalierung der $t_{\alpha\alpha'l}$ bei kleinen Abstandsänderungen zwischen den Atomen, wie sie bei Verspannungen auftritt. Zu Beachten sind dabei mögliche Aufspaltungen von ursprünglich symmetrieentarteten Koppelungen, falls die Kern-Verbindungslinien unterschiedliche Winkel mit der Dehnungsachse einschließen.

1.2.3. Ternäre Systeme

Im Falle ternärer Systeme kann bei hinreichend ähnlichen elektronischen Eigenschaften der beiden binären Grenzfälle zwischen deren Tight-Binding Parametern linear interpoliert werden. Diese Methode wurde z.B. bei $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ angewandt.

Prinzipiell lässt sich diese einfache Interpolations-Methode auch auf quarternäre Verbindungen ausdehnen.

1.2.4. Elektrische Felder

Eine wichtige Rolle spielen elektrische Felder in Bauelementen. Es ist daher notwendig, sie konsistent in die Rechnung aufzunehmen. Im Einteilchen-Bild wird die komplexe Elektron-Elektron-Wechselwirkung durch ein effektives (lokales) Potenzial angenähert, das zusammen mit dem externen Potenzial in $V(\mathbf{r})$ enthalten ist. Letzteres wird als bekannt vorausgesetzt.

In einem isolierten Atom ist die Wirkung eines nur schwach ortsabhängigen externen Potenzials Φ eine gleichmäßige Verschiebung der Orbital-Energien $\epsilon_{I\alpha}$ um $-e\Phi(\mathbf{R}_I)$, wobei e die Elementarladung ist. Analog dazu kann die Wirkung eines elektrischen Feldes im Festkörper und damit auch in beliebig komplexen Strukturen durch Addition des lokalen Potenzials zu den Orbital-Energien berücksichtigt werden:

$$\epsilon_{I,\alpha} \rightarrow \epsilon_{I,\alpha} - e\Phi(\mathbf{R}_I). \quad (1.11)$$

Die Wirkung auf die Gestalt der lokalisierten Wellenfunktionen und somit der Hamilton-Matrixelemente verschiedener Orbitale, sowie der Stark-Effekt werden hierbei außer Acht gelassen. Letztere sind aber auch nur bei extrem hohen Feldstärken von Bedeutung.

1.2.5. Ausblick: Magnetische Felder

Eine eichinvariante Inkorporation magnetischer Felder in den Tight-Binding Formalismus ist über die so genannte Peierls-Phase [15] möglich. Die nichtperturbative Behandlung von Feldern erlaubt die Berechnung von störungstheoretisch nicht zugänglichen Effekten, wie das Hofstadter-Spektrum [16]. Obwohl die Modifikation des Hamilton-Operators durch das Magnetfeld prinzipiell einfach ist, sind die daraus resultierenden Systeme und die hinter ihnen stehende Physik nichttrivial und stellen einen Schwerpunkt dieser Arbeit dar. Die eingehende Diskussion erfolgt in Kapitel 7.

Teil I

Resonanter vertikaler Transport in Heterostrukturen

EINLEITUNG

Thema des ersten Teils dieser Arbeit ist der kohärente, ballistische Transport durch Metall/Halbleiter-Heterostrukturen. Viele Arbeiten zu diesem Thema berücksichtigen zwar Dephasierungs-Effekte, z.B. über den Greensfunktions-Formalismus, oder sind in der Lage große Quantenregionen zu beschreiben, verwenden aber aus numerischen Gründen dazu meist einfache Bandstruktur-Modelle, wie die effektive Massen- oder die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie [17, 18, 19, 20]. Dies mag zwar für Strukturen wie GaAs/Al_xGa_{1-x}As-Heterostrukturen mit $x < 0,4$ gerechtfertigt sein, wird aber spätestens dann fraglich, wenn die Symmetrie der Bandkante innerhalb der Struktur wechselt, was z.B. bei GaAs/AlAs-Übergittern der Fall ist. Beim Transport durch metallische Schichten werden Bandstruktur-Effekte oft dominant. Es ist in diesen Fällen entscheidend, realistische Modelle für die elektronische Struktur zu verwenden. Da die untersuchten Systeme vertikale Ausdehnungen von nur wenigen Nanometern aufweisen, dominieren Quanteneffekte selbst bei Raumtemperatur. All diese Effekte können in einer streutheoretischen Beschreibung des elektrischen Transports [21, 22] innerhalb des Tight-Binding Formalismus [23] berücksichtigt werden. Diese Methode, die Gegenstand des zweiten Kapitels ist, wird im darauf folgenden Kapitel auf resonante Tunnel-Dioden aus Metall(CoSi₂)/Isolator(CaF₂)-Heterostrukturen angewandt. Hierbei zeigt sich, dass die Bandstruktur von Metallen zu unerwartet komplexen Effekten führen kann.

Im vierten Kapitel des ersten Teils wird die Methode leicht modifiziert, um damit ballistische Elektronen Emissions Experimente (BEEM) zu beschreiben. Es wird untersucht, wie sich Elektronen beim Übergang zwischen Materialien mit stark unterschiedlicher effektiver Masse (Au/GaAs) verhalten.

KAPITEL 2

STREUFORMALISMUS IN TIGHT-BINDING

In der Elementarteilchen-Physik stellt das Streuexperiment den mit Abstand wichtigsten und fast einzigen experimentellen Zugang zur subatomaren Welt dar. Deshalb wurden auf diesem Gebiet große Anstrengungen unternommen eine Theorie zu entwickeln, die es erlaubt, dem gestreuten Teilchen möglichst viel Information über die Wechselwirkung mit anderen Teilchen und eventuellen Resonanzen zu entlocken. Wichtig ist dabei jedoch, dass keine Dekohärenz während des Streuvorgangs auftritt. Eine Anwendung der Streutheorie auf Leitungselektronen in der Festkörperphysik wurde erst möglich, als es gelang Strukturen zu fertigen, deren Dimension vergleichbar mit der freien Weglänge der Elektronen ist. Messbar sind lediglich die Ströme durch die einzelnen Kontakte. Für den Vergleich mit dem Experiment ist daher eine Mittelung über eine Vielzahl verschiedener Streukanäle notwendig. An einer Beobachtung einzelner Streuereignisse ist man nicht interessiert.

2.1. Streuformalismus im Festkörper

Um diesen Formalismus auf eine Kristallstruktur anzuwenden [21, 22], stelle man sich der Einfachheit halber ein Bauelement mit nur zwei Terminals vor, wie es in Abbildung 2.1 dargestellt ist. Es besteht auf der linken Seite aus einem Kristall A mit konstanter Temperatur T_L und dem elektro-chemischen Potenzial μ_L . Auf der rechten Seite ist analog ein Kristall B mit T_R und μ_R . Die Terminals dienen als (thermodynamische) Reservoirs und bilden den Bereich der freien, asymptotischen Streuzustände $|\Psi\rangle_{in,out}$. Letztere sind aber die Blochzustände der jeweiligen Volumen-Materialien. Zwischen den Reservoirs ist die eigentliche aktive Zone eingeschlossen, die als Streubereich dient. In ihr erfolgt die Streuung zwischen

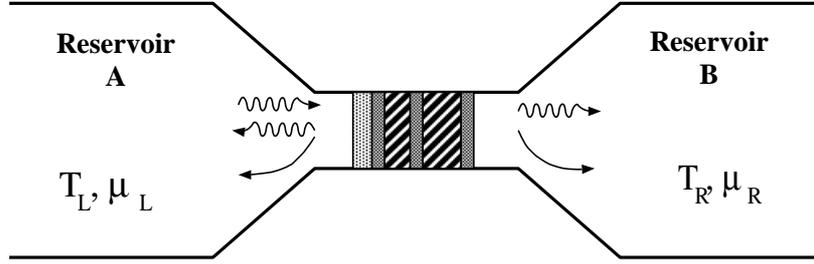


Abbildung 2.1: Im Streuformalismus betrachtet man den Streuer, der hier als schraffierte Heterostruktur angedeutet ist, eingebettet zwischen zwei oder mehr halb-unendlichen, sich im Gleichgewicht befindenden Reservoirs, die je eine feste Temperatur $T_{L,R}$ und ein Quasi-Fermi-Niveau $\mu_{L,R}$ besitzen.

den einzelnen Kanälen durch Wechselwirkung mit Grenzflächen, Gitterfehlern und elektrischen Feldern. Die Matrixelemente der Streumatrix S , welche die Zeitentwicklung lange vor bis lange nach dem Streuvorgang beinhaltet,

$$T_{k_L^+, n, s \rightarrow k_R^+, n', s'} = \langle k_L^+, n, s | S | k_R^+, n', s' \rangle \quad (2.1)$$

sind gerade die Übergangs-Amplituden zwischen zwei Blochzuständen $|k_L^+, n, s\rangle$ und $|k_R^+, n', s'\rangle$ mit dem Wellenvektor k_L^+ , Bandindex n und Spin s auf der linken Seite (Index L) und den entsprechenden Quantenzahlen k_R^+, n', s' auf der rechten Seite (Index R). Im Folgenden soll stets angenommen werden, dass der einfallende Zustand aus dem linken Kristall stammt und in der aktiven Zone in eine transmittierte Welle und einen reflektierten Anteil aufspaltet. Das Plus-Zeichen am Wellenvektor kennzeichnet nach rechts laufende Zustände; mit k^- wird analog ein Blochzustand mit negativer Gruppen-Geschwindigkeit bezeichnet.

Der Wahrscheinlichkeits-Strom, der mit einem Streuzustand assoziiert ist, ist gleich $|\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle|^2$ multipliziert mit dessen Gruppen-Geschwindigkeitskomponente in Wachstumsrichtung. Das S -Matrixelement für einen Übergang von einem Zustand a in einen Zustand b ist daher gleich dem Verhältnis der Amplituden des End- und Ausgangszustands $t_{a \rightarrow b}$ multipliziert mit der Wurzel aus dem Verhältnis der jeweiligen Gruppen-Geschwindigkeiten. Der Transmissionskoeffizient für den Übergang von $|k_L^+, n, s\rangle$ in einen beliebigen Blochzustand im rechten Kristall ist somit [24]:

$$T_{\mathbf{k}_L^+, n, s \rightarrow R} = \sum_{\mathbf{k}_R^+, n', s'} \left| t_{\mathbf{k}_L^+, n, s \rightarrow \mathbf{k}_R^+, n', s'} \right|^2 \frac{v_{\mathbf{k}_R^+, n', s'}}{v_{\mathbf{k}_L^+, n, s}} \quad (2.2)$$

Aus der Zeitumkehrsymmetrie (Mikroreversibilität) folgt, dass die Transmissionskoeffizienten zwischen zwei quantenmechanischen Zuständen und deren komplex konjugierte gleich sind:

$$\begin{aligned} \text{out} \langle b|S|a \rangle_{in} &= \text{out} \langle a|S|b \rangle_{in}^* \\ \left| t_{\mathbf{k}_L^+, n, s \rightarrow \mathbf{k}_R^+, n', s'} \right|^2 \frac{v_{\mathbf{k}_R^+, n, s}}{v_{\mathbf{k}_L^+, n', s'}} &= \left| t_{\mathbf{k}_R^-, n', s' \rightarrow \mathbf{k}_L^-, n, s} \right|^2 \frac{v_{\mathbf{k}_L^-, n', s'}}{v_{\mathbf{k}_R^-, n, s}} \end{aligned} \quad (2.3)$$

Es sollen in dieser Arbeit lediglich elastische Streuvorgänge betrachtet werden. Des Weiteren wird angenommen, dass die Heterostrukturen, die ja im Folgenden ausschließlich betrachtet werden, lateral eine perfekte Periodizität besitzen. Der Translations-Operator um einen Gittervektor \mathbf{R}_{\parallel} in der Wachstumsebene vertauscht dann mit dem Hamilton-Operator, was zur Folge hat, dass die Wellenvektor-Komponente senkrecht zur Wachstumsrichtung \mathbf{k}_{\parallel} eine Erhaltungsgröße ist. Die laterale Periodizitätslänge kann aber beliebig groß gewählt werden, so dass mögliche Grenzflächen-Rauigkeiten durch ein laterales Übergitter simuliert werden können. Die Erhaltung von \mathbf{k}_{\parallel} reduziert sich dadurch auf die des Übergitter-Vektors $\mathbf{k}'_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} + 2\pi n_1/L_1 + 2\pi n_2/L_2$, wobei $L_{1,2}$ die Periodenlängen und $n_{1,2}$ ganze Zahlen sein müssen. Gleichung (2.2) vereinfacht sich durch $(\mathbf{k}_{\parallel})_{in} = (\mathbf{k}_{\parallel})_{out}$, $s = s'$ zu:

$$T'_{L, n, s, k_{\perp, i}^+ \rightarrow R}(E, \mathbf{k}_{\parallel}) = \sum_{n', k_{\perp, j}^+} \left| t_{L, n, k_{\perp, i}^+ \rightarrow R, n', k_{\perp, j}^+} \right|^2 \frac{v_{R, n', \perp, j}}{v_{L, n, \perp, i}} \quad (2.4)$$

Mit $k_{\perp, i, j}$ und $i, j = 1, 2, \dots$ sind dabei die Wellen-Vektoren in Wachstumsrichtung zu festen $(E, \mathbf{k}_{\parallel}, s)$ bezeichnet. Falls ein Band mehrere Minima besitzt, können zu einem $(E, \mathbf{k}_{\parallel}, s)$ mehr als ein $k_{\perp, i}^+$ existieren.

2.2. Stromdichte

Um aus den Transmissionskoeffizienten die Stromdichte zu berechnen, müssen sie, gewichtet mit der Gruppen-Geschwindigkeit v des Ausgangszustands, über alle Zustände des Kristalls mit positiven v_{\perp} integriert werden. So ist die Stromdichte der Elektronen von links nach rechts in linearer-Antwort-Näherung gegeben durch [25, 26]:

$$j_{L \rightarrow R} = -e \sum_{s, n} \int_{\text{BZ}, v_{\perp} > 0} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} v_{\perp}(\mathbf{k}, n, s) f_L(E_{n, s}(\mathbf{k})) [1 - f_R(E_{n, s}(\mathbf{k}))] T_{n, s}(\mathbf{k})$$

Als zusätzliche Gewichtungsfaktoren wurden die Besetzungswahrscheinlichkeit des Ausgangszustandes f_L und die Verfügbarkeit der Ziel-Zustände $[1 - f_R]$ in den Integranden aufgenommen¹. Da sich beide Reservoirs definitionsgemäß im Gleichgewicht befinden, hängt ihre Verteilungsfunktion f nur von der Energie ab. Spaltet man das Integral über die Brillouin-Zone in einen Anteil parallel und senkrecht zur Wachstumsrichtung auf, benützt die Definition der Gruppen-Geschwindigkeit und führt man die Summation über den Spin aus², so ergibt sich:

$$j_{L \rightarrow R} = -\frac{2e}{(2\pi)^3 \hbar} \int_{BZ} d^2 k_{\parallel} dE \sum_{k_{\perp,i}, v_{\perp} > 0} T_{L, k_{\perp,i} \rightarrow R} f_L(E) [1 - f_R(E)] \quad (2.5)$$

Setzt man hierin Gl. (2.4) ein und bildet die Differenz mit der Stromdichte in die entgegengesetzte Richtung, erhält man zusammen mit der Zeitumkehrsymmetrie (Gl. (2.3)):

$$\begin{aligned} j &= j_{L \rightarrow R} - j_{R \rightarrow L} \\ &= \frac{-e}{4\pi^3 \hbar} \int_{BZ} d^2 k_{\parallel} dE \sum_{\substack{k_{\perp,i}, k_{\perp,j} \\ v_{\perp,i,j} > 0}} [f_L(E) - f_R(E)] |t_{k_{\perp,i} \rightarrow k_{\perp,j}}(E, \mathbf{k}_{\parallel})|^2 \frac{v_{\perp,j}}{v_{\perp,i}} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Interessanterweise ist die Stromdichte lediglich eine Funktion der Differenzen der Fermi-Verteilungen beider Reservoirs. Dadurch kann die Energie-Integration auf diejenigen Bereiche beschränkt werden, in denen $(f_L - f_R)$ merklich von Null verschieden ist. Man beachte aber, dass sich die Fermi-Verteilungen $f(E)$ jeweils auf das elektro-chemische Potenzial des Reservoirs beziehen, welches von der angelegten Spannung abhängig ist. Gleichung (2.6) dient als Grundlage zur Berechnung der Tunnelstromdichte. Die aus numerischer Sicht größte Schwierigkeit ist die dreifache Integration eines Integranden mit zahlreichen und oft sehr scharfen Transmissionsmaxima. Hierfür wurde ein adaptiver Algorithmus zur effizienten Integration entwickelt [23].

¹Die beiden Grenzzustände wurden dabei als entkoppelt angesetzt. Genau genommen betrachtet man in der zeitunabhängigen Streutheorie den Ausgangs- und Endzustand als *einen* Zustand, der daher auch nur *eine* Besetzungswahrscheinlichkeit hat. Wie man aber zeigen kann [24], führt obiger Ansatz auf identische Gleichungen.

²Da die verwendeten Bandstrukturen praktisch keine Spin-Bahn Aufspaltung aufweisen, wurde Letztere gänzlich vernachlässigt und alle Bänder als spinentartet angenommen.

2.3. Berechnung des Transmissionskoeffizienten in Tight-Binding

Die Streutheorie soll nun für den Fall planarer Heterostrukturen im TB Formalismus konkretisiert werden. Dazu stelle man sich das Bauelement in drei Bereiche unterteilt vor: Auf der linken Seite befindet sich ein Volumen-Material des Typs A, der den Bereich der *in-states* bildet, und auf der rechten Seite ein Volumen-Material des Typs B für *out-states*. Dazwischen liegt der eigentliche Streuer.

Zur numerischen Behandlung des Streuproblems muss die Struktur in N Schichten σ_i mit $i = 1, \dots, N$ gruppiert werden (vgl. Abb. 2.2), die zumindest so dick gewählt sind, dass TB-Koppelungen nur zwischen benachbarten Schichten auftreten und nicht zur übernächsten Schicht. Da der laterale Wellenvektor \mathbf{k}_{\parallel} erhalten

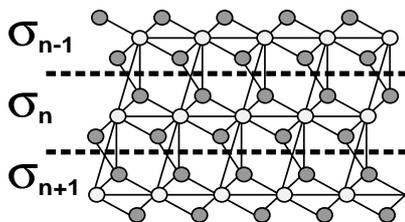


Abbildung 2.2: Das Bauelement wird entlang der Wachstumsrichtung in Schichten σ_i zerlegt, die mindestens so dick sein müssen, dass nur benachbarte Schichten miteinander koppeln. Die Koppelungen sind mit Linien angedeutet.

ist, empfiehlt es sich, aus den lokalisierten Atom-Orbitalen Wellenfunktionen zu konstruieren, die bereits Eigenfunktionen zur Quantenzahl \mathbf{k}_{\parallel} sind:

$$|\sigma, \alpha, \mathbf{k}_{\parallel}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\parallel}}} \sum_{\mathbf{R}_{\parallel}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{\parallel}} |\sigma, \alpha, \mathbf{R}_{\parallel}\rangle$$

Mit N_{\parallel} wird dabei die Zahl der Einheitszellen in den Schichten bezeichnet und α indiziert sowohl das Basisatom als auch das zugehörige Orbital. Diese Zustände bilden eine neue Basis, in der die entsprechenden Hamilton-Matrixelemente abgekürzt geschrieben werden, als:

$$(\mathbb{H}_{\sigma, \sigma'})_{\alpha, \alpha'} := \langle \sigma, \alpha, \mathbf{k}_{\parallel} | H | \sigma', \alpha', \mathbf{k}_{\parallel} \rangle \quad (2.7)$$

$$(\bar{\mathbb{H}}_{\sigma, \sigma'})_{\alpha, \alpha'} := \langle \sigma, \alpha, \mathbf{k}_{\parallel} | H - E | \sigma', \alpha', \mathbf{k}_{\parallel} \rangle \quad (2.8)$$

Matrixelemente zu verschiedenen \mathbf{k}_{\parallel} verschwinden genauso wie solche mit $\Delta\sigma \geq 2$. Aus den neuen Basis-Zuständen kann man wiederum die eigentlichen Streuwellenfunktionen bilden:

$$|\Psi, \mathbf{k}_{\parallel}\rangle = \sum_{\sigma, \alpha} C_{\sigma, \alpha}(\mathbf{k}_{\parallel}) |\sigma, \alpha, \mathbf{k}_{\parallel}\rangle$$

Damit $|\Psi\rangle$ eine Lösung des Streuproblems darstellt, muss es zu festen Randbedingungen die Schrödinger-Gleichung $(H - E)|\Psi\rangle = 0$ erfüllen. Multipliziert man Letztere mit dem Bra-Zustand $\langle\sigma, \alpha, \mathbf{k}_{\parallel}|$ und fasst man alle N_{σ} Koeffizienten $C_{\sigma, \alpha}$ der lateralen Einheitszelle zu festem \mathbf{k}_{\parallel} und σ zu einem Vektor \mathbf{C}_{σ} zusammen

$$\mathbf{C}_{\sigma} = \begin{pmatrix} C_{\sigma,1} \\ \vdots \\ C_{\sigma, N_{\sigma}} \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

erhält man die Schrödinger-Gleichung in Matrixform

$$\mathbb{H}_{\sigma, \sigma-1} \mathbf{C}_{\sigma-1} + \bar{\mathbb{H}}_{\sigma, \sigma} \mathbf{C}_{\sigma} + \mathbb{H}_{\sigma, \sigma+1} \mathbf{C}_{\sigma+1} = 0, \quad (2.10)$$

oder mit einer kleinen, formalen Erweiterung:

$$\begin{bmatrix} \bar{\mathbb{H}}_{\sigma, \sigma} & \mathbb{H}_{\sigma, \sigma+1} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{\sigma} \\ \mathbf{C}_{\sigma+1} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbb{H}_{\sigma, \sigma-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{\sigma-1} \\ \mathbf{C}_{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Innerhalb der Kontakte muss die Hamiltonmatrix mit geeigneten Randbedingungen terminiert werden. Wählt man die ersten und letzten beiden Schichten (σ_1, σ_2 bzw. σ_{N-1}, σ_N) im linken bzw. rechten Volumen-Material, ergeben sich folgende Randbedingungen für die TB-Komponentenvektoren \mathbf{C}_1 und \mathbf{C}_N : \mathbf{C}_1 enthält genau eine nach rechts propagierende Blochwelle und keine in die Kontakte hinein anwachsenden Zustände. \mathbf{C}_N enthält keine nach links propagierenden oder abfallenden Zustände. In die Kontakte hinein exponentiell abfallende Komponenten können natürlich ignoriert werden.

Um diese Randbedingungen in obige Matrix aufzunehmen, muss die „komplexe Bandstruktur“ mit zugehörigen TB-Komponenten-Vektoren der Volumen-Materialien berechnet werden. Dazu fordert man die auf komplexe k_{\perp} verallgemeinerte Blochbedingung zwischen den Koeffizienten-Vektoren zweier Volumen-Schichten

$$\mathbf{C}_{\sigma} = e^{ik_{\perp}d} \mathbf{C}_{\sigma-1}; \quad (\sigma - 1, \sigma) \in \{(1, 2), (N - 1, N)\}, \quad (2.12)$$

wobei d die Dicke der Elementarzelle in Wachstumsrichtung ist. Zusammen mit der Gl. (2.11) erhält man eine Eigenwert-Gleichung, deren Lösung die gesuchte komplexe Bandstruktur ist:

$$\begin{bmatrix} \bar{\mathbb{H}}_{\sigma, \sigma} & \mathbb{H}_{\sigma, \sigma+1} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{\sigma} \\ \mathbf{C}_{\sigma+1} \end{pmatrix} = e^{ik_{\perp}d} \begin{bmatrix} -\mathbb{H}_{\sigma, \sigma-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{\sigma} \\ \mathbf{C}_{\sigma+1} \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Mit der Streulösung $(\mathbf{C}_1, \dots, \mathbf{C}_N)^T$ aus Gl. (2.16) lassen sich die transmittierten (\mathbf{t}) und reflektierten (\mathbf{r}) Komponenten der Streulösung berechnen:

$$\mathbf{t} = \begin{bmatrix} (\mathbb{D}_R^{-1})_{11} & (\mathbb{D}_R^{-1})_{12} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{N-1} \\ \mathbf{C}_N \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} (\mathbb{D}_L^{-1})_{21} & (\mathbb{D}_L^{-1})_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1 \\ \mathbf{C}_2 \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Da der Vektor \mathbf{I} und die Eigenvektoren normiert sind, entspricht \mathbf{t} dem Amplituden-Verhältnis der transmittierten zur einfallenden Welle. Den Transmissionskoeffizient zu festem $(E, \mathbf{k}_{\parallel})$ erhält man durch Summation über alle verbleibenden Zustände:

$$T(E, \mathbf{k}_{\parallel}) = \sum_{i=1}^{n_{Lr}} \sum_{j=1}^{n_{Rr}} |t_j(E, \mathbf{k}_{\parallel}, k_{\perp,i})|^2 \frac{v_{R,\perp,j}}{v_{L,\perp,i}} \quad (2.19)$$

Die Komponente der Gruppen-Geschwindigkeit in Wachstumsrichtung lässt sich mit dem Hellman-Feynman-Theorem aus den Eigenvektoren der Kontakt-Materialien berechnen [10]:

$$v_{\perp} = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [H, z] | \Psi \rangle = -\frac{2d}{\hbar |\mathbf{C}_{\sigma}|^2} \text{Im} (\mathbf{C}_{\sigma}^{\dagger} \mathbb{H}_{\sigma, \sigma+1} \mathbf{C}_{\sigma} e^{ik_{\perp}d}) \quad (2.20)$$

Zusammengenommen erlauben die Gleichungen (2.6, 2.13, 2.16, 2.17, 2.20) die Berechnung der Stromdichte zwischen zwei Kontakten zu gegebener Potenzial-Differenz.

KAPITEL 3

SILIZIUMKOMPATIBLE TUNNELBAUELEMENTE AUF $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$ BASIS

Das im letzten Kapitel erläuterte theoretische Fundament zur streutheoretischen Berechnung des Quantentransports wird in den folgenden zwei Kapiteln auf zwei sehr unterschiedliche Systeme angewandt. Gemeinsam ist diesen, dass der elektrische Strom vertikal durch ein mehr oder weniger homogenes 2D Schicht-System fließt und von Nichtgleichgewichtselektronen und Quanteneffekten dominiert wird.

Die in diesem Kapitel untersuchten Bauelemente sind planare, auf einem (111)- oder (001)-Silizium-Substrat epitaktisch gewachsene Metall (CoSi_2) / Isolator (CaF_2) Heterostrukturen. Als Kontakte dienen auf der einen Seite das n-dotierte Silizium-Substrat und auf der anderen eine dickere CoSi_2 Schicht. Je nach untersuchtem Bauelement werden hierbei zwei oder drei CaF_2 Barrieren zum Einsatz kommen, die dann einen oder zwei CoSi_2 Quantentröge einschließen.

Im ersten Abschnitt wird die für den elektrischen Transport entscheidende relative Lage der Bandkanten der einzelnen Material-Systeme sowie die Grenzflächen-Morphologie diskutiert. In den darauf folgenden zwei Abschnitten werden die Charakteristika resonanter Tunnelioden (RTD) mit zwei und drei Barrieren in Abhängigkeit verschiedenster Parameter untersucht.

3.1. Grenzflächen und Bandkanten

Die epitaktisch abgeschiedenen CoSi_2 und CaF_2 Schichten besitzen die so genannte Fluorit-Struktur (O_h^5), deren Einheitszelle in Abb. 3.1 abgebildet ist. Das zugrundeliegende Bravais-Gitter ist wie das Substrat kubisch-flächenzentriert (fcc), hat aber drei Basisatome. Konventionell wird das Kation auf den Gitterplatz gesetzt

während die beiden Anionen je eine viertel Raumdiagonale in entgegengesetzte Richtungen verschoben sind. Das Kation sitzt damit in der Mitte eines Kubus mit je einem Anion in den Ecken, während das Anion im Zentrum eines Tetraeders liegt, der durch die vier nächsten Kationen definiert ist. Das Kation ist damit achtfach, das Anion dagegen nur vierfach koordiniert. Beide Materialien können per Molekularstrahl-Epitaxie pseudomorph auf Si abgeschieden werden [28], was u.a. in den ähnlichen Raumtemperatur-Gitterkonstanten von CoSi_2 (5,356 Å), CaF_2 (5,462 Å) und Silizium (5,431 Å) begründet ist. CaF_2 ist ein direkter, stark ionischer Isolator mit einer ungewöhnlich großen Bandlücke von rund 12 eV und einer damit verbundenen hohen Durchbruch-Feldstärke von mehr als 20 MV/cm für dünne Schichten [28].

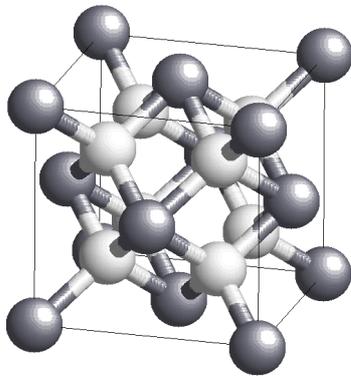


Abbildung 3.1: Konventionelle Einheitszelle der Fluorid-Struktur. Die dunklen (hellen) Kugeln symbolisieren die Kationen (Anionen). Zur Verdeutlichung der räumlichen Struktur wurden zwischen den nächsten Nachbarn zylindrische Verbindungen eingezeichnet.

Die CaF_2/Si Grenzfläche wurde in zahlreichen experimentellen [29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40] wie theoretischen [41, 42, 43] Arbeiten untersucht und ist daher weitgehend bekannt. Die Grenzflächen-Eigenschaften sollen speziell für den von Asada *et al.* [44] entwickelten Wachstumsprozess diskutiert werden.

Die 7×7 Rekonstruktion sauberer Si(111) Oberflächen verschwindet bei Absorption von CaF_2 Molekülen [36, 31, 30], so dass von einer rekonstruktionsfreien Grenzfläche ausgegangen werden kann. Die aufgewachsene CaF_2 Schicht hat eine so genannte Typ B Orientierung gegenüber dem Silizium (111)-Substrat, d.h. das fcc-Gitter des Fluorid Kristalls ist um 180° in [111]-Richtung gegenüber dem des Siliziums gedreht (s. Abb. 3.2) [31, 30, 35, 41]. Bei einer Wachstumstemperatur von etwa 770°C dissoziieren einige CaF_2 Moleküle und es bildet sich eine nichtstöchiometrische Ca/Si Grenzschicht aus, wobei Ca auf den T_4 -Plätzen, also genau in [111]-Richtung über dem Si-Atom der zweiten Schicht, mit einer Ca-Si Bindungslänge von ca. 3,12 Å [30, 31, 36] eingebaut wird. Die zur exakten Stöchiometrie fehlende Fluorid-Schicht ist entweder in das Silizium diffundiert oder wurde

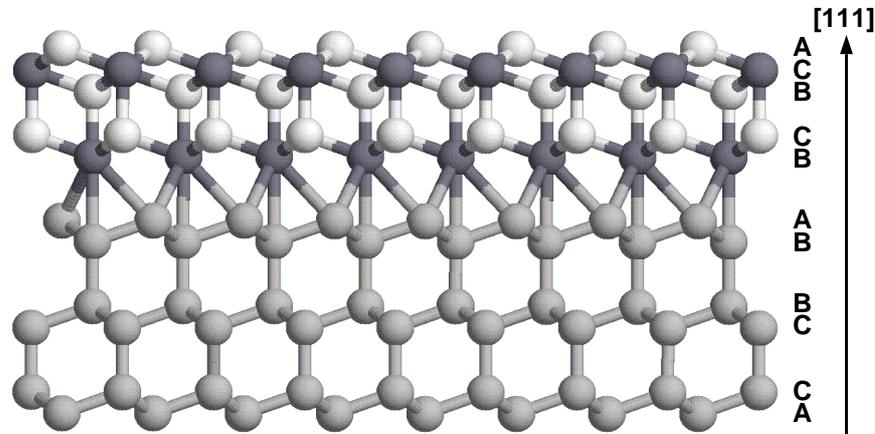


Abbildung 3.2: Wird CaF_2 auf einer $\text{Si}(111)$ Oberfläche bei Temperaturen um 770°C gewachsen, dissoziieren die CaF_2 Moleküle der ersten Schicht und Ca wird zuerst an einem T_4 -Platz, d.h. direkt über der zweiten Si-Lage eingebaut. Fluor, Silizium und Kalzium sind hell-, mittel- und dunkelgrau eingezeichnet. Die zylindrischen Verbindungen zwischen den Atomen dienen der Verdeutlichung der räumlichen Struktur.

Atom-Lagen	Si Si	-	Si Si Ca		F	-	F Ca F	-	F Ca F
Stapelung	C B	-	B A B		C	-	B C A	-	C A B

Tabelle 3.1: Stapelungsfolge an der Si/CaF_2 Grenzfläche in $[111]$ -Richtung. Mit A, B und C wurde die relative horizontale Position der atomaren Schichten bezeichnet.

während des Wachsens wieder desorbiert. Die weitere Schichtfolge entspricht der des Volumen Kristalls ($\text{Ca-F-F-Ca-F}\dots$). Zusammen mit der Typ B Orientierung ergibt sich die in Tabelle 3.1 angegebene Stapelfolge. Die Leitungsband-Offsets wurden für die Wachstumstemperatur von etwa 770° experimentell zu 2,2 bis 2,4 eV bestimmt [33, 34, 45].

Über die Grenze zwischen CoSi_2 und CaF_2 ist weniger bekannt. Aufgrund des speziellen Wachstumsprozesses¹ [44] und Total-Energy Rechnungen [43] kann von einem stöchiometrischen Wachstum ganzer Tripel-Lagen ausgegangen werden. Ex-

¹Um Agglomerationen zu vermeiden, werden Co und Si Monolagen separat gewachsen und erst durch das anschließende Tempern bildet sich der eigentliche Kristall aus. Die moderaten Wachstumstemperaturen Asadas verhindern eine Dissoziation der CaF_2 Moleküle beim Aufwachsen, so dass an der Grenzfläche von einer stöchiometrischen Ca-F-Si-Co Schichtfolge auszugehen ist.

Atom-Lage	F Ca F	-	F Ca F	-	Si Co Si	-	Si Co Si
Stapelung	B C A	-	C A B	-	C B A	-	B A C

Tabelle 3.2: Wie Tabelle 3.1 nur für die Grenzfläche zwischen CaF_2 und CoSi_2 Grenzfläche in $[111]$ -Richtung.

perimentell [32, 46] fand man analog zur CaF_2/Si Grenzfläche überwiegend eine Typ B Orientierung. Prinzipiell kommen zwei Stapelungsfolgen an der $\text{CaF}_2 / \text{CoSi}_2$ Grenze in Frage: $CAB | ACB$ und $CAB | CBA$. In der ersten Variante, die in den Arbeiten von Akai *et al.* [43] angenommen wurde, kommt es zu einem extrem kleinen Ca–Si Abstand von nur 2,3 Å, der deutlich unter den 3,1 Å im CaSi_2 Volumen-Material liegt. Die Co–F Bindungslänge erscheint dagegen mit 3 Å zu groß, verglichen mit 2,03 Å in CoF_2 .

Bei der alternativen Stapelungsfolge $CAB | CBA$ ist dagegen sowohl die Ca–Si Bindungslänge mit 3,2 Å, als auch der Co–F Abstand mit 2,3 Å nahe dem Gleichgewichtswert im Volumen-Material. Dieser Vergleich legt nahe, dass die beiden Verbindungen mit einem geringen Offset in der Stapelfolge von Tabelle 3.2 aufeinander wachsen. Da es meines Wissens keinerlei Experimente zu dieser Vermutung gibt, wird in den Rechnungen von dieser Grenzfläche ausgegangen.

Nimmt man an, dass sich CaF_2 als neutrale Barriere in $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2/\text{Si}$ verhält, kann mit Hilfe der Transitivitäts-Regel der Fermi-Energie/Leitungsband-Offset aus dem Bandkanten-Verlauf an der CaF_2/Si -Grenze und der Schottky-Barrieren-Höhe zwischen n-Si und CoSi_2 zu etwa 3,0 eV abgeschätzt werden. Dieser Wert liegt deutlich über dem mittels Austrittsarbeiten ermittelten Wert von 2 eV [44] und signifikant unter dem per LAPW-Rechnungen bestimmten Offset von 8,6 eV [43]. Allerdings ist der letzte Wert aus zwei Gründen fraglich: Zum einen wurde die energetisch sehr ungünstige und zudem *unrelaxierte* $CAB | ACB$ -Grenzfläche angenommen. Zum anderen wurde die in der Lokalen-Dichte-Näherung viel zu kleine CaF_2 Bandlücke von 7,8 eV allein durch eine Vergrößerung des Leitungsband-Offsets korrigiert. Aus EXX-Rechnungen ist aber bekannt, dass diese überwiegend auf einen falschen Valenzband-Offset zurückzuführen ist [47, 48, 49].

3.2. Zwei-Barrieren Strukturen

Die einfachste Struktur, die einen deutlich negativ differentiellen Widerstand ermöglicht, ist die zwei-Barrieren Tunneldiode (DBRTD) [23]. Exemplarisch wird folgende Struktur betrachtet: Auf dem n-dotierten (111)-Silizium Substrat ist

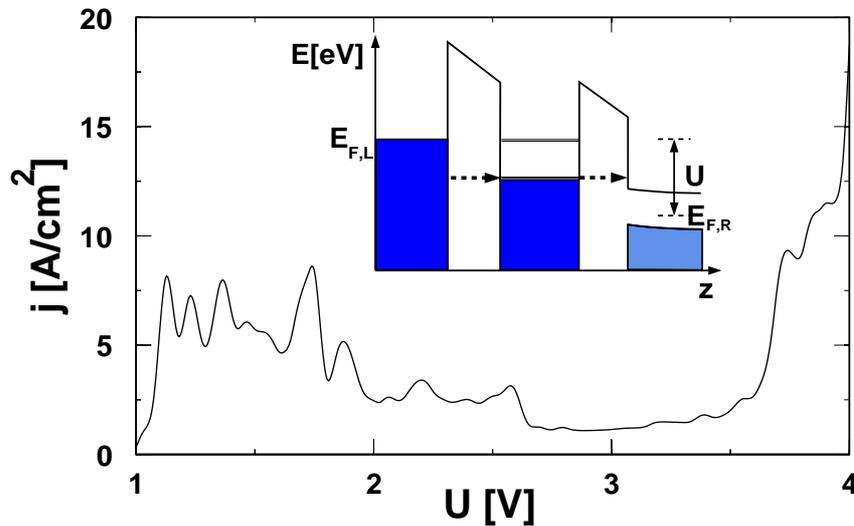


Abbildung 3.3: Die Strom-Spannungs-Charakteristik einer $\text{CaF}_2/\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$ resonanten Tunneldiode. Die Barrieren und der Topf haben eine Dicke von 4 bzw. 6 Tripel-Lagen. Verkleinert ist ein Leitungsbandkanten- bzw. Fermikanten-Diagramm entlang der Wachstumsrichtung dargestellt. Dunkel bzw. hell schattierte Flächen symbolisieren besetzte Zustände im CoSi_2 bzw. im Silizium Valenzband. Die gestrichelten Pfeile zeigen einen resonanten Tunnelpfad.

zunächst eine CaF_2 Barriere aufgewachsen, die gerade 1,2 nm oder vier Tripel-Lagen (TL) dick ist. An der Grenzfläche zu Si fehlt — wie im letzten Abschnitt erläutert — die erste Monolage Fluor. Auf diese Isolator-Schicht folgt ein 1,9 nm (= 6 TL) breiter CoSi_2 Topf und die zweite, ebenfalls vier TL dicke, CaF_2 Barriere. Als Kontakte dienen auf der einen Seite das hoch-dotierte Substrat und auf der anderen eine dicke CoSi_2 Schicht. Das zugehörige Bandkanten-Diagramm ist verkleinert in Abb. 3.3 eingefügt.

Die relativ komplexe Bandstruktur des Metalls CoSi_2 führt zu einer völlig anderen Strom-Spannungs-Charakteristik als bei Halbleiter-Heterostrukturen. Zum einen bietet der CoSi_2 Kontakt Elektronen jeder Energie unterhalb der Fermikante an. Im Gegensatz dazu emittiert z.B. ein n-dotierter Halbleiter bereits energetisch stark fokussierte Elektronen. Zum anderen gilt Ähnliches im \mathbf{k}_{\parallel} -Raum: Werden die zahlreichen Bänder in [111]-Richtung auf die zweidimensionale, hexagonale \mathbf{k}_{\parallel} -Brillouin-Zone projiziert, überdecken sie für viele Energien praktisch alle \mathbf{k}_{\parallel} -Werte. Auch hier besteht ein erheblicher Unterschied zu einem Halbleiter, der

i.d.R. aus nur einem oder wenigen symmetrieäquivalenten Tälern emittiert. Insgesamt wird also der metallische Kontakt den Tunnel-Strom über seine Zustandsdichte modulieren, aber im Energie/ \mathbf{k}_{\parallel} -Raum weniger stark selektiv wirken.

Teilweise selektiv wirkt dagegen das Silizium Substrat. Durch die Bandlücke und die n-Dotierung werden nur solche Elektronen die Struktur kohärent durchlaufen, die hinreichend Energie besitzen, um das Si-Leitungsband zu erreichen. Darüber hinaus wirken die Leitungsband-Täler für bandkantennahe Elektronen als \mathbf{k}_{\parallel} -Raum-Filter.

Der metallische Topf besitzt für fast alle Energien quasi-gebundene Zustände, was bereits aus der lateralen Dispersion der Topf-Zustände folgt. Die drei Bänder des CoSi_2 , welche die Fermikante schneiden, ermöglichen es den Elektronen, über zahlreiche Kanäle resonant zu tunneln.

Insgesamt weist die Tunnelstromdichte in Abb. 3.3 eine reiche Struktur ohne markantes Maximum auf. Die Transmissionsmaxima werden von einem relativ starken Hintergrund überlagert, so dass das „Spitzen zu Tal Verhältnis“ im Strom (P/V) vergleichsweise gering ist. Die zahlreichen Spitzen verhindern zudem einen Einsatz dieser Struktur als Bauelement, da sie zu unkontrollierbaren Instabilitäten führen. Für technische Anwendungen ist ein einziges Maximum mit deutlich größerem P/V und einem geringeren Untergrund wünschenswert. Um dies zu erreichen, muss ein zusätzlicher Filter für die tunnelnden Elektronen integriert werden.

3.3. Drei-Barrieren Tunnelnioden

Eine Struktur aus drei-Barrieren und zwei Töpfen (TBRTD) [10, 23, 50, 51, 52, 53] stellt eine sehr starke Restriktion für kohärentes Tunneln dar. Es ist daher zunächst fraglich, ob eine derartige Anordnung überhaupt zu signifikanten und hinreichend breiten Resonanzen führen kann. Ziel dieses Abschnittes ist es, dies zu untersuchen und den Ursprung eventueller Resonanzen zu diskutieren, sowie deren Stabilität gegenüber Variationen der Bauelement-Geometrie zu diskutieren.

Als konkretes Beispiel sei eine Struktur mit jeweils drei TL dicken CaF_2 Barrieren und zwei sechs und neun TL dicken CoSi_2 Töpfen betrachtet. Ihr Bandkanten-Diagramm ist in Abb. 3.4 dargestellt. Die außergewöhnlich große CaF_2 Bandlücke von über 12 eV ermöglicht trotz der vergleichsweise hohen abfallenden Spannungen eine Barrierendicke von unter einem Nanometer. Die gesamte aktive Tunnel-Struktur misst weniger als 8 nm, was deutlich kleiner ist als die typische Raum-

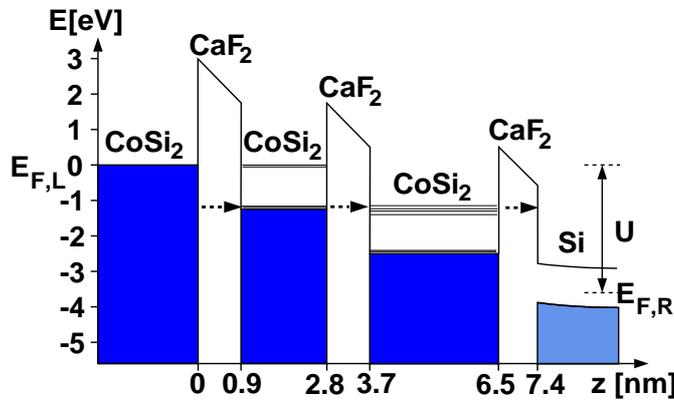


Abbildung 3.4: Das Band- und Fermikanten-Diagramm in Wachstumsrichtung für eine drei-Barrieren $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$ Tunnel-Struktur bei einer externen Spannung von 3,6 V. Auf der Abszisse ist die Dicke der einzelnen Schichten ersichtlich. Die horizontalen Linien symbolisieren die in Abb. 3.6 mit Pfeilen markierten dispersionsarmen quasi-gebundenen Zustände. Die Pfeile zeigen einen kohärenten Tunnelpfad.

temperatur-Dephasierungslänge in Metallen. Daher sollte für alle betrachteten Temperaturen der kohärente Transport dominieren. Abb. 3.5 vergleicht die berechnete Strom-Spannungs-Charakteristik der Struktur aus Abb. 3.4 mit der von Watanabe *et al.* [52] und Suemasu *et al.* [51] gemessenen. Die Theorie zeigt in hervorragender Übereinstimmung mit den Experimenten eine scharfe Resonanz bei etwa 3,6 V. Der absolute Strom, der wegen der exponentiellen Abhängigkeit von der Barrierenhöhe theoretisch nur schwer zu beschreiben ist, liegt vergleichsweise nahe an den Messungen. Das berechnete P/V ist mit 32 sehr hoch. Experimentell schwankt dieser Wert von Probe zu Probe sehr stark, erreicht jedoch in einem Bauelement bei 77 K ein P/V von 25. Der im Experiment beobachtete abrupte Einbruch der Stromdichte J wird von seriellen Widerständen verursacht, die in der Theorie nicht berücksichtigt sind. Kontakt- und Zuleitungs-Widerstände flachen den Anstieg etwas ab und verschärfen den negativ differentiellen Widerstand deutlich.

3.3.1. Ursachen des resonanten Transports

Angesichts der zahlreichen Bänder im CoSi_2 Volumen-Material (siehe Abb. 3.6(a)) ist das Zustandekommen der ausgeprägten Resonanz bei 3,6 V nicht a priori klar und soll im Folgenden eingehend diskutiert werden.

Ein Elektron kann aufgrund der Erhaltung der lateralen Wellenzahl \mathbf{k}_{\parallel} nur bestimmte Punkte der Bandstruktur erreichen. Um zu verdeutlichen, welche dies sind, zeigt Abb. 3.7 die Faltung der k -Raum Punkte der fcc-Brillouin-Zone bei Wahl einer hexagonalen Einheitszelle. Die Längsachse fällt hierbei mit der (111)-Wachstumsrichtung zusammen. Damit ergibt sich, dass bei Verwendung eines

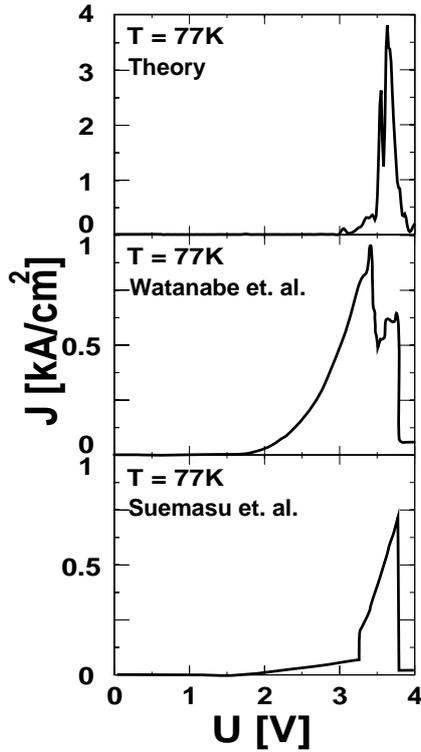


Abbildung 3.5: Berechnete (oben) und zwei gemessene Strom-Spannungs-Charakteristiken [52, 53] der Tunneldiode aus Abb. 3.4 bei 77 K. Zum Vergleich zwischen Theorie und Experiment wurde der experimentelle Strom über die bekannte aktive Bauelement-Fläche in eine Stromdichte umgerechnet.

(111)-Substrats zum Beispiel alle Punkte entlang der $\Gamma - L_{||}$ -Linie den gleichen $k_{||}$ -Wert (Γ) besitzen. Gleiches gilt für alle Punkte auf der $X - L_{\mu}$ -Verbindung (M).

Die laterale Dispersion eines 6 bzw. 9 TL breiten CoSi_2 Quantenfilms, der in einen CaF_2 Kristall eingebettet wurde, zeigt Abb. 3.6(b) bzw. (c). Die ineinander geschachtelten „Lochbänder“ des CoSi_2 Kristalls werden im Quantenfilm zu parabelförmigen Bändern gefaltet, die für zahlreiche scharfe, aber meist nur sehr schmale Transmissionsspitzen sorgen. Für dominante Resonanz bei 3,6 V ist jedoch folgender Pfad verantwortlich: Ausgangspunkt im CoSi_2 -Kontakt ist das flache Co- d -artige Band, etwa 1,2 eV unterhalb des Fermi-Niveaus um den X -Punkt (vgl. Abb. 3.6(a)). Von dort aus tunneln die Elektronen über den ca. 50 bis 100 meV oberhalb von E_F gelegenen Zustand in der Nähe des M -Punktes im ersten Quantentopf (Pfeil in Abb. 3.6(b)) zu den bei ca. 1,3 eV gelegenen Bändern im zweiten Quantentopf (Pfeil in Abb. 3.6(c)) und weiter in das Substrat. Da alle involvierten Bänder sehr flach sind, ergibt sich eine schmale und — durch die hohe Zustandsdichte — eine sehr ausgeprägte Resonanz.

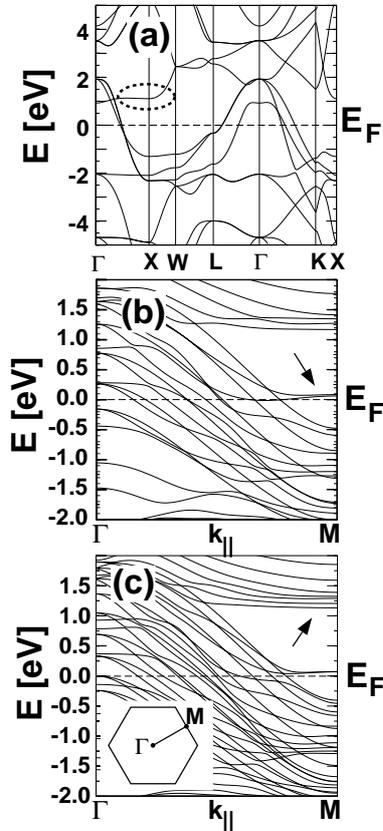


Abbildung 3.6: (a) Bandstruktur von Volumen- CoSi_2 in einem $sp^3d^5s^*$ -Tight-Binding Modell. Abbildung (b) und (c) zeigen die laterale Dispersion vom Γ - zum M -Punkt eines in CaF_2 Volumen-Material eingebetteten CoSi_2 Quantentopfs von sechs (b) bzw. neun (c) Tripel-Lagen Breite. Diese entspricht gerade dem ersten und zweiten CoSi_2 Film in Abb. 3.4. Die gestrichelte horizontale Linie markiert jeweils das Fermi-Niveau. Mit Pfeilen sind diejenigen Bänder gekennzeichnet, die für die scharfe Resonanz in Abb. 3.5 verantwortlich sind.

Das markierte Band im ersten Quantentrog stammt von einem Co- d -artigen Grenzflächen-Zustand an beiden Seiten der pseudomorphen $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$ Grenze. Da diese in Wachstumsrichtung lokalisierten Zustände nur dann den Transport unterstützen können, wenn sie miteinander koppeln, verschwindet die Resonanz mit zunehmender Topfbreite. Eine weitere Konsequenz ist, dass das Energieniveau dieses Zustandes nur schwach von der Breite des Troges abhängt. Der ebenfalls Co- d -artige, dispersionsarme Zustand im zweiten Quantentrog entsteht durch Faltung des in Abb. 3.6(a) eingekreisten Bandes im Volumen-Material.

Die für die Strom-Spitze ausschlaggebenden Niveaus sind in das Bandkanten-Diagramm in Abb. 3.4 symbolisch eingezeichnet. Bei der Resonanz-Spannung von 3,6 V liegen die diskutierten Zustände des Kontakts und der beiden Quantentröge energetisch auf dem gleichen Niveau und eine resonante, kohärente Transmission

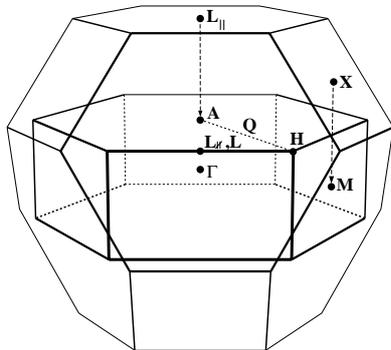


Abbildung 3.7: Wählt man eine hexagonale Einheitszelle in einem flächenzentrierten Kristall, wird der Γ -, X -, L -Punkt in Längsrichtung ($L_{||}$) und L_{\perp} jeweils auf den Γ -, M -, A - und L -Punkt der hexagonalen Brillouin-Zone gefaltet.

wird möglich.

Diese dreifach-Resonanz unterscheidet sich qualitativ von den bisher bekannten Mechanismen: Sie kommt durch weit von der Fermikante entfernt liegende Bänder zustande. Anders als die in Halbleitern üblichen s - oder p -artigen Bandkanten sind diese d -Zustände stark lokalisiert und ändern daher kaum ihre Energie mit der Topfbreite. Auch die Verteilung der Stromdichte im $\mathbf{k}_{||}$ -Raum ist komplexer als für Halbleiter-Heterostrukturen, wie die Transmissionsverteilung in Abb. 3.8 verdeutlicht. Zwar erkennt man deutlich die hohe Resonanz in der Nähe des M -Punktes (weiß), aber die zahlreichen Parabeln liefern einen komplexen Hintergrund, der sensitiv von der Energie und $\mathbf{k}_{||}$ abhängt. Dies erschwert die numerische Integration des Transmissionskoeffizienten erheblich.

3.3.2. Stabilität der Resonanz

Angesichts der nur aus wenigen Atom-Lagen bestehenden Schichten der RTD in Abb. 3.4 ist eine Kenntnis der Auswirkungen von Geometrie-Variationen auf die Kennlinie entscheidend. Sollte z.B. die Position der Resonanz empfindlich von den Schichtdicken abhängen, könnte dies zu einer breiten Streuung der Bauelement-Charakteristika führen oder sogar die Resonanz ausschmieren.

Rechnungen mit verschiedenen thermischen Verbreiterungen ergaben eine relativ geringe Temperaturabhängigkeit der Charakteristik, da die involvierten Bänder viele $k_B T$ von der Fermikante entfernt liegen und auch die Barrierenhöhe selbst bei Raumtemperatur etwa $100 k_B T$ beträgt. Im Folgenden wurde stets die auch in den meisten Experimenten gewählte Temperatur von 77 K angenommen.

Es soll noch einmal erwähnt werden, dass in dieser rein ballistischen Rechnung die

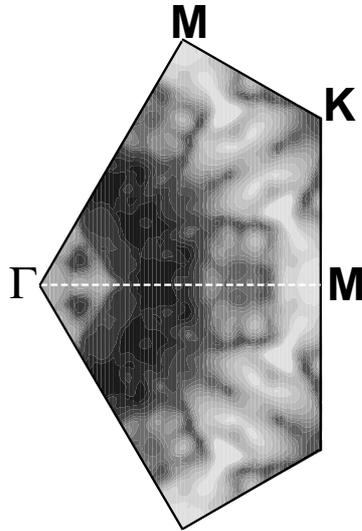


Abbildung 3.8: Berechneter Transmissionskoeffizient der $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$ Tunneldiode aus Abb. 3.4 in Resonanz und 1,3 eV unterhalb des linken Fermi-Niveaus als Funktion des lateralen Wellen-Vektors $k_{||}$. Deutlich erkennt man die C_{6V} -Symmetrie der [111]-Richtung des Kristalls. Je heller ein Bereich schattiert ist, desto größer ist die zugehörige Transmissionswahrscheinlichkeit.

Temperatur nur über die Fermi-Verteilung in die Simulation eingeht. Nicht berücksichtigt ist die Elektron-Phonon- und die Elektron-Elektron-Wechselwirkung.

Greensfunktions-Methoden, die diese Effekte inkorporieren können [20], zeigen eine Erhöhung des negativ differentiellen Widerstands und gleichen in der Wirkung einem seriellen Widerstand.

Variation der Topfbreite

Prozesstechnisch sind Fluktuationen von einer halben bis einer Tripel-Lage unvermeidlich. Es wurde daher untersucht wie sich die Modifikation der Quantentröge um ein bis zwei TL (je 0,31 nm) in der Kennlinie niederschlägt. Abb. 3.9 zeigt die Charakteristika von $(\text{CaF}_2)_3/(\text{CoSi}_2)_m/(\text{CaF}_2)_3/(\text{CoSi}_2)_n/(\text{CaF}_2)_3$ -RTDn mit $m = 5, 6$ und $n = 7, 9$. Zwar variiert die Form und Höhe der Resonanz, jedoch ist deren Position weitgehend konstant. Dieses erstaunliche Verhalten ist eine Konsequenz des d -Charakters der am Tunnelpfad beteiligten Bändern. Sie werden aus bereits stark lokalisierten Zuständen gebildet und ihre Energie ist daher weniger sensitiv auf Variationen in der Breite der Töpfe. Die Bauelement Charakteristika ändern sich damit nur geringfügig bei moderaten Schwankungen der Topf-Dimensionierung. Man beachte, dass der Spannungsabfall lediglich an den CaF_2 Schichten erfolgt.

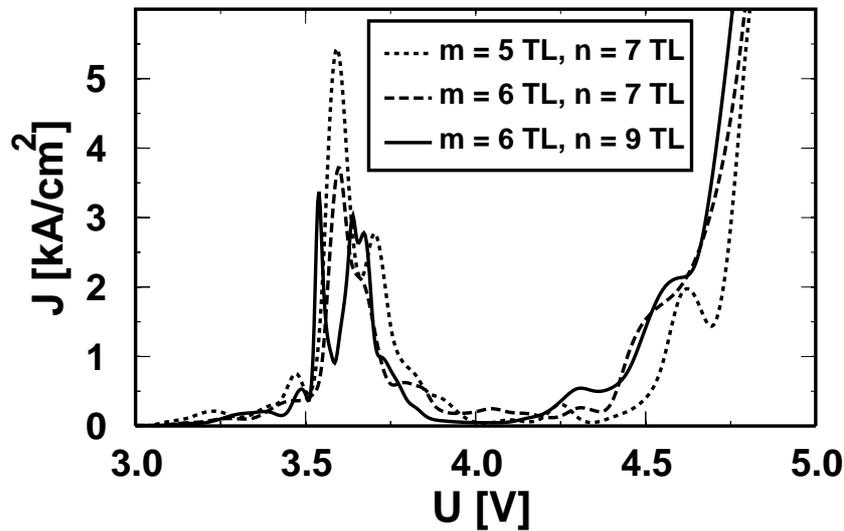


Abbildung 3.9: Berechnete Strom-Spannungs-Charakteristika von drei-Barrieren $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$ Tunneldioden mit unterschiedlicher erster (m) und zweiter (n) Topfbreite. Als Temperatur wurde jeweils 77 K angenommen. Die Barrieren waren stets 3 TL (0,9 nm) dick.

Gleich bleibend hoch ist auch das P/V-Verhältnis. In den weiteren untersuchten Varianten änderte sich diese Situation nicht. Fluktuationen der Topfbreite von wenigen TL sollten daher aus theoretischer Sicht einer Anwendung dieser Struktur als Bauelement nicht entgegenstehen.

Einfluss der Barrierendicke

Noch filigraner als die Töpfe sind die im Sub-Nanometer-Bereich gehaltenen Barrieren. Verringert man die Dicke der mittleren CaF_2 Schicht, fällt ein kleinerer Anteil der externen Spannung daran ab und die Resonanz verschiebt sich zu höheren Potenzial-Differenzen. Die einhergehende verstärkte Koppelung der Töpfe schlägt sich in einer tendenziell höheren Stromdichte nieder. Wird hingegen die Barrierendicke erhöht, vergrößert sich der Spannungsabfall zwischen den Töpfen und das Bauelement kommt früher in Resonanz. Zudem sollte die Stromdichte fallen.

Eben diese erwarteten Effekte zeigt Abb. 3.10. Die Resonanz wandert bei einer 2 TL Barriere bereits außerhalb des dargestellten Spannungs-Intervalls. Die hohen Stromdichten in diesem Fall führen zudem zu einer raschen Zerstörung der

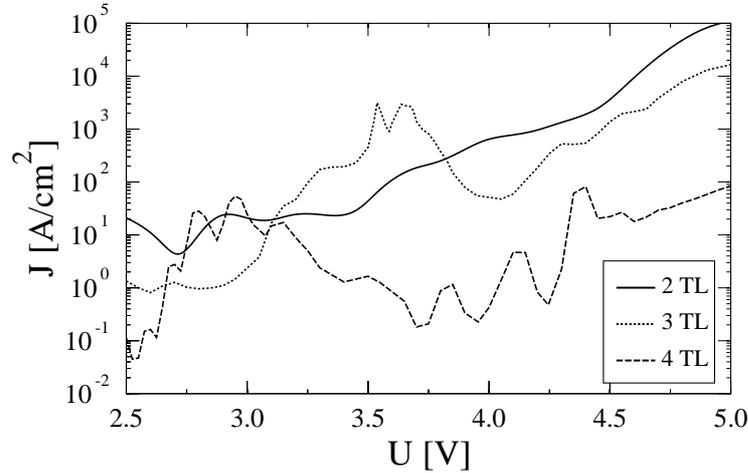


Abbildung 3.10: Strom-Spannungs-Charakteristika der TBRTD aus Abb. 3.4 für mittlere Barrieren von 2, 3 und 4 TL Dicke.

RTD. Eine Erhöhung der mittleren Barrierendicke auf 4 TL, senkt die Resonanzspannung auf rund 3 V und erniedrigt die Stromdichte im Maximum um rund zwei Größenordnungen. Wegen der exponentiellen Abhängigkeit des Transmissionskoeffizienten von der Barrierendicke wird die Stromdichte von den lokal dünnsten CaF_2 -Schichten dominiert. Bereiche mit vier statt drei TL Barriere modifizieren die Kennlinie nur gering, dünnere Barrieren werden aber das Bauelement unbrauchbar machen. Trotz des mittlerweile reichen Erfahrungsschatzes im Wachstum von CaF_2 Schichten, dürfte dies das technologisch am schwersten beherrschbare Problem sein. Ein Ausschmieren der Resonanz infolge lateraler Dicken-Fluktuationen ist aber aufgrund der hohen Leitfähigkeit der metallischen Quantentröge nicht möglich.

3.3.3. Substrat-Orientierung

Industriell wird mit Abstand am häufigsten (001)-Silizium als Substrat verwendet. Obwohl das Wachstum von CaF_2 und CoSi_2 auf (001)-orientiertem Silizium deutlich schwerer realisierbar ist als auf einer (111)-Si Oberfläche [28], ist für die Integration von Metall/Isolator-Bauelementen in die konventionelle MOS-Technologie eine Kompatibilität der Technologie zu verbreiteten Produktionslini-

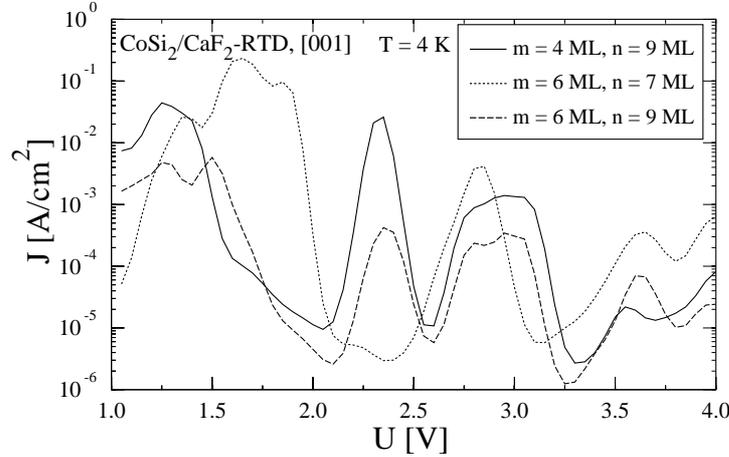


Abbildung 3.11: Strom-Spannungs-Kennlinie einer auf (001)-Si Substrat gewachsener $\text{CoSi}_2/\text{CaF}_2$ TBRTDn bei 4 K. Die Legende gibt die Anzahl der Monolagen des ersten (m) und zweiten (n) Quantentopfs an.

en wünschenswert. Da die detaillierte Wachstumskinetik den Rahmen dieser Arbeit übersteigt, soll lediglich untersucht werden, ob eine ideale in [001]-Richtung gewachsene Heterostruktur überhaupt resonanten Transport unterstützt und experimentelle Bemühungen in diese Richtung aus theoretischer Sicht lohnenswert erscheinen.

Durch die [001]-Substrat-Orientierung werden alle \mathbf{k} -Raum Punkte entlang der Γ - X_z -Linie der fcc-Brillouin-Zone auf den Ursprung im \mathbf{k}_{\parallel} -Raum projiziert. Ebenso kollabiert die Gerade zwischen den in Wachstumsrichtung gegenüberliegenden L -Punkten auf einen Punkt in derselben Projektion.

Abb. 3.11 zeigt die Strom-Spannungs-Charakteristika von TBRTDn bei 4 K mit jeweils 3 Monolagen (0,8 nm) CaF_2 . Die beiden CoSi_2 Töpfe sind jeweils m und n Monolagen breit, wobei eine Monolage CoSi_2 0,27 nm entspricht.

Die berechneten Strom-Spannungs-Charakteristika weisen je zwei bis drei relativ breite Resonanzen auf, deren Position mit Ausnahme der Resonanz um 2,8 V sensitiv von der Topfbreite abhängt. So wird die Resonanz bei 2,3 V von den Abmessungen des zweiten Quantentopfs bestimmt. Die Stromdichte liegt trotz der schmälere Barrieren im Mittel etwa vier Größenordnungen unterhalb der (111)-Strukturen von Abb. 3.9. Schmalere Isolatorschichten zur Erhöhung der Strom-

dichte verbieten sich wegen der begrenzten Durchbruch-Feldstärke von CaF_2 . Die für technische Anwendungen erforderlichen Stromdichten von wenigstens einem kA/cm^2 werden hier um einige Größenordnungen unterschritten. Zusammen mit den stark von der Geometrie abhängigen Kennlinien scheinen — aus theoretischer Sicht — Anstrengungen in diese Richtung wenig lohnend zu sein.

KAPITEL 4

ANALYSE VON AU/GAAS GRENZFLÄCHEN MITTELS BEEM

Gegenstand dieses Kapitels ist die theoretische Beschreibung der ballistischen Elektronen Emissions Mikroskopie (BEEM) [54, 55]. Prinzipiell ist BEEM eine auf drei Kontakte erweiterte Rastertunnel-Mikroskopie (STM), bei der heiße Elektronen aus einer STM-Spitze über eine dünne metallische Basis in einen Halbleiter tunneln und mittels eines Rückkontakts detektiert werden.

Ursprünglich wurde diese Methode zur Ermittlung der Schottky-Barrieren-Höhe [56, 57, 58, 59], später aber auch zum Studium von Bandoffsets [60] oder der Position höherer AlAs Leitungsbänder [56] verwendet.

Liegt zwischen Au-Film und Rückkontakt eine Tunneldiode, kann ihr Transmissions-Verhalten mit Hilfe der ballistischen Elektronen untersucht werden. Bekannte Filter-Charakteristika resonanter Tunneldioden lassen sich jedoch nicht nur zur Generation definierter $(E, \mathbf{k}_{\parallel})$ -Verteilungen einsetzen, sondern auch umgekehrt zur Analyse der von der Metall/Halbleiter-Grenzfläche einfallenden Elektronen-Verteilung. Aufgrund experimenteller Daten [61] vermutete man, dass die Au/GaAs Grenzfläche in Verbindung mit einer nur wenige Nanometer unter dem Au-Film liegenden Tunneldiode zu \mathbf{k}_{\parallel} -Filter Effekten führt [62, 63]. Inwieweit dies zutrifft und welcher Mechanismus dafür verantwortlich ist, soll in diesem Kapitel untersucht werden.

Die experimentellen Daten wurden mit folgender Anordnung gewonnen¹: Eine speziell präparierte Au-Spitze wurde mittels Piezo-Aktuatoren wenige Nanometer über der Probe positioniert, auf die ein 7,5 nm dicker Au-Film aufgedampft

¹Die Experimente wurden von der Gruppe von Prof. Dr. J. Smoliner, Institut für Festkörperelektronik, TU Wien ausgeführt.

wurde. Die Probe selbst besteht aus einem undotierten (001)-GaAs Substrat auf dem ein n-dotierter Kollektor und eine undotierte 150 nm dicke GaAs Pufferschicht aufgewachsen wurde. Darüber liegt eine GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As DBRTD mit einer Barrieren- und Topfbreite von 3,7 nm bzw. 3 nm. Abb. 4.1 zeigt das selbstkonsistent berechnete Bandkanten-Profil der Anordnung inklusive ihrer Beschaltung. Mittels der Piezo-Aktuatoren wird der Tunnelstrom I_t durch die STM-Spitze konstant bei 5 nA gehalten.

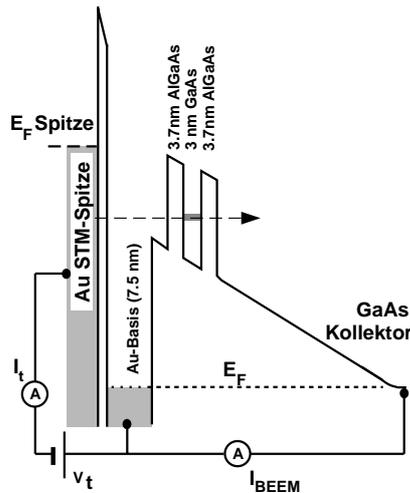


Abbildung 4.1: Das selbstkonsistent berechnete Leitungsbandkanten-Profil ist wie üblich gegen den Ort aufgetragen. Das Prinzipschaltbild des BEEEM-Experiments und die STM-Spitze wurde symbolisch in die Skizze mit aufgenommen.

Die meisten der emittierten Elektronen streuen in der polykristallinen Au-Schicht inelastisch und können dann die Schottky-Barriere von rund 0,9 eV zwischen Au und GaAs nicht mehr überwinden. Zudem sind die effektiven Massen in Gold und GaAs stark unterschiedlich. Diese Fehlanpassung der Bandstrukturen führt — zumindest in der Nähe der Leitungsbandkante — zu einem Filter für Elektronen mit kleinen $|\mathbf{k}_{\parallel}|$. Die verbleibenden, teilweise elastisch gestreuten Elektronen können je nach Energie und \mathbf{k}_{\parallel} die RTD passieren oder werden von ihr reflektiert und von der Basis abgesaugt. Der Kollektor-Strom I_{BEEEM} liegt daher mit weniger als einem pA mehrere Größenordnungen unter I_t . Aus dem BEEEM-Spektrum $I_{\text{BEEEM}}(V_t)$ lassen sich daher Rückschlüsse auf die $(E, \mathbf{k}_{\parallel})$ -Verteilung derjenigen Elektronen ziehen, welche die Au/GaAs Grenzfläche passiert haben.

4.1. Theoretische Beschreibung

Prinzipiell kann der Tunnelstrom mit dem in Kapitel 2 ausgearbeiteten Streuformalismus beschrieben werden. Besondere Betrachtung erfordert hier jedoch die

STM-Spitze und die polykristalline Deckschicht. Die Erkenntnis, dass nur sehr wenige der emittierten Elektronen den Au-Film elastisch durchlaufen und zum Messsignal beitragen, führte zu der Einsicht, dass die zugrunde liegende Physik auch durch direktes Eintreten der Elektronen aus der um eV_t promovierten Au-Bandstruktur in GaAs beschrieben werden kann. Die STM-Spitze geht also über ihr Emissions-Spektrum und ihre Fermi-Energie in das Modell ein. Von der Au-Deckschicht nimmt man implizit an, dass sie die Elektronen-Verteilung nicht weiter modifiziert. Um den Einfluss der Au-Bandstruktur zu testen, wurde diese bei konstantem E_F starr verschoben. Dies wirkte sich jedoch kaum auf den Tunnelstrom aus, was auf eine passive Rolle des Goldes als „Elektronen-Lieferant“ hindeutet.

Implizit beschreibt diese Methode den BEEM-Strom über flächiges Tunneln. Da weder die aktive Fläche noch der Anteil der inelastisch gestreuten Elektronen bekannt ist, kann der absolute Kollektor-Strom auch nicht berechnet werden. Für einen Vergleich mit dem Experiment müssen daher zwei Parameter angepasst werden: Die effektive aktive Fläche, sowie die Höhe der Schottky-Barriere.

In dem verbreiteten und auf der effektiven Massen Theorie basierenden Bell-Kaiser Modell [54, 55] werden zum Vergleich insgesamt sechs Parameter angepasst. Neben der Schottky-Barrieren-Höhe und einer effektiven Fläche sind dies die energetischen Abstände der Γ -, X - und L -Täler sowie die Verhältnisse ihrer Massen. Während die energetische Separation der Leitungsband-Täler noch in guter Übereinstimmung mit den Literatur-Werten sind, weichen die entsprechenden effektiven Massen erheblich von den Ergebnissen anderer Experimente und *ab-initio* Rechnungen ab.

Im Tight-Binding Modell werden trotz der vorgenommenen Vereinfachungen und der vergleichsweise geringen Anzahl von Fit-Parametern, die experimentell gemessenen BEEM-Spektren gut wiedergegeben. Lediglich die Beiträge der via L - und X -Täler propagierenden Elektronen sind zu groß, was jedoch auch in anderen \mathbf{k}_{\parallel} -erhaltenden Modellen [55, 64, 65] der Fall ist.

Über die genaue Morphologie der Au/GaAs Grenzfläche ist nur sehr wenig bekannt. Unter anderem zeigten BEEM-Messungen [66, 67, 68], dass schon bei Raumtemperatur Gold mehr als zwei Monolagen tief in das GaAs eindiffundiert. Da über den Diffusionsweg keine genauen Informationen vorliegen, wurde angenommen, dass Au auf Zwischengitterplätzen des Zinkblende-Kristalls sitzt. Um den Einfluss dieser Au-Atome auf die BEEM-Spektren zu bestimmen, wurden alle Berechnungen einmal unter Annahme einer idealen, d.h. atomar scharfen,

Grenzfläche und einmal für eine „legierte“ Grenzfläche durchgeführt. Statistisch verteilte Au Atome in den ersten beiden Monolagen können mit der in Kapitel 2 beschriebenen Methode nicht direkt berechnet werden, da die laterale Periodizität als notwendige Voraussetzung in die Ableitung einging. Es ist aber möglich laterale Übergitter-Zellen zu konstruieren, innerhalb derer Au Atome zufällig auf Zwischengitter-Plätze der ersten beiden Monolagen verteilt sind. Die \mathbf{k}_{\parallel} -Erhaltung reduziert sich dadurch auf die des entsprechenden Übergitter-Vektors, was — in Grenzen — eine elastische Streuung im \mathbf{k}_{\parallel} -Raum erlaubt. Der hohe numerische Aufwand erfordert eine Beschränkung der Simulationen auf 3×1 oder 2×2 Übergitter. Soweit nicht anderweitig angegeben beziehen sich die Übergitter-Rechnungen auf 3×1 Zellen.

4.2. Vergrabene Tunneldioden

Die erste betrachtete BEEM-Struktur besitzt eine 10 nm GaAs Schicht zwischen Au-Film und RTD. Anordnungen mit Deckschichten von 10 nm oder mehr werden als „vergrabene“ RTDn, solche mit geringeren Deckschichten als „oberflächennahe“ RTDn bezeichnet. Abb. 4.2 zeigt ein experimentelles BEEM-Spektrum (Kreuze) sowie zwei theoretische BEEM-Spektren (Linien) einer vergrabenen Struktur. Bei der Einsatz-Spannung $V_t \approx 1$ V liegen die Fermi-Energie der STM-Spitze und der quasi-gebundene Zustand der RTD auf gleichem Niveau und Elektronen an der Fermi-Kante mit $|\mathbf{k}_{\parallel}| \approx 0$ können die Struktur resonant durchtunneln. Mit wachsendem V_t tragen zunehmend größere \mathbf{k}_{\parallel} -Werte zum Strom bei, was sich wegen der näherungsweise Parabolizität des Leitungsband-Minimums in einer linearen Zunahme des Stroms äußert. Übersteigt V_t etwa 1,25 V, tunneln die Elektronen zusätzlich über das GaAs L -Tal und I_{BEEM} steigt steiler — aber wieder linear — an. Mit zunehmender Energie der Elektronen erfolgt der Transport über immer mehr Kanäle und der Anstieg von I_{BEEM} beschleunigt sich zunehmend.

Die Tight-Binding Rechnung überschätzt den Beitrag der L -Tal Elektronen zum Strom, wie man an dem zu steilen Anstieg der beiden Theorie-Kurven oberhalb von 1,25 V erkennen kann. Qualitativ verhalten sich die theoretischen Spektren für ideale (durchgehende Linie) und legierte (gestrichelt) Grenzflächen gleich und sind identisch mit dem Experiment.

Abb. 4.3 zeigt für einige Spannungen aus dem linearen Bereich von Abb. 4.2 die Verteilung des Stroms im \mathbf{k}_{\parallel} -Raum. Die Abszisse entspricht \mathbf{k}_{\parallel} -Werten entlang der $K - \Gamma - K$ Linie in der Nähe des Γ -Punktes. Auf der Ordinate ist die über

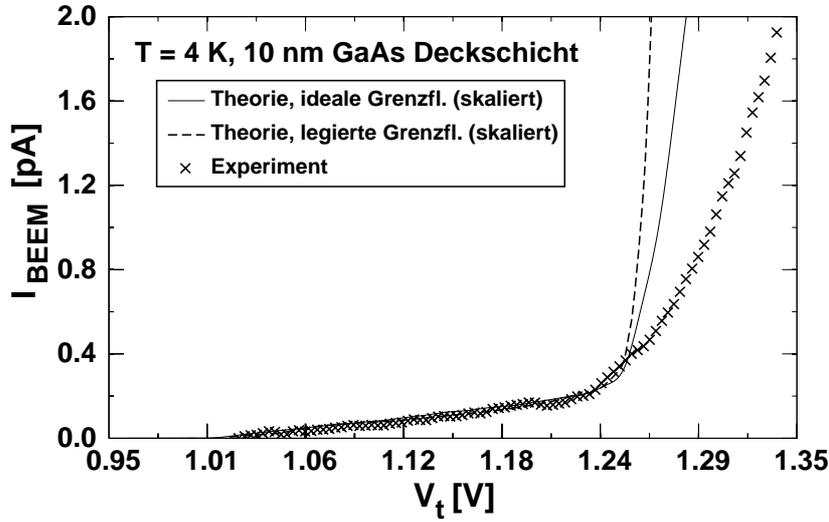


Abbildung 4.2: BEEM-Strom als Funktion von V_t bei 4,2 K. Die RTD wurde mit 10 nm GaAs bedeckt. Die durchgehende (gestrichelte) Kurve zeigt die berechneten Kennlinien unter der Annahme einer idealen (legierten) Grenzfläche. Mit Kreuzen sind die experimentellen Ergebnisse eingezeichnet.

die Energie integrierte und gewichtete Transmissionswahrscheinlichkeit Gl. (2.19) aufgetragen:

$$T'(\mathbf{k}_{\parallel}) = \int dE [f_L(eV_t + E) - f_R(E)] T(E, \mathbf{k}_{\parallel}).$$

Wie auch aus der Theorie der effektiven Masse zu erwarten ist, verbreitert sich die \mathbf{k}_{\parallel} -Verteilung mit wachsenden V_t . Ein Elektron mit Gesamtenergie E und effektiver Masse m^* durchläuft die RTD mit der Resonanz-Energie E_{res} genau dann resonant, wenn $E = E_{\text{res}} + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m^*$ gilt.

4.3. Tunnel-Strukturen nahe der Oberfläche

Die Situation ändert sich qualitativ für Deckschichten im Bereich weniger Nanometer. Wie in Ref. [61] berichtet wird, beobachtet man bei oberflächennahen RTDn zunächst einen linearen Anstieg, der aber ab ca. 1,15 V plateauartig abflacht (vgl. gepunktete Linie in Abb. 4.4). Dieser Effekt wurde bei verschiedensten Resonanz-Strukturen beobachtet, ist aber am ausgeprägtesten für schmalbandige

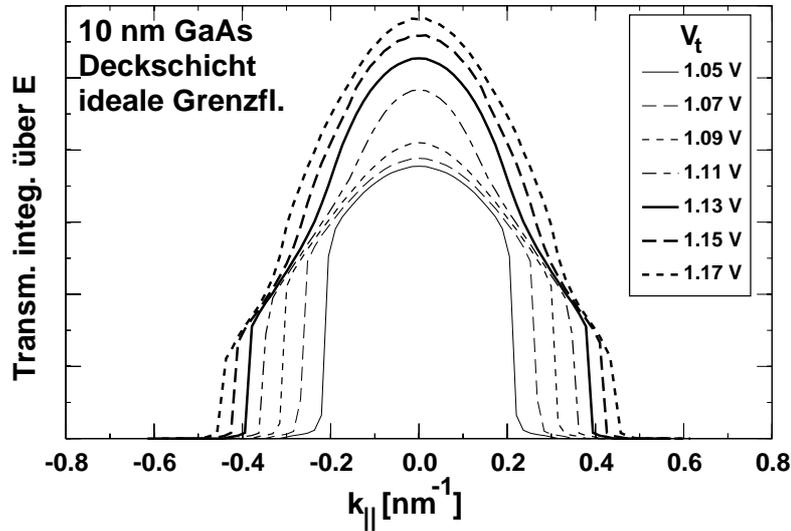


Abbildung 4.3: Über die Energie integrierte Transmissionswahrscheinlichkeit der Struktur aus Abb. 4.1 als Funktion von \mathbf{k}_{\parallel} entlang der K - Γ - K Linie. Die Verteilungen für die ideale und legierte Grenzfläche unterscheiden sich lediglich in einem konstantem Faktor.

Energie-Filter, wie Übergittern. Interessanterweise sagt — unabhängig von der Deckschichtdicke — sowohl das Bell-Kaiser-Modell als auch die Tight-Binding Rechnung für ideale Grenzflächen (durchgehende Linie in Abb. 4.4) einen linearen Anstieg vorher.

Berücksichtigt man mit der in Abschnitt 4.1 beschriebenen Methode, dass die ersten zwei Monolagen GaAs legiert sind und erlaubt man auf diese Weise elastische \mathbf{k}_{\parallel} -Streuung, flacht der Anstieg des BEEM-Stromes (gestrichelte Linie in Abb. 4.4) wie im Experiment deutlich ab. Wie Vergleichs-Rechnungen mit einem lateralen 2×2 Übergitter ergaben, ist dieses Verhalten unabhängig von der speziellen Form der Übergitter-Zelle sowie der Positionierung der Au Atome. Obwohl die vergleichsweisen kleinen Übergitter-Zellen die aperiodische Grenzfläche nur begrenzt beschreiben können, wird das qualitative Verhalten der Struktur gut wiedergegeben.

Anhand der Strom-Verteilung im \mathbf{k}_{\parallel} -Raum in Abb. 4.5 erkennt man deutlich, dass die Transmissionswahrscheinlichkeit von Elektronen mit größerem $|\mathbf{k}_{\parallel}|$ in legierten (b) Strukturen im Vergleich zu idealen (a) unterdrückt ist. Rechnungen mit einem 2×2 Übergitter zeigen ein noch deutlicheres Abschnüren der Verteilung bei etwa $0,17 \text{ nm}^{-1}$, was einem $E_{\parallel} = \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m^*$ von rund 16 meV entspricht. Auf

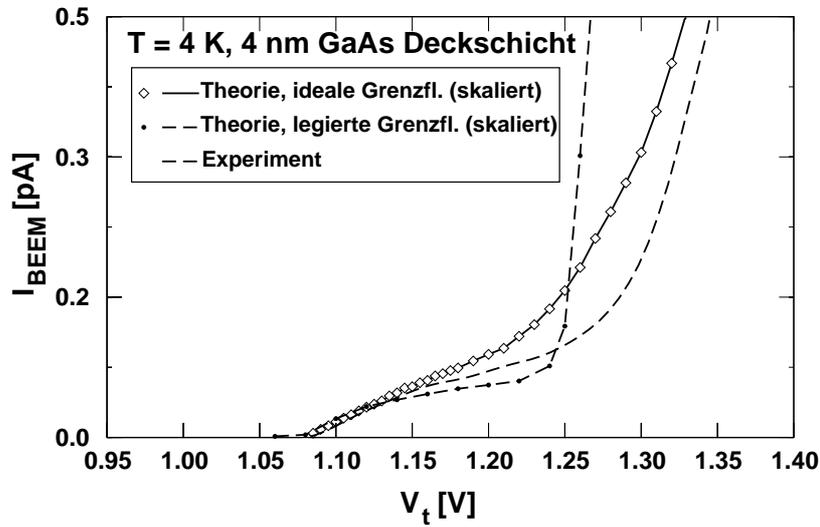


Abbildung 4.4: BEEM-Spektrum einer oberflächennahen DBRTD. Die gepunktete Kurve zeigt die Messung, während die durchgehende bzw. gestrichelte Kurve die Rechnungen für die ideale bzw. legierte Grenzfläche zeigt. Um einen Vergleich zu ermöglichen wurde mittels eines Skalierungsfaktors ihre Anfangs-Steigung aneinander angepasst.

einen Filter für kleine $|\mathbf{k}_{\parallel}|$ deuten auch Magnetotransport-Experimente [63] an oberflächennahen RTDn hin. Im Magnetfeld bilden sich im Quantentopf Landau-Niveaus aus, die beim Verlassen des durch den Filter eingeschränkten $|\mathbf{k}_{\parallel}|$ -Bereichs zu Shubnikov-de-Haas artigen Oszillationen im Tunnelstrom führen. Aus der Frequenz in $1/B$ ergibt sich eine E_{\parallel} -Filterbreite von rund 11 meV, was mit dem theoretischen Wert von 16 meV im Rahmen der Erwartungen übereinstimmt.

Aus dem Verschwinden des sub-linearen Anstiegs bei tiefer liegenden RTDn kann geschlossen werden, dass am fokussierten Tunneln Au/GaAs-Grenzflächen-Zustände beteiligt sind. Solange sich die DBRTD in der Nähe der Defekt-Atome befindet, können die Elektronen über die Grenzflächen-Zustände in die RTD tunneln. Wird der Abstand erhöht reißt dieser Pfad ab. Die Aperiodizität der Defekte bedingt die Dispersionslosigkeit der zugehörigen Zustände, was wiederum zu einem weiteren Filter im Energie/ \mathbf{k}_{\parallel} -Raum führt.

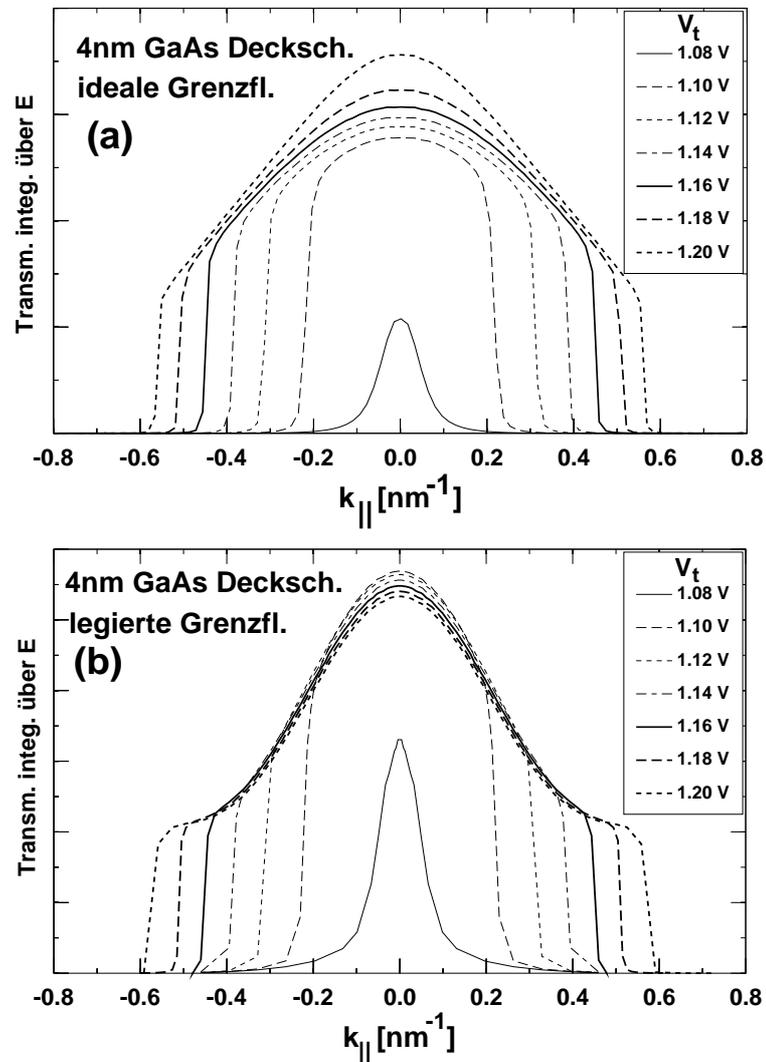


Abbildung 4.5: Über die Energie integrierte Transmissions-Wahrscheinlichkeit für eine ideale (a) und legierte (b) Grenzfläche bei unterschiedlichen V_t .

Teil II

Halbleiter in magnetischen Feldern

EINLEITUNG

Der zweite Teil dieser Arbeit beschäftigt sich mit Halbleitern in Magnetfeldern. Im Gegensatz zu den meisten Publikationen zu diesem Thema soll hier speziell auf Felder oberhalb des störungstheoretisch zugänglichen Bereichs bis ein-
ge zehn Tesla eingegangen werden. Die wenigen Arbeiten zu diesem Gebiet be-
handeln — aus numerischen Gründen — entweder stark vereinfachte Modelle [69, 70, 71] oder extrapolieren störungstheoretische $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Modelle mit Hilfe von Fit-Parametern [72].

Das herausragendste Beispiel zu Ersterem stellt die Arbeit von Hofstadter [16] dar. Er simulierte ein zweidimensionales Elektronengas im Magnetfeld mittels eines einfachen, dafür aber teilweise analytisch handhabbaren, Einband-Tight-Binding Modells. Die in einem quadratischen Gitter angeordneten s -Orbitale koppeln dabei mit ihren nächsten Nachbarn über die mit einer Peierls-Phase versehene Matrixelemente. Trotz der Einfachheit dieses Modells liefert es ein fraktales Energiespektrum. Ebenfalls fraktale Funktionen des Magnetfeldes folgen für die damit zusammenhängenden physikalischen Größen, wie die Leitfähigkeit und die Fermienergie. Die Gültigkeit dieses Modells ist jedoch auf zwei Grenzfälle beschränkt: Sehr kleine Felder, bei denen der magnetische Fluss pro Gitterzelle Φ klein gegenüber dem elementaren Flussquant $\Phi_0 := h/e$ ist, und Felder, bei denen Φ groß gegenüber Φ_0 ist. Allerdings tritt in letzterem Fall die fraktale Struktur *innerhalb* des verbreiterten Landau-Levels auf. Dieser Grenzfall kann z.B. durch Antidot-Gitter in einem zweidimensionalen Elektronengas realisiert werden.

Durch die großen experimentellen Fortschritte in den letzten Jahren auf dem Gebiet der Erzeugung ultra-hoher Magnetfelder können mittlerweile Spitzenfelder von rund 2800 Tesla erreicht werden [73]. Obwohl diese Experimente mit einem erheblichen technischen Aufwand verbunden sind und die kaskadenartigen Implosions-Sprengungen zur Zerstörung der Probe führen, erhält man dennoch dank ausgefeilter Messmethoden quantitative Aussagen über elektronische Eigenschaften von Halbleitern in diesen Feldern. Zur Interpretation dieser Resultate wurde bisher die auf endliche Magnetfelder erweiterte $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode ($\mathbf{P} \cdot \mathbf{p}$) ein-

gesetzt [72, 74, 75]. Da das Magnetfeld \mathbf{B} nur störungstheoretisch in das Modell aufgenommen wird, weist die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode jedoch drei gravierende Nachteile auf: Erstens müssen aufgrund der mit dem Feld zunehmenden Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment Fit-Parameter eingeführt werden, welche die Rechnungen bei moderaten Feldern (< 100 T) an das Experiment anpassen, um die Zuordnung der beobachteten Resonanzen bei hohen Feldern zu ermöglichen. Zweitens mischen bei hohen Feldern sehr viele, oftmals energetisch weit entfernt liegende, Bänder und \mathbf{k} -Raum Zustände, wie Γ - und X -Tal, zu einem Zustand. Die $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Methode entwickelt aber die Bandstruktur um einen Punkt der Brillouin-Zone und ermöglicht daher keine adäquate, simultane Beschreibung Symmetrie-inäquivalenter Täler. Drittens sind nichtperturbative Effekte, wie z.B. das zu fraktalen Energiespektren führende Chaos, prinzipiell unzugänglich.

Bei der empirischen Tight-Binding-Methode treten diese Nachteile jedoch nicht auf. Die relativistischen $sp^3d^5s^*$ -Modelle [7] erlauben eine realistische Beschreibung der Valenz- und Leitungsbänder über die gesamte Brillouin-Zone hinweg. Während die gebräuchlichen sp^3s^* -Modelle mit nur 12 Leitungsbändern oft zu hohe effektive Massen in den höheren Leitungsband-Tälern aufweisen [76], ist dies in den $sp^3d^5s^*$ -Modellen (32 Leitungsbänder) kaum mehr der Fall.

Tight-Binding Modelle mit nur einem π -Orbital und ohne Spin wurden u.a. zur Berechnung der Magnetobandstruktur von Kohlenstoff-Röhren [77] und -Bändern [78] eingesetzt. Mit einem 10-Band sp^3s^* -Tight-Binding Modell ebenfalls ohne Spin berechneten Graf *et al.* [79] die Magnetobandstruktur von GaAs entlang einer Symmetrierichtung für eine Feldstärke. Wie sich jedoch herausstellte, sind die Ergebnisse aufgrund von Schwächen in dem verwendeten Tight-Binding Parametersatz lediglich qualitativ richtig (vgl. Abschnitt 12.1).

Der zweite Teil dieser Arbeit gliedert sich wie folgt: In den ersten beiden Kapiteln werden die kanonischen Operatoren im Magnetfeld definiert und die magnetischen Translations-Operatoren diskutiert. Um den Einsatz von Tight-Binding-Methoden für die semi-quantitative Berechnung von Magnetobandstrukturen zu rechtfertigen, wird im darauf folgenden Kapitel die Form der Peierls-Phase motiviert, die einhergehenden Fehler abgeschätzt, sowie die effektive magnetische Einheitszelle abgeleitet. In Kapitel 8 werden die für die k -Raum Integration wichtigen verbleibenden Punkt-Symmetrien des Hamilton-Operators untersucht. Um die Interpretation der Zustände numerisch gewonnener Magnetobandstrukturen zu ermöglichen, wird in den folgenden Kapitel über ein analytisches Modell die Verbindung zwischen Tight-Binding und Enveloppen-Theorie hergestellt.

Für einen Vergleich mit Experimenten müssen aus den magnetischen Zuständen observable Größen wie die optische Absorption ermittelt werden. Dafür wird in Kapitel 10.2 die transversale optische Dielektrizitäts-Konstante im Tight-Binding Formalismus für endliche Magnetfelder abgeleitet. Kapitel 11 dokumentiert die Implementierung dieser Gleichungen und vergleicht Vorhersagen im Niederfeldlimites mit denen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie.

Die letzten beiden Kapitel befassen sich schließlich mit der Anwendung der Theorie auf reale Halbleiter wie GaAs und GaSb und mit der Frage, ob fraktale Energiespektren in Volumenhalbleitern beobachtbar sind.

KAPITEL 5

KANONISCHE OPERATOREN

Der einfachste Übergang von den feldfreien Operatoren der Energie und des Impulses

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (5.1)$$

$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla \quad (5.2)$$

zu den entsprechenden kanonischen Operatoren im elektrischen und magnetischen Feld folgt direkt aus der Forderung einer lokalen SU(1) Eichinvarianz

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow e^{i\chi(\mathbf{r}, t)} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (5.3)$$

der Wellenfunktion [80]:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V(\mathbf{r}) \quad (5.4a)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -i\hbar \nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (5.4b)$$

Mit $V(\mathbf{r})$ ist dabei die lokale (elektrostatische) potenzielle Energie¹ bezeichnet, die gitterperiodisch sein soll. Um Missverständnissen vorzubeugen, wird auch im Folgenden mit \mathbf{p} weiterhin der *feldfreie* Impuls-Operator bezeichnet. Der kanonische Impuls dagegen mit:

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (5.5)$$

¹Im Folgenden wird V etwas unsauber, aber dem Sprachgebrauch entsprechend, als „Potential“ bezeichnet.

Eine Eichtransformation nach Gl. (5.3) ist äquivalent mit einer Substitution von \mathbf{A} und V entsprechend:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} - \frac{\hbar}{e} \nabla \chi, \quad (5.6a)$$

$$V \rightarrow V + \hbar \frac{\partial \chi}{\partial t}. \quad (5.6b)$$

Mit $\chi(\mathbf{r}, t)$ wurde wie in Gl. (5.3) eine lokale Eichfunktion bezeichnet. Eine Änderung der Eichung nach Gl. (5.6a,5.6b) lässt die Erwartungswerte aller Observablen invariant. Um eine unnötige Verkomplizierung zu vermeiden, wird die explizite Zeitabhängigkeit in der Notation unterdrückt. Zudem wird in dieser Arbeit für analytische Rechnungen meist die symmetrische, bei numerischen Berechnungen ausschließlich die asymmetrische (Landau) Eichung verwendet:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \begin{cases} -\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} = \frac{1}{2} B (-y, x, 0)^T & \text{symmetrische Eichung} \\ B (0, x, 0)^T & \text{asymmetrische Eichung} \end{cases} \quad (5.7)$$

Das Magnetfeld soll stets räumlich homogen und parallel zur z -Achse gerichtet sein. Folglich lautet der Hamilton-Operator H im Magnetfeld

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{\Pi}^2 + V(\mathbf{r}) + \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \frac{\mu_B}{2mec^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V \times \mathbf{\Pi}. \quad (5.8)$$

Eine wichtige Größe in diesem Zusammenhang ist $\mathbf{\Pi}_c$, die durch

$$\mathbf{\Pi}_c := \mathbf{\Pi} + e\mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad (5.9)$$

definiert ist. Wie man nach etwas Algebra sieht, vertauscht jede Komponente von $\mathbf{\Pi}_c$ mit jeder Komponente des kanonischen Impulses [69]

$$\left[(\mathbf{\Pi})_i, (\mathbf{\Pi}_c)_j \right] = 0 \quad \forall i, j \in \{1, 2, 3\} \quad (5.10)$$

und daher auch mit jeder Funktion von $\mathbf{\Pi}$, also im Fall freier Elektronen mit dem Hamilton-Operator. Für konstantes Potenzial stellt $\mathbf{\Pi}_c$ damit eine Erhaltungsgröße dar. Wie durch Bilden der zeitlichen Ableitung gezeigt werden kann, gilt Letzteres auch im klassischen Grenzfall.

In Anhang A werden Lösungen der Schrödingergleichung im Magnetfeld für konstantes Potenzial (Landau-Theorie der freien Elektronen) diskutiert. Dabei zeigt sich, dass die Wellenfunktionen bei symmetrischer Eichung in beiden Richtungen

senkrecht zum Magnetfeld lokalisiert sind, während dies bei asymmetrischer Eichung nur in einer Richtung der Fall ist. Aufgrund der Entartung der Zustände an verschiedenen Orten (konstantes Potenzial) spiegelt dies keine physikalische Eigenschaft wider, sondern lediglich eine willkürliche Wahl der Eichung.

KAPITEL 6

SYMMETRIEN IM MAGNETFELD I: DIE MAGNETISCHE TRANSLATIONS-GRUPPE

Der bisherige (feldfreie) Translations-Operator $T_{\mathbf{R}_L}$ um einen Gittervektor \mathbf{R}_L

$$T_{\mathbf{R}_L} = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{R}_L \cdot \mathbf{p} \right] \quad (6.1)$$

vertauscht im Magnetfeld nicht mit dem Hamilton-Operator. Daher muss ein neuer, magnetischer Translations-Operator T_M mittels $\mathbf{\Pi}_c$ aus Gl. (5.9) konstruiert werden [69]:

$$T_{M,\mathbf{R}} := \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{R} \cdot \mathbf{\Pi}_c \right]. \quad (6.2)$$

Man kann T_M in eine gewöhnliche feldfreie Translation und eine eichungsabhängige Phase aufspalten. Im Falle der symmetrischen Eichung ergibt sich dabei:

$$T_{M,\mathbf{R}} = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \mathbf{R} \cdot \mathbf{p} \right] \exp \left[-\frac{ie}{2\hbar} \mathbf{R} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{B} \right] = T_{\mathbf{R}} \exp \left[\frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{R} \right]. \quad (6.3)$$

Falls T_M eine Translation vermittelt, die der Periodizität des Potentials V entspricht, kommutiert T_{M,\mathbf{R}_L} auch mit dem Hamilton-Operator im Magnetfeld:

$$[H, T_{M,\mathbf{R}_L}] = 0 \quad (6.4)$$

Im Gegensatz zum feldfreien Fall ist die Gruppe der magnetischen Translationen nicht mehr abelsch. Es gilt vielmehr unabhängig von der gewählten Eichung [69]:

$$T_{M,\mathbf{R}_1} T_{M,\mathbf{R}_2} = \exp \left[-\frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2 \right] T_{M,\mathbf{R}_1+\mathbf{R}_2} \quad (6.5)$$

$$= \exp \left[-\frac{ie}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{R}_1 \times \mathbf{R}_2 \right] T_{M,\mathbf{R}_2} T_{M,\mathbf{R}_1} \quad (6.6)$$

Insbesondere gilt obige Identität für den Fall, dass \mathbf{R}_1 und \mathbf{R}_2 ein ganzzahliges Vielfaches der primitiven Translationen $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ sind. Für Translationen um Gittervektoren existiert ein wichtiger Spezialfall: Sollte der magnetische Fluss durch jede Seitenfläche des von $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ aufgespannten Parallelepipeds ein rationales Vielfaches des elementaren Flussquants $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ sein

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{a}_i \times \mathbf{a}_j = \frac{p_k}{q_k} \cdot \frac{h}{e} = \frac{p_k}{q_k} \cdot \Phi_0, \quad (6.7)$$

$$\text{mit } p_k \in \mathbb{Z}, q_k \in \mathbb{N}, (i, j, k) \in \{(1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2)\},$$

so besitzt $T_{M, \mathbf{R}}$ eine abelsche Untergruppe. Diese Bedingung ergibt sich aus der Forderung, dass ein magnetisches Übergitter mit primitiven Translationen $\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, \mathbf{a}'_3$ existieren muss, für das die Exponentialfunktion in Gl. (6.6) stets gleich eins ist und zudem die $\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, \mathbf{a}'_3$ primitive Translationen des Gitters sind. Die T_M verhalten sich dann entsprechend gewöhnlichen Translationen im feldfreien Fall, nur dass die \mathbf{a}'_i eine vergrößerte, magnetische Einheitszelle definieren. Dieser Sonderfall eines so genannten „rationalen Feldes“ soll im Folgenden ausschließlich betrachtet werden. Die so genannte magnetische Einheitszelle kann wie folgt konstruiert werden [82]:

Konventionell wählt man zunächst \mathbf{a}'_3 parallel zum Magnetfeld. Dazu bestimmt man das kleinste gemeinsame Vielfache (KGV) der drei Nenner aus Gl. (6.7)

$$Q := \text{KGV}[q_1, q_2, q_3] \quad (6.8)$$

und den größten gemeinsamen Teiler (GGT) der damit erweiterten Brüche:

$$P := \text{GGT} \left[Q \frac{p_1}{q_1}, Q \frac{p_2}{q_2}, Q \frac{p_3}{q_3} \right]. \quad (6.9)$$

Der kleinste Gittervektor parallel zu \mathbf{B} ist dann¹

$$\mathbf{a}'_3 := \frac{Qp_1}{Pq_1} \mathbf{a}_1 + \frac{Qp_2}{Pq_2} \mathbf{a}_2 + \frac{Qp_3}{Pq_3} \mathbf{a}_3. \quad (6.10a)$$

Sind o.B.d.A. $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ linear unabhängig von \mathbf{a}'_3 , so ergeben sich die beiden verbleibenden primitiven magnetischen Gittervektoren durch Multiplikation von \mathbf{a}_1

¹Die Parallelität sieht man am einfachsten aus folgender Darstellung des Magnetfeldes: $\mathbf{B} = (\Phi_1 \mathbf{a}_1 + \dots + \Phi_3 \mathbf{a}_3) / (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3)$ wobei $\Phi_1 = \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{B}$ usw.

oder \mathbf{a}_2 mit Q :

$$\mathbf{a}'_1 := Q\mathbf{a}_1, \quad (6.10b)$$

$$\mathbf{a}'_2 := \mathbf{a}_2. \quad (6.10c)$$

Die Exponentialfunktion in Gl. (6.6) ist wegen der Gl. (6.7) für alle Translationen um $\mathbf{R}' = n_1\mathbf{a}'_1 + n_2\mathbf{a}'_2 + n_3\mathbf{a}'_3$ mit ganzzahligen n_i gleich eins. Die Gittervektoren \mathbf{a}'_1 und \mathbf{a}'_2 wurden also so groß gewählt, dass durch die von ihnen aufgespannte Fläche ein ganzzahliges Vielfaches von $\Phi_0 := h/e$ fließt. Ein Elektron gewinnt beim Umlaufen dieser Fläche effektiv keine Phase. Eine in diesem Zusammenhang oft benötigte Darstellung des Magnetfeldes durch den Gittervektor \mathbf{a}'_3 ist:

$$\mathbf{B} = \Phi_0 \frac{P}{Q} \frac{\mathbf{a}'_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad (6.11)$$

Da die \mathbf{a}'_i auch Gittervektoren sind, gehorchen die magnetischen Translationen um \mathbf{a}'_i den gleichen Kommutations-Regeln wie die feldfreien Translationen — nur mit einer vergrößerten Einheitszelle. Insbesondere gilt wegen $[T_{M,\mathbf{R}}, H] = 0$ das Bloch-Theorem:

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}] u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (6.12)$$

Mit \mathbf{k} bzw. n sind nun aber der in die magnetische Brillouin-Zone zurückgefaltete Wellenvektor und der Band/Subbandindex bezeichnet. Auch u ist nur noch auf der magnetischen Einheitszelle periodisch.

Da im Falle von magnetischen Gittern \mathbf{R}_L den Übergitter-Vektor bezeichnet, muss ein zusätzlicher Index $m = 0, \dots, Q - 1$ eingeführt werden, der die einzelnen kristallinen Einheitszellen innerhalb der magnetischen Einheitszelle durchnummeriert. Der Multiindex I ist damit Funktion der magnetischen Gitterzelle L , der Einheitszelle m und des Basisatoms λ :

$$\mathbf{R}_I = \mathbf{R}_L + \mathbf{R}_m + \boldsymbol{\tau}_\lambda = (Qn_1 + m)\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}'_3 + \boldsymbol{\tau}_\lambda \quad (6.13)$$

Ein Flussquant pro Einheitszellen-Fläche entspricht für übliche Gitterkonstanten von einigen Ångström astronomisch hohen Magnetfeldern von mehr als 10^4 Tesla. Für im Labor realisierbare Felder werden die Nenner in Gl. (6.7) dementsprechend groß. Magnetische Einheitszellen beinhalten daher selbst für Felder von einigen hundert Tesla kaum weniger als einige tausend Atome.

Wie aus der Wahl der magnetischen Gitterzelle (Gln. (6.10a,6.10b,6.10c)) ersichtlich ist, nimmt die magnetische Brillouin-Zone bei kleinem Magnetfeld die Gestalt eines Stabes an, d.h. sie ist in einer Richtung weniger stark ausgedehnt als in den anderen beiden.

Soll die symmetrische Eichung verwendet werden, ist eine Einheitszelle von Vorteil, die ebenfalls keine Achse willkürlich auszeichnet. Eine geeignete Wahl für tetragonale Kristalle mit $\mathbf{a}'_3 = \mathbf{a}_3$ ist

$$\mathbf{a}''_1 = Q\mathbf{a}_1; \quad \mathbf{a}''_2 = Q\mathbf{a}_2; \quad \mathbf{a}''_3 = \mathbf{a}_3.$$

Die so generierte magnetische Zelle enthält Q^2 Einheitszellen und ist damit Q -mal so groß wie die von $\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, \mathbf{a}'_3$ aufgespannte Zelle. Die Brillouin-Zone ist um eben diesen Faktor kleiner. Jedoch ist es möglich, auch die Brillouin-Zone des zu $\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, \mathbf{a}'_3$ gehörigen Gitters durch Symmetrie-Überlegungen auf ein Q -tel zu reduzieren, so dass die gleiche BZ wie für \mathbf{a}''_i entsteht.

KAPITEL 7

MAGNETISCHE FELDER IN TIGHT-BINDING

7.1. Peierls-Phase und Peierls-Substitution

In seiner richtungweisenden Arbeit von 1933 verwendete Peierls [15] zur Berechnung des Diamagnetismus von Leitungselektronen in Tight-Binding Näherung eine Konstruktion, die sich bis heute großer Beliebtheit erfreut. Ausgangspunkt ist ein isoliertes und um den Koordinatenursprung zentriertes Atom-Orbital, das sich in einem externen Magnetfeld mit symmetrischer Eichung befindet. Selbst bei sehr großen Feldern von weit über 1000 Tesla sind die Modifikationen des Orbitals durch das Feld zu klein, um die Wellenfunktion, welche typischerweise eine Ausdehnung von einigen Ångström besitzt, merklich zu deformieren. Dieses Atom-Orbital wird mittels einer magnetischen Translation T_M an alle Gitterpositionen verschoben. Der Phasengewinn, den diese Orbitale durch diese Translation erfahren, annulliert sich für Matrixelemente am gleichen Ort, wie den Orbital-Energien ϵ_α , und addiert sich teilweise für interatomare Energie-Matrixelemente $t_{I\alpha, I'\alpha'}$. Der Übergang vom feldfreien Kristall zu dem im Magnetfeld kann nach dieser Konstruktion einfach durch die Substitution

$$\epsilon_\alpha \rightarrow \epsilon_\alpha, \quad (7.1)$$

$$t_{I\alpha, I'\alpha'} \rightarrow t_{I\alpha, I'\alpha'} \cdot \exp \left[\frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{R}_I \times \mathbf{R}_{I'} \right] \quad (7.2)$$

vollzogen werden. Wie weiter in seiner Arbeit gezeigt wird, ist das Hinzufügen des Exponentialfaktors, der im Folgenden mit *Peierls-Phase* bezeichnet wird, in dem von ihm behandelten Fall äquivalent mit einer weiteren Konstruktion, die allgemein als *Peierls-Substitution* bezeichnet wird. Hierbei wird der Wellenvektor $\hbar\mathbf{k}$ in einer analytisch bekannten Dispersionsrelation $E(\mathbf{k})$ durch den Operator

$\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ersetzt und der dadurch gewonnene neue Operator $E(\mathbf{p} + e\mathbf{A})$ als effektiver Hamilton-Operator aufgefasst, den es zu diagonalisieren gilt:

$$E(\hbar\mathbf{k}) \rightarrow E(\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))|\Psi\rangle = E'|\Psi\rangle \quad (7.3)$$

Die Peierls-Substitution wurde in der Literatur eingehend diskutiert [5, 83, 84] und gezeigt, dass Gl. (7.3) im Einband-Fall nur bis B^2 gültig ist. Die Existenz eines effektiven Hamilton-Operators der Form $E(\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))$, der durch Rück-Substitution $\mathbf{p} + e\mathbf{A} \rightarrow \hbar\mathbf{k}$ die feldfreie Dispersions-Relation liefert, wurde von Wannier *et al.* [84] für den Fall eines isolierten Bandes bewiesen. Jedoch fand man bis heute keine analytische Darstellung. Prinzipiell ist eine Entwicklung in B möglich, die jedoch mit zunehmender Ordnung schnell komplex und unpraktikabel wird¹.

Obwohl die Ergebnisse für beliebige *primitive* Gitter ihre Gültigkeit behalten, betrachtet Peierls in seiner Arbeit lediglich den Fall eines einfach kubischen Gitters. Zudem verwendet er *nur ein Orbital* pro Gitterplatz. Nur für diesen Fall sind Peierls-Phase und Peierls-Substitution äquivalent. Trotzdem werden in der Literatur die Begriffe Peierls-Phase und Peierls-Substitution oftmals synonym verwendet. Die Peierls-Substitution findet ihre Anwendung in einfachen Modell-Systemen, die analytisch zu diagonalisieren sind, und sich in moderaten externen Feldern befinden.

Besonders in den letzten Jahren wurden die Anstrengungen intensiviert, die Peierls-Phase zu beweisen bzw. eine analytische Form zu finden, die frei von Annahmen wie z.B. der Form des Integrationsweges ist. So gingen Boykin *et al.* [85] allein von der Eichinvarianz und der Unvollständigkeit der Tight-Binding Basis aus und erhielten komplexe Ausdrücke, die jedoch im konkreten Fall wieder äquivalent zur gewöhnlichen Peierls-Phase sind. Auch spezielle Konstruktionen zur eichinvarianten Diskretisierung der Schrödinger-Gleichung [86] können auf die Peierls-Phase zurückgeführt werden.

7.2. Erweiterung der Peierls-Phase auf nichtprimitive Gitter

Obwohl Peierls in seiner Arbeit explizit darauf hinweist, dass seine Ableitung nur für primitive Gitter gilt, und meines Wissens keine Ableitung für Gitter mit Ba-

¹Eine Übersicht findet sich z.B. in Ref. [5].

sis in der Literatur existiert, wurde sie dennoch auch für nichtprimitive Gitter wie Graphit-Schichten [77, 78] oder Zinkblende-Strukturen [79] verwendet. Zudem existierte keine Abschätzung inwieweit die Orbital-Energien und Hopping-Matrixelemente durch das externe Magnetfeld modifiziert werden.

In diesem Abschnitt soll nun eine systematische Ableitung der TB-Matrixelemente im Magnetfeld durchgeführt werden. Ausgangspunkt sind dabei die am Ursprung lokalisierten Orbital-Wellenfunktionen $|\mathbf{0}, \alpha(\lambda, \beta, s)\rangle$.

Mit der Standard-Operator-Identität des kanonischen Impulses Gl. (5.5) gilt im Falle der symmetrischen Eichung Gl. (5.7) im konstanten Magnetfeld

$$\mathbf{\Pi}^2 = \mathbf{p}^2 + e(\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + e^2 \mathbf{A}^2 \quad (7.4)$$

$$= \mathbf{p}^2 + e\mathbf{B} \cdot \mathbf{L} + \frac{e^2}{4} \mathbf{B}^2 \rho^2, \quad (7.5)$$

wobei \mathbf{L} der Drehimpuls-Operator und ρ der Abstand von der z -Achse ist. Der Hamilton-Operator im Magnetfeld H_B lässt sich als Summe des feldfreien Operators H_0 plus vierer Störterme schreiben:

$$H_B = \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m} + \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + e\phi - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\phi \times \mathbf{\Pi} \quad (7.6)$$

$$= H_0 + \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) - \frac{e\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\phi \times \mathbf{A} + \frac{e^2 B^2}{8m} \rho^2. \quad (7.7)$$

Diese sind in der symmetrischen Eichung Gl. (5.7) die Zeeman-Aufspaltung des Spins und des Bahndrehimpulses, ein von der Spin-Bahn-Wechselwirkung stammender Term und ein parabolischer Potenzial-Term. Für Drehimpuls-Eigenzustände wirken die beiden Zeeman-Terme wie rigide Potenzial-Verschiebungen, modifizieren also die Wellenfunktion nicht. Die letzten beiden Terme in Gl. (7.7) verschwinden am Ursprung und stellen daher nur eine geringfügige Modifikation der am Nullpunkt lokalisierten Wellenfunktion dar². Das entsprechende Orbital α in der durch L, m gekennzeichneten Einheitszelle erhält man durch Translation um den — i.A. nicht primitiven — Vektor \mathbf{R}_I . Damit lassen sich die Hamilton-Matrixelemente wie folgt abschätzen.

7.2.1. Lokale Hamilton-Matrixelemente

Für die Hamilton-Matrixelemente im Magnetfeld am gleichen Ort ergibt sich mit den Gln. (6.3,6.4,6.5) und unter Ausnutzung der Tatsache, dass der magnetische

²Abschätzungen zeigen, dass dies bis etwa 5000T der Fall ist.

Translations-Operator mit jeder Funktion von $\mathbf{\Pi}$ vertauscht:

$$\begin{aligned}
\langle I, \alpha | H_B | I, \alpha' \rangle &= \langle \mathbf{0}, \alpha | T_{M, \mathbf{R}_I}^\dagger H_B(\mathbf{\Pi}, \mathbf{r}) T_{M, \mathbf{R}_I} | \mathbf{0}, \alpha' \rangle \\
&= \langle \mathbf{0}, \alpha | T_{M, \mathbf{R}_I}^\dagger T_{M, \mathbf{R}_I} H_B(\mathbf{\Pi}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda) | \mathbf{0}, \alpha' \rangle \\
&= \langle \mathbf{0}, \alpha | H_B(\mathbf{\Pi}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda) | \mathbf{0}, \alpha' \rangle \\
&= \langle \mathbf{0}, \alpha | H_0 + \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot ((\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda) \times \mathbf{p} + 2\mathbf{S}) \\
&\quad - \frac{e\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda) \times \mathbf{A}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda) | \mathbf{0}, \alpha' \rangle \\
&\quad + \langle \mathbf{0}, \alpha | \frac{e^2 B^2}{8m} \left[(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda)_x^2 + (\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda)_y^2 \right] | \mathbf{0}, \alpha' \rangle \\
&= \delta_{\alpha, \alpha'} \epsilon_\alpha^0 + \delta_{\lambda, \lambda'} \frac{1}{3} \Delta_\lambda + \underbrace{\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \langle \mathbf{0}, \alpha | \mathbf{L} + 2\mathbf{S} | \mathbf{0}, \alpha' \rangle}_{(a)} \\
&\quad - \underbrace{\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda \times \langle \mathbf{0}, \alpha | \mathbf{p} | \mathbf{0}, \alpha' \rangle}_{(b)} \\
&\quad - \underbrace{\frac{e\mu_B}{2mc^2} \langle \mathbf{0}, \alpha | \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda) \times \mathbf{A}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda) | \mathbf{0}, \alpha' \rangle}_{(c)} \\
&\quad + \underbrace{\frac{e^2 B^2}{8m} \langle \mathbf{0}, \alpha | \left[(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda)_x^2 + (\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_\lambda)_y^2 \right] | \mathbf{0}, \alpha' \rangle}_{(d)}
\end{aligned}$$

Zu dem ursprünglichen Onsite-Matrixelement kommen im Magnetfeld also noch die Korrektur-Terme (a)-(d), die im Folgenden einzeln besprochen und ggf. abgeschätzt werden.

- Korrektur-Term (a) ist die bekannte Zeeman-Aufspaltung des Spins bzw. des Bahndrehimpulses im Magnetfeld. Da die Tight-Binding-Orbitale per Konstruktion [2] eine definierte Symmetrie besitzen, kann (a) exakt berechnet und in die Hamiltonmatrix aufgenommen werden. Wegen der Orthogonalität benachbarter Orbitale wirkt die Zeeman-Korrektur nur lokal. Für ein Feld von 1000 T erreichen die Matrixelemente (a) Größenordnungen von mehreren zehn meV.
- Das lokale Impuls-Matrixelement $\langle \mathbf{0}, \alpha | \mathbf{p} | \mathbf{0}, \alpha' \rangle$ kann bis dato nicht aus dem Parametersatz extrahiert werden. Schätzt man den Term (b) mit Feldern

von 1000 T, typischen interatomaren Distanzen von einigen Ångström und kinetischen Energien im Bereich von einigen meV ab, so ergibt sich

$$\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda \times \langle \mathbf{0}, \alpha | \mathbf{p} | \mathbf{0}, \alpha' \rangle \approx \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda \times \sqrt{2mE} \lesssim 6 \text{ meV}.$$

- Der dritte Korrektur-Term beschreibt die Veränderung der Spin-Bahn Koppelung im Magnetfeld. Auch dieser Term kann nur abgeschätzt werden. Da selbst bei 1000 T $\langle \mathbf{p} \rangle \ll \langle e\mathbf{A} \rangle$ gilt, folgt, dass diese Korrektur klein gegenüber dem Spin-Bahn Term ist. Letzterer liegt aber ohnehin schon eine Größenordnung unter den gewöhnlichen Energie-Matrixelementen. Daher ist der Fehler bei Vernachlässigung von (c) im Sub-meV Bereich.
- Der Term (d) proportional in B^2 wirkt wie ein parabolisches, lokalisierendes Potenzial. Da die TB-Orbitale gut lokalisiert sein sollen, kann davon ausgegangen werden, dass der Erwartungswert von (d) maximal gleich $\frac{e^2 B^2}{8m} \boldsymbol{\tau}_\lambda^2$ ist. Setzt man für $\boldsymbol{\tau}_\lambda$ einen Abstand von 4 Å an, ergibt sich bei einem Magnetfeld von 1000 T ein Energie-Beitrag von unter einem meV, welcher vernachlässigbar gegenüber den sonst auftretenden Energien ist. Sollten die Koppelungen sehr weitreichend sein, kann Term (d) unter lokaler Näherung mit in den Hamilton-Operator aufgenommen werden.

Zusammenfassend lautet also die Korrektur der intraatomaren Energien im Magnetfeld:

$$\begin{aligned} \langle I, \alpha | H_B | I, \alpha' \rangle &= \delta_{\alpha, \alpha'} \epsilon_\alpha^0 + \delta_{\lambda, \lambda'} \frac{1}{3} \Delta_{\alpha, \alpha'} + \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \langle \mathbf{0}, \alpha | \mathbf{L} + 2\mathbf{S} | \mathbf{0}, \alpha' \rangle \\ &+ \frac{e^2}{8m} (\boldsymbol{\tau}_\lambda \times \mathbf{B})^2. \end{aligned} \quad (7.8)$$

7.2.2. Hopping-Matrixelemente

Die Hopping-Matrixelemente lassen sich ganz analog abschätzen:

$$\begin{aligned} \langle I, \alpha | H_B | I', \alpha' \rangle &= \langle \mathbf{0}, \alpha | T_{M, \mathbf{R}_I}^\dagger H_B(\boldsymbol{\Pi}, \mathbf{r}) T_{M, \mathbf{R}_{I'}} | \mathbf{0}, \alpha' \rangle \\ &= \langle \mathbf{0}, \alpha | T_{M, \mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}}^\dagger H_B(\boldsymbol{\Pi}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) | \mathbf{0}, \alpha' \rangle e^{-\frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{R}_{I'} \times \mathbf{R}_I} \end{aligned} \quad (7.9)$$

$$\approx \langle \mathbf{0}, \alpha | T_{\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}}^\dagger H_B(\boldsymbol{\Pi}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) | \mathbf{0}, \alpha' \rangle e^{-\frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{R}_{I'} \times \mathbf{R}_I} \quad (7.10)$$

Im letzten Schritt wurde die näherungsweise Lokalisierung des Orbitals $|\mathbf{0}, \alpha\rangle$ um den Ursprung und Gl. (6.3) ausgenutzt. Das verbleibende Matrixelement kann wieder mittels Gl. (7.7) in t^0 plus zweier Korrektur-Terme aufgespalten werden:

$$\langle \mathbf{0}, \alpha | T_{\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}}^\dagger H_B(\mathbf{\Pi}, \mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) | \mathbf{0}, \alpha' \rangle \quad (7.11)$$

$$\begin{aligned} &= t_{I\alpha, I'\alpha'}^0 + \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \underbrace{\langle \mathbf{0}, \alpha | T_{\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}}^\dagger (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) | \mathbf{0}, \alpha' \rangle}_{(a')} \\ &\quad - \underbrace{\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'} \times \langle \mathbf{0}, \alpha | T_{\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}}^\dagger \mathbf{p} | \mathbf{0}, \alpha' \rangle}_{(b')} \end{aligned} \quad (7.12)$$

$$- \frac{e\mu_B}{2mc^2} \underbrace{\langle \mathbf{0}, \alpha | T_{\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) \times \mathbf{A}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) | \mathbf{0}, \alpha' \rangle}_{(c')} \quad (7.13)$$

$$+ \underbrace{\frac{e^2 B^2}{8m} \langle \mathbf{0}, \alpha | T_{\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}}^\dagger \left[(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})_x^2 + (\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})_y^2 \right] | \mathbf{0}, \alpha' \rangle}_{(d')} \quad (7.14)$$

Auf analoge Weise lassen sich die Terme (a') bis (d') abschätzen:

- Per Konstruktion sind alle Tight-Binding-Orbitale zu verschiedenen Gitterplätzen orthogonal. Da $(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) |\mathbf{0}, \alpha'\rangle$ aber eine Linearkombination von TB-Orbitalen am Ursprung ist, verschwindet (a') stets.
- Mit der Definition des Impulses in Abschnitt (10.2) könnte man (b') prinzipiell in die Tight-Binding Matrix mit aufnehmen. Mit der gleichen Abschätzung wie bei (b) zeigt man aber, dass die Korrekturen im 1000 T Feld bei wenigen meV liegen und somit vernachlässigbar sind.
- Die Spin-Bahn Koppelung wird in dem verwendeten Tight-Binding Modell lokal genähert. Daher ist es nur konsequent, die nichtlokale Korrektur (c') ebenfalls zu vernachlässigen.
- In der lokalen Näherung verschwindet (d') aus Orthogonalitätsgründen.

Vernachlässigt man also die Korrektur-Terme (b')-(d'), so ergibt sich erstaunlicherweise wieder eine einfache Substitutionsregel für den Übergang vom feldfreien Fall zu den magnetischen TB Matrixelementen, die genau der Erweiterung

der von Peierls abgeleiteten Gleichungen (7.15b) entspricht. Um Letztere in eine eichinvariante Form zu bringen, wird gewöhnlich der Exponent in Form eines Wegintegrals über das Vektorpotenzial $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ vom Zentrum des ket- zum Zentrum des bra-Orbitals entlang einer Gerade geschrieben. In der symmetrischen Eichung gilt:

$$\int_{\mathbf{R}_{I'}}^{\mathbf{R}_I} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_0^1 \mathbf{A}(\mathbf{R}_{I'} + t[\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}]) \cdot [\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}] dt = \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{R}_{I'} \times \mathbf{R}_I$$

Damit kann also die Substitutionsregel ganz allgemein beschrieben werden durch:

$$\epsilon_\alpha^0 \rightarrow \epsilon_\alpha^0 + \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \langle \mathbf{0}, \alpha | \mathbf{L} + 2\mathbf{S} | \mathbf{0}, \alpha \rangle + \frac{e^2}{8m} (\boldsymbol{\tau}_\lambda \times \mathbf{B})^2 \quad (7.15a)$$

$$t_{I\alpha, I'\alpha'}^0 \rightarrow t_{I\alpha, I'\alpha'}^0 \times \exp \left[-\frac{ie}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_{I'}}^{\mathbf{R}_I} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \right] \quad (7.15b)$$

$$= t_{I\alpha, I'\alpha'}^0 \times \begin{cases} \exp \left[-\frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{R}_{I'} \times \mathbf{R}_I \right] & \text{für } \mathbf{A} = -\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \\ \exp \left[\frac{ie}{2\hbar} B (\mathbf{R}_{I'} + \mathbf{R}_I)_x (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)_y \right] & \text{für } \mathbf{A} = (0, xB, 0)^T \end{cases} \quad (7.15c)$$

Diese Substitutionsregeln vervollständigen die in Ref. [79] angegebenen.

7.3. Periodizität der Hopping-Matrixelemente

Die Bedingung, die zur Konstruktion der magnetischen Einheitszelle führt, ist das Vertauschen der Translations-Operatoren $T_{M, \mathbf{R}}$ um magnetische Gittervektoren \mathbf{R} . Nicht notwendigerweise folgt aber daraus, dass der um die Peierls-Phase erweiterte TB-Hamilton auch auf dieser magnetischen Einheitszelle periodisch ist. Gebrochen wird die Periodizität durch das lokale Vektorpotenzial $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, das wiederum nur bis auf einen ebenfalls lokalen Eichterm $\nabla\chi(\mathbf{r})$ bestimmt ist. Obwohl dieser in keine Observable eingeht, bestimmt er bei homogenem Magnetfeld χ letztlich die Periodizität von H . Ein vorzeitiges Abschneiden der berechneten Einheitszelle an den durch Gln. (6.10a, 6.10b, 6.10c) festgelegten Grenzen kann gegebenenfalls zu Phasensprüngen und damit zu Artefakten in den Ergebnissen führen. Daher soll in diesem Abschnitt diskutiert werden ob, und wenn ja wie

die magnetische Einheitszelle vergrößert werden muss. Eine Bedingung an das Kristallgitter, die sich aus dieser Betrachtung ergibt, ist, was im Folgenden als **rationales Gitter** bezeichnet wird.

Fordert man die Periodizität der Hamiltonmatrix, also insbesondere

$$t_{\mathbf{R}_I, \alpha, \mathbf{R}_{I'}, \alpha'} = t_{\mathbf{R}_I + \mathbf{R}, \alpha, \mathbf{R}_{I'} + \mathbf{R}, \alpha'}, \quad (7.16)$$

wobei \mathbf{R} ein beliebiger magnetischer Gittervektor sein soll, stellt dies letztlich eine Bedingung für die Peierls-Phase dar:

$$\exp \left[-\frac{ie}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_{I'}}^{\mathbf{R}_I} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \right] = \exp \left[-\frac{ie}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_{I'} + \mathbf{R}}^{\mathbf{R}_I + \mathbf{R}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \right]. \quad (7.17)$$

Exemplarisch für die vielfältigen Eichungen sollen im Folgenden die symmetrische und die asymmetrische Eichung betrachtet werden. Für andere Eichungen lassen sich analoge Relationen ableiten.

7.3.1. Symmetrische Eichung

Für die *symmetrische Eichung* $\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}$ wird aus Gl. (7.17) unter Verwendung von Gl. (7.15c)

$$\exp \left[-\frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{R}_{I'} \times \mathbf{R}_I \right] = \exp \left[-\frac{ie}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_{I'} \times \mathbf{R}_I + (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I) \times \mathbf{R}) \right],$$

und damit letztlich

$$n = \frac{e}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I) \times \mathbf{R} \quad \text{mit } n \in \mathbb{Z}. \quad (7.18)$$

Setzt man hierin den Ausdruck aus Gl. (6.11) für das Magnetfeld ein, folgt

$$n = \frac{1}{2V_0} \frac{P}{Q} \mathbf{a}'_3 \cdot (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I) \times \mathbf{R}, \quad (7.19)$$

wobei V_0 das Volumen der feldfreien Einheitszelle ist.

Des Weiteren muss angenommen werden, dass alle Basisvektoren $\boldsymbol{\tau}_\lambda$ sich als Linearkombination der Gittervektoren mit *rationalen Koeffizienten* schreiben lassen, d.h.

$$\boldsymbol{\tau}_\lambda = \sum_i \frac{x_{\lambda,i}}{y_{\lambda,i}} \mathbf{a}_i \quad \text{mit } \forall_{\lambda, i \in \{1,2,3\}} y_{\lambda,i} \in \mathbb{N}, x_{\lambda,i} \in \mathbb{Z}. \quad (7.20)$$

In Anlehnung an das rationale Magnetfeld wird für ein derartiges Gitter die Bezeichnung *rationales Gitter* eingeführt. Offensichtlich ist diese Bedingung für primitive Bravais-Gitter trivialerweise erfüllt. Aber auch Gitterstrukturen mit Basis, wie Zinkblende, Kochsalz, Cäsium Chlorid oder Fluorit sind rationale Gitter. Jedoch sind die Wurzit-Struktur und die hexagonal dichteste Kugelpackung Beispiele für irrationale Gitter, da hier in den Koeffizienten Wurzeln auftauchen. Wie sich im Folgenden zeigt, kann ein irrationales Gitter durchaus mit dieser Methode behandelt werden, falls die einzige „irrationale Richtung“ — z.B. die c-Achse in obigen beiden Beispielen — mit der Magnetfeldrichtung zusammenfällt. Des Weiteren kann natürlich jedes irrationale Gitter durch ein rationales genähert werden.

Der Differenzvektor ($\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I$) lässt sich dann als rationales Vielfaches der \mathbf{a}_i schreiben:

$$\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I = \sum_i \frac{x_{i,I'I}}{y_{i,I'I}} \mathbf{a}_i. \quad (7.21)$$

Sei nun y_i das kleinste gemeinsame Vielfache aller $y_{i,I'I}$:

$$y_i := \text{KGV}(y_{i,I'I}, \dots) \quad \text{mit } i \in \{1, 2, 3\}. \quad (7.22)$$

Analog definiert man ganzzahlige m_i mit $i = 1, 2, 3$ zur Zerlegung des magnetischen Gittervektors \mathbf{R} :

$$\mathbf{R} = m_1 \mathbf{a}'_1 + m_2 \mathbf{a}'_2 + m_3 \mathbf{a}'_3. \quad (7.23)$$

Nach dem Einsetzen von Gl. (7.23) und Gl. (7.21) in Gl. (7.19) erhält man die Bedingung:

$$\begin{aligned} n &= \sum_i \frac{1}{2V_0} \frac{P}{Q y_i} \mathbf{a}'_3 \cdot \mathbf{a}_i \times \left(\sum_j m_j \mathbf{a}'_j \right) \\ &= \sum_i \frac{1}{2V_0} \frac{P}{Q y_i} \mathbf{a}'_3 \cdot \mathbf{a}_i \times (m_1 \mathbf{a}'_1 + m_2 \mathbf{a}'_2). \end{aligned}$$

Zusammen mit den Gln. (6.10a,6.10b,6.10c) gilt

$$\begin{aligned} n &= \sum_{i,j} \frac{1}{2V_0} \frac{p_j}{y_i q_j} \mathbf{a}_j \cdot \mathbf{a}_i \times (m_1 Q \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2) \\ &= \frac{1}{2} \left(\left[\frac{p_2}{y_3 q_2} - \frac{p_3}{y_2 q_3} \right] m_1 Q + \left[\frac{p_3}{y_1 q_3} - \frac{p_1}{y_3 q_1} \right] m_2 \right). \end{aligned} \quad (7.24)$$

Zwar ist Q per Konstruktion ein Vielfaches von q_2 und q_3 , doch ist damit noch nicht garantiert, dass Gl. (7.24) eine ganze Zahl ist. Damit dies zutrifft sind folgende Bedingungen zu erfüllen:

$$m_1 = \text{Nenner} \left[\frac{p_2 Q}{2y_3 q_2} - \frac{p_3 Q}{2y_2 q_3} \right], \quad (7.25a)$$

$$m_2 = \text{Nenner} \left[\frac{p_3}{2y_1 q_3} - \frac{p_1}{2y_3 q_1} \right]. \quad (7.25b)$$

„Nenner()“ bezeichnet den Nenner des *gekürzten* Bruchs, bzw. 1, falls dieser gleich Null ist. Da sich für m_3 keine Restriktion ergibt, kann m_3 gleich 1 gesetzt werden. Interessanterweise definiert in einem Kristall mit Basis *nicht allein* die aus den Translations-Operatoren folgende magnetische Einheitszelle die Periodizität des Hamilton-Operators. Diese ist statt dessen durch die *erweiterte magnetische Einheitszelle* gegeben:

$$\mathbf{a}'_1 = m_1 Q \mathbf{a}_1 \quad (7.26a)$$

$$\mathbf{a}'_2 = m_2 \mathbf{a}_2 \quad (7.26b)$$

$$\mathbf{a}'_3 = \frac{Q p_1}{P q_1} \mathbf{a}_1 + \frac{Q p_2}{P q_2} \mathbf{a}_2 + \frac{Q p_3}{P q_3} \mathbf{a}_3. \quad (7.26c)$$

Für primitive Gitter ist m_1 wegen $y_i = 1$ höchstens 2. Eine analoge Aussage kann aber über m_2 nicht gemacht werden.

7.3.2. Asymmetrische Eichung

Für die numerischen Rechnungen wird ausschließlich die asymmetrische Eichung $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$ verwendet. Welche Bedingungen sich hierbei für die (erweiterte) magnetische Einheitszelle ergeben, wird im Folgenden kurz diskutiert. Es sei wieder angenommen, dass der zugrunde liegende Kristall ein rationales Gitter besitzt und o.B.d.A. das Magnetfeld in z -Richtung orientiert ist. Der Einfachheit halber sollen die primitiven Translationen senkrecht aufeinander stehen, so dass \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 und \mathbf{a}_3 jeweils parallel zur x , y und z -Achse orientiert sind. Gl. (7.17) gibt dann zusammen mit Gl. (7.15c)

$$\exp \left[\frac{ie}{2\hbar} B (\mathbf{R}_{I'} + \mathbf{R}_I)_x (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)_y \right] = \exp \left[\frac{ie}{2\hbar} B (\mathbf{R}_{I'} + \mathbf{R}_I + 2\mathbf{R})_x (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)_y \right]$$

bzw.

$$n = \frac{e}{h} B(\mathbf{R})_x (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)_y, \quad (7.27)$$

wobei n wieder eine ganze Zahl ist. Mit den gleichen Ansätzen (Gln. (7.21,7.23)) für \mathbf{R} und $\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I$ reduziert sich Gl.(7.27) mit Gln. (6.10a,6.10b,6.10c) zu

$$n = m_1 \frac{P}{y_2}.$$

Aus dieser Gleichung resultiert die im Vergleich zu den Gln. (7.25a,7.25b) deutlich schwächere Bedingung

$$m_1 = \text{Nenner} \left[\frac{P}{y_2} \right]. \quad (7.28)$$

Sowohl m_2 wie m_3 können gleich 1 gesetzt werden. Die erweiterte magnetische Einheitszelle im orthorhombischen Fall bei asymmetrischer Eichung ist daher

$$\begin{aligned} \mathbf{a}'_1 &= m_1 Q \mathbf{a}_1, \\ \mathbf{a}'_2 &= \mathbf{a}_2, \\ \mathbf{a}'_3 &= \mathbf{a}_3. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Im Allgemeinen ist die erweiterte magnetische Einheitszelle bei asymmetrischer Eichung kleiner als bei symmetrischer.

Beispiele, welche die Anwendung obiger Methoden verdeutlichen, erfolgen zusammen mit der konkreten Berechnung von Magnetobandstrukturen in Kapitel 12.1.

KAPITEL 8

SYMMETRIEN IM MAGNETFELD II: DIE PUNKT-GRUPPE

8.1. Symmetrien der Peierls-Phase

Bevor auf die Punkt-Gruppe des Hamilton-Operators im Magnetfeld eingegangen wird, soll zuerst gezeigt werden, dass der um die Peierls-Phase erweiterte Tight-Binding Hamilton-Operator die identischen Transformations-Eigenschaften besitzt wie die konventionelle Operator-Darstellung im Magnetfeld. Letztere kann dann direkt untersucht werden. Da die Eichinvarianz des TB-Hamilton-Operators ausführlich in [87] diskutiert wurde, wird auf eine Wiederholung hier verzichtet.

Prinzipiell fallen all diejenigen Symmetrie-Operationen aus der Punkt-Gruppe heraus, welche die Magnetfeldachse nicht in sich selbst überführen. Damit verbleiben neben den Translationen, die Gegenstand des Kapitels 6 sind, Spiegelungen, bei denen \mathbf{B} senkrecht oder parallel zur Spiegelebene liegt, die Inversion und Rotationen um die Magnetfeldachse sowie C_2 -Rotationen senkrecht zur Feldachse. Obwohl nicht zur Punkt-Gruppe gehörend wird auch die Zeitumkehr-Operation diskutiert, da diese — obwohl im Magnetfeld selbst keine Symmetrie-Operation — zusammen mit anderen gebrochenen Symmetrien wieder mit dem Hamilton-Operator kommutiert.

Die in diesem Kapitel erarbeiteten Methoden werden in Kapitel 11 und 12 auf Zinkblende-Strukturen angewandt.

8.1.1. Drehungen um die Magnetfeldachse

Für homogene Magnetfelder in symmetrischer Eichung und für die Integration der Peierls-Phase entlang einer Geraden kann gezeigt werden, dass jede Drehung der Anfangs- und Endpunkte $\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_f$ um die \mathbf{B} -Achse die Peierls-Phase invariant lässt. Besitzt also der Kristall eine beliebige Drehsymmetrie um die \mathbf{B} -Achse, wird diese durch das Magnetfeld nicht gebrochen. Im Falle asymmetrischer Eichung reduziert sich diese Symmetrie jedoch formal auf C_2 . Obwohl diese Symmetrie-Reduktion auf keine Observable wirkt, beeinflusst sie doch nichteichinvariante Größen wie die Wellenfunktionen.

8.1.2. Spiegel-Symmetrien

Zunächst sind zwei Arten von Spiegel-Symmetrien zu unterscheiden: Solche bei denen die \mathbf{B} -Richtung in der Spiegelebene liegt (z.B.: $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_{xy}, \dots$) und solche bei denen sie senkrecht zur Spiegelebene steht (σ_z). Durch elementare Überlegungen kann für den ersten Fall gezeigt werden, dass sie das Vorzeichen der Peierls-Phase umkehren. Dies entspricht auch den Erwartungen die sich aus der Wirkung einer in der xy -Ebene kreisenden Ladung ergibt: Eine derartige Spiegelung kehrt den Umlaufsinn und damit das Vorzeichen des von der Ladung erzeugten Feldes um. Anders verhält es sich mit der Spiegelung an der xy -Ebene (σ_z). In Einklang mit physikalischen Überlegungen (Umlaufsinn der in xy -kreisenden Ladung ändert sich nicht) kommutiert σ_z mit der Peierls-Phase.

8.1.3. Zeitumkehr-Symmetrie

Der Zeitumkehr-Operator K eines Systems mit Spin setzt sich aus zwei Komponenten zusammen [88]: Der komplexen Konjugation K_0 und einer (unitären) Rotation im Spinraum. Üblicherweise wird für Letztere die mit i multiplizierte zweite Pauli Matrix σ_y verwendet:

$$K = K_0 i\sigma_y = K_0 \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (8.1)$$

Diese Form des Zeitumkehr-Operators ergibt sich aus der Forderung, dass der Hamilton-Operator mit Spin-Bahn Koppelung bis auf einen Vorzeichen-Wechsel

des Vektorpotenzials mit K kommutiert, d.h.

$$K^{-1}\boldsymbol{\sigma}K = -\boldsymbol{\sigma} \quad (8.2)$$

$$K^{-1}\mathbf{p}K = -\mathbf{p} \quad (8.3)$$

$$\begin{aligned} K^{-1}HK &= K^{-1} \left(e\phi + \frac{(\mathbf{p}+e\mathbf{A})^2}{2m} + \frac{i\mu_B}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{A} - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\phi \times (\mathbf{p}+e\mathbf{A}) \right) K \\ &= e\phi + \frac{(\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2}{2m} + \frac{i\mu_B}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times (-\mathbf{A}) - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\phi \times (\mathbf{p}-e\mathbf{A}). \end{aligned} \quad (8.4)$$

Das Vorzeichen des Impulses (und damit der Stromdichte) wird durch K umgedreht, während der Orts-Operator mit K kommutiert. Im Folgenden sind mit \mathbf{A} und \mathbf{B} stets externe Felder gemeint¹. Ein Hamilton-Operator wird somit i.A. nur mit K kommutieren, wenn auch das Vorzeichen des Magnetfeldes wechselt. Ein externes Feld bricht daher die Zeitumkehr-Symmetrie, da dieses invariant unter K ist:

$$\begin{aligned} K^{-1}\mathbf{B}K &= \mathbf{B} \\ K^{-1}\mathbf{A}K &= \mathbf{A} \end{aligned} \quad (8.5)$$

Wendet man obige Regeln auf die einzelnen Komponenten der Peierls-Phase an ergibt sich:

$$K^{-1} \frac{ie}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} K = -\frac{ie}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \quad (8.6)$$

Die Peierls-Phase ändert also unter dem Zeitumkehr-Operator das Vorzeichen. Zusammen mit dem bekannten Transformations-Verhalten der feldfreien Tight-Binding Hamilton-Matrix kann daher geschlossen werden, dass die Peierls-Phase eine konsistente Erweiterung der Theorie darstellt und sich der Magnetfeld-Hamilton-Operator identisch mit der Operator-Darstellung transformiert:

$$K^{-1}H(\mathbf{k}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B})K = H(-\mathbf{k}, -\boldsymbol{\sigma}, -\mathbf{B}) \quad (8.7)$$

¹Wird ein Magnetfeld vom System selbst erzeugt, so kehrt sich das Vorzeichen des Feldes bei der Anwendung von K um, wie man anhand eines Gedanken-Experiments verdeutlichen kann: Ein im Uhrzeigersinn kreisendes Elektron wird nach der Zeitumkehr gegen den Uhrzeigersinn kreisen. Das von ihr erzeugte Feld ändert damit auch sein Vorzeichen.

Hier stellen \mathbf{A} und \mathbf{B} jedoch externe Felder dar, die sich wie konstante Parameter verhalten.

In der Tight-Binding Darstellung liest sich dies:

$$\begin{aligned}
& K^{-1} \langle \mathbf{k}\alpha (\lambda, \beta, s) | H (\mathbf{B}) | \mathbf{k}\alpha' (\lambda', \beta', s') \rangle K \\
&= \sum_{L, L'} e^{i(-\mathbf{k}) \cdot (\mathbf{R}_{L'} - \mathbf{R}_L) - \frac{ie}{\hbar} \int_{\mathbf{R}_{L'}}^{\mathbf{R}_L} (-\mathbf{A}) \cdot d\mathbf{r}} \\
&\quad \times \left(t_{L\alpha, L'\alpha'} + \delta_{L, L'} \delta_{\alpha, \alpha'} \epsilon_{\alpha}^0 + \delta_{L, L'} \delta_{\beta\lambda, \beta'\lambda'} \left[\langle H_{SO} \rangle_{-\sigma, -\sigma'} - \mu_B \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{-s, -s'} \cdot \mathbf{B} \right] \right) \\
&= \langle -\mathbf{k}\alpha (\lambda, \beta, -s) | H (-\mathbf{B}) | -\mathbf{k}\alpha' (\lambda', \beta', -s') \rangle.
\end{aligned}$$

Besitzt der Kristall eine $C_{2,n}$ Drehsymmetrie senkrecht zum Feld oder liegt das Feld in einer Spiegelebene σ' wird üblicherweise K dieser nachgeschaltet, da die kombinierte Operation

$$\kappa = OK \quad (8.8)$$

mit $O \in \{C_{2,n}, \sigma'\}$ mit dem Hamilton-Operator kommutiert $[H, \kappa] = 0$. Für die symmetrische Eichung $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B}$ sind die Wegelemente der Peierls-Phase invariant unter O :

$$O^{-1} (d\mathbf{r} \times \mathbf{r} \cdot \mathbf{B}) O = (d\mathbf{r} \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{B} \quad (8.9)$$

und somit ist die gesamte Phase invariant unter κ . Obwohl weder K noch O eine Symmetrie-Operation des Hamilton-Operators ist, ist die Verkettung beider Operationen sehr wohl eine Symmetrie-Operation, ähnlich wie dies bei der Gleitspiegel-Symmetrie in der Kristallographie der Fall ist.

8.2. Symmetrien des gesamten Hamilton-Operators

Nachdem im letzten Abschnitt gezeigt wurde, dass sich die um die Peierls-Phase erweiterte Hamiltonmatrix wie die übliche Operator-Darstellung von H transformiert, soll nun anhand der Operatorform die (verbleibenden) Symmetrie-Operationen im endlichen Feld behandelt werden. Die Kristalle, die in dieser Arbeit von Interesse sind, besitzen ausschließlich die Zinkblende Struktur. Deshalb soll bereits hier speziell auf die Symmetrie-Operationen dieser Gruppe ($T_d^2, F43m$) eingegangen werden.

Enthält der Hamilton-Operator sowohl Magnetfeld-Terme als auch Spin-Bahn-Koppelungs-Terme

$$H = e\phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \right)^2 + \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{r} \times \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (8.10)$$

muss eine Rotation, die den Hamilton-Operator in sich überführen soll, gleichermaßen auf den Spin- wie auf den Ortsraum wirken. Die Generatoren einer infinitesimalen Drehung um eine Achse \mathbf{n} sind dabei die Skalarprodukte von \mathbf{n} mit dem Pauli-Spin-Matrixvektor $\boldsymbol{\sigma}$ ($SU(2)$) bzw. dem Drehimpuls-Vektor \mathbf{L} ($SO(3)$). Der Drehoperator um einen Winkel $-\alpha$ im mathematisch positiven Sinn lautet:

$$C_{\frac{2\pi}{\alpha}, \mathbf{n}} = \exp(-i\alpha \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}) \exp\left(-\frac{i}{2} \alpha \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) = \exp\left(-i\alpha \mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{L} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}\right)\right). \quad (8.11)$$

Wird der Orts- bzw. Spin-Operator von O^{-1} und O umklammert, transformiert er sich um den Winkel $+\alpha$ im mathematisch positiven Sinn:

$$\mathbf{r}' = C_{\frac{2\pi}{\alpha}, \mathbf{n}}^{-1} \mathbf{r} C_{\frac{2\pi}{\alpha}, \mathbf{n}} = \mathbf{r} \cos \alpha + \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \mathbf{r} (1 - \cos \alpha) + \mathbf{n} \times \mathbf{r} \sin \alpha, \quad (8.12)$$

$$\boldsymbol{\sigma}' = C_{\frac{2\pi}{\alpha}, \mathbf{n}}^{-1} \boldsymbol{\sigma} C_{\frac{2\pi}{\alpha}, \mathbf{n}} = \boldsymbol{\sigma} \cos \alpha + \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} (1 - \cos \alpha) + \mathbf{n} \times \boldsymbol{\sigma} \sin \alpha. \quad (8.13)$$

Uneigentliche Drehungen, wie z.B. Spiegelungen und Drehspiegelungen, lassen sich in eine Inversion C_i und eine reine Drehung zerlegen. Da \mathbf{L} und $\boldsymbol{\sigma}$ Pseudo-Vektoren sind, also mit C_i kommutieren, kann bis auf eine irrelevante Phase die Wirkung der Inversion auf den Ortsraum beschränkt werden [88]:

$$C_i \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(-\mathbf{r}) \\ \psi_{\downarrow}(-\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (8.14)$$

Das Magnetfeld $\mathbf{B} \parallel \hat{\mathbf{e}}_z$ verhält sich bei all diesen Operationen *wie ein Parameter und wird daher nicht wie ein Vektor transformiert*. Als direkte Konsequenz ergibt sich daraus, dass Symmetrie-Operationen von T_d^2 , welche die Magnetfeldrichtung nicht in sich überführen, durch das Feld gebrochen werden. Sollten von diesen Operationen einige lediglich Vorzeichen der z -Richtung umkehren, d.h. $O^{-1} \hat{\mathbf{e}}_z O = -\hat{\mathbf{e}}_z$, stellen sie zusammen mit der Zeitumkehr-Operation $K = K_0 i \sigma_y$ wieder Symmetrie-Operationen dar:

$$O^{-1} K^{-1} H(\mathbf{k}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B}) K O = O^{-1} H(-\mathbf{k}, -\boldsymbol{\sigma}, -\mathbf{B}) O \quad (8.15)$$

$$= H(-O^{-1} \mathbf{k} O, -O^{-1} \boldsymbol{\sigma} O, \mathbf{B}) \quad (8.16)$$

Diese Operatoren KO bilden zusammen mit der verbleibenden Punkt-Gruppe eine erweiterte Gruppe, die den Magnetgruppen für (anti-) ferromagnetische Festkörper ähnelt² [89, 90].

Im Folgenden soll nun die Punkt-Gruppe des Zinkblende-Kristalls für Magnetfeld-Richtungen [001] und [011] diskutiert werden. Die Bezeichnung der Operationen erfolgt in der üblichen Schönflies-Notation [91].

8.2.1. Zinkblende-Kristall im [001]-Magnetfeld

Von den 24 Symmetrie-Operationen der T_d^2 Gruppe führen lediglich vier ($E, S_{4z}, C_{2z}, S_{4z}^3$) die [001]-Richtung in sich über. Weitere vier Operationen ($C_{2x}, C_{2y}, \sigma_{xy}, \sigma_{x\bar{y}}$) ändern effektiv das Vorzeichen des Magnetfeldes und werden durch Nachschalten der Zeitumkehr wieder zu einer Symmetrie-Operation. Die verbleibende Gruppe enthält damit acht Elemente, welche alle mit dem Hamilton-Operator (8.10) vertauschen: $\{E, S_{4z}, C_{2z}, S_{4z}^3, K\sigma_{xy}, K\sigma_{x\bar{y}}, KC_{2x}, KC_{2y}\}$. Letzteres soll exemplarisch an S_{4z} und $K\sigma_{xy}$ gezeigt werden:

Zunächst kann man mittels der Zerlegung $S_{4z} = C_i C_{4z}$ und durch Einsetzen von $\mathbf{n} = (0, 0, 1)^T$ und $\alpha = \pi/2$ in die Gln. (8.11, 8.14, 8.1) die Orts- und Spinraum-Darstellung von S_{4z} angeben werden:

$$S_{4z} = C_i C_{4z} \quad (8.17)$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \frac{1 - i\sigma_z}{\sqrt{2}}. \quad (8.18)$$

Die 2×2 -Matrix $(1 - i\sigma_z)/\sqrt{2}$ bewirkt eine C_{4z} -Rotation des Pauli-Vektors $\boldsymbol{\sigma}$. Angewandt auf die einzelnen Operatoren ergibt sich ($O_S := O_{S_{4z}}$):

$$O_{S_{4z}}^{-1} \mathbf{r} O_{S_{4z}} = (y, -x, -z)^T, \quad (8.19)$$

$$O_{S_{4z}}^{-1} \mathbf{p} O_{S_{4z}} = (p_y, -p_x, -p_z)^T, \quad (8.20)$$

$$O_{S_{4z}}^{-1} \boldsymbol{\sigma} O_{S_{4z}} = (-\sigma_y, \sigma_x, \sigma_z)^T. \quad (8.21)$$

Wendet man diese drei Gleichungen auf die einzelnen Terme des Hamilton-Opera-

²Das Gegenstück zu K in Magnetgruppen unterscheidet sich vom Zeitumkehr-Operator.

tors Gl. (8.10) an, folgt für die feldabhängigen Summanden:

$$O_{S_{4z}}^{-1} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \right)^2 O_{S_{4z}} = O_{S_{4z}}^{-1} \left[\left(p_x - \frac{e}{2} y B \right)^2 + \left(p_y + \frac{e}{2} x B \right)^2 + p_z^2 \right] O_{S_{4z}} \quad (8.22)$$

$$\begin{aligned} &= \left(p_y + \frac{e}{2} x B \right)^2 + \left(-p_x + \frac{e}{2} y B \right)^2 + (-p_z)^2 \\ &= \left(\mathbf{p} - \frac{e}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \right)^2 \end{aligned}$$

$$O_S^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} O_S = \sigma_z B = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (8.23)$$

Bei $K\sigma_{xy}$ lautet die entsprechende Zerlegung

$$K\sigma_{xy} = K C_i C_{4z} C_{2x} \quad (8.24)$$

$$= K_0 i \sigma_y \begin{bmatrix} 0 & 1 & \\ 1 & 0 & \\ & & 1 \end{bmatrix} \frac{1 - i \sigma_z}{\sqrt{2}} i \sigma_x. \quad (8.25)$$

Die Wirkung von $O_\sigma = O_{K\sigma_{xy}}$ auf Orts-, Impuls- und Spinmatrix ergibt sich damit zu

$$O_\sigma^{-1} \mathbf{r} O_\sigma = K^{-1} (y, x, z)^T K = (y, x, z)^T, \quad (8.26a)$$

$$O_\sigma^{-1} \mathbf{p} O_\sigma = K^{-1} (p_y, p_x, p_z)^T K = (-p_y, -p_x, -p_z)^T, \quad (8.26b)$$

$$O_\sigma^{-1} \boldsymbol{\sigma} O_\sigma = K^{-1} (-\sigma_y, -\sigma_x, -\sigma_z)^T K = (\sigma_y, \sigma_x, \sigma_z)^T. \quad (8.26c)$$

Setzt man Gl. (8.26a,8.26b,8.26c) in den Hamilton-Operator ein, folgt für die explizit vom Magnetfeld abhängigen Terme:

$$O_\sigma^{-1} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \right)^2 O_\sigma = O_\sigma^{-1} \left[\left(p_x - \frac{e}{2} y B \right)^2 + \left(p_y + \frac{e}{2} x B \right)^2 + p_z^2 \right] O_\sigma \quad (8.27)$$

$$\begin{aligned} &= \left(-p_y - \frac{e}{2} x B \right)^2 + \left(-p_x + \frac{e}{2} y B \right)^2 + (-p_z)^2 \\ &= \left(\mathbf{p} - \frac{e}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \right)^2 \end{aligned}$$

$$O_\sigma^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} O_\sigma = \sigma_z B = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (8.28)$$

Mit analogen Überlegungen kann leicht die Invarianz des Hamilton-Operators unter den verbleibenden sechs Operationen gezeigt werden.

Anhand der Gln. (8.22,8.27) ist ersichtlich, dass obige Identitäten nicht mehr bei asymmetrischer Eichung gelten. Wie in Abschnitt 8.1.1 erwähnt, wird dadurch *scheinbar* die x - gegenüber der y -Achse ausgezeichnet. Die verbleibende Gruppe besteht dann aus den Elementen $\{E, C_{2z}, KC_{2x}, KC_{2y}\}$, also allen Operationen aus obiger Gruppe, die keine 90° -Drehung als Teilelement verwenden.

Mittels dieser Symmetrie-Operationen können Beziehungen zwischen den Impuls-Matrixelementen abgeleitet werden. So folgt z.B. aus KC_{2x} :

$$\begin{aligned}
p_{x,nm}(k_x, k_y, k_z) &= \langle n, k_x, k_y, k_z | p_x C_{2x}^{-1} K^{-1} K C_{2x} | m, k_x, k_y, k_z \rangle & (8.29) \\
&= - \langle n, k_x, k_y, k_z | C_{2x}^{-1} K^{-1} p_x K C_{2x} | m, k_x, k_y, k_z \rangle \\
&= - \langle n, k_x, -k_y, -k_z | K^{-1} p_x K | m, k_x, -k_y, -k_z \rangle \\
&= - \langle m, -k_x, k_y, k_z | p_x | n, -k_x, k_y, k_z \rangle \\
&= -p_{x,mn}(-k_x, k_y, k_z) & (8.30)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
p_{y,nm}(k_x, k_y, k_z) &= \langle n, k_x, k_y, k_z | p_y C_{2x}^{-1} K^{-1} K C_{2x} | m, k_x, k_y, k_z \rangle & (8.31) \\
&= \langle n, k_x, k_y, k_z | C_{2x}^{-1} K^{-1} p_y K C_{2x} | m, k_x, k_y, k_z \rangle \\
&= \langle m, -k_x, k_y, k_z | p_y | n, -k_x, k_y, k_z \rangle \\
&= p_{y,mn}(-k_x, k_y, k_z) & (8.32)
\end{aligned}$$

Diese beiden Relationen, die ebenso bei in $[011]$ -Richtung orientiertem Feld gelten, reduzieren zusammen mit den anderen verbleibenden Symmetrie-Operationen den numerischen Aufwand bei der \mathbf{k} -Raumintegration erheblich. Effektiv genügt es also die Zustände der Brillouin-Zone für $k_x, k_y \geq 0$ zu berechnen. Wird die symmetrische Eichung verwendet, kann der irreduzible Keil durch $k_z \geq 0$ noch einmal halbiert werden.

8.2.2. Zinkblende-Kristall im $[011]$ -Magnetfeld

Eine äquivalente Vorgehensweise für ein in $[011]$ -Richtung liegendes Magnetfeld liefert bei symmetrischer Eichung die Gruppe $\{E, \sigma_{yz}, KC_{2x}, K\sigma_{yz}\}$. Im Falle asymmetrischer Eichung (Auszeichnung der $[01\bar{1}]$ Achse) reduziert sich die Zahl der Gruppen-Elemente nicht weiter, da $[100]$ und $[01\bar{1}]$ bereits inäquivalente Richtungen sind. Bezeichnet man die orthogonalen Richtungen $[100], [01\bar{1}], [011]$ mit

x' , y' bzw. z' , so lauten die Entartungen

$$\begin{aligned}
 E_n(k_{x'}, k_{y'}, k_{z'}, \sigma_{x'}, \sigma_{y'}, \sigma_{z'}) &= E_n(k_{x'}, -k_{y'}, -k_{z'}, -\sigma_{x'}, \sigma_{y'}, \sigma_{z'}) \\
 &= E_n(k_{x'}, -k_{y'}, k_{z'}, \sigma_{x'}, -\sigma_{y'}, \sigma_{z'}) \\
 &= E_n(k_{x'}, k_{y'}, -k_{z'}, \sigma_{x'}, \sigma_{y'}, -\sigma_{z'}) \quad (8.33)
 \end{aligned}$$

Entsprechende Relationen lassen sich auch für Impulsmatrix-Produkte $p_{i,nm}(\mathbf{k})$ $p_{j,mn}(\mathbf{k})$ ableiten. Zusammen mit obigen Entartungen lässt sich damit die Berechnung der \mathbf{k} -Raum Zustände auf das irreduzible Segment $k_x, k_y \geq 0$ einschränken.

8.3. Symmetrie-Operationen bei asymmetrischer Eichung

In einem orthorhombischen Kristall-System wird die magnetische Einheitszelle bei asymmetrischer Eichung $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$ stabförmig entlang der x -Achse. Im Falle der symmetrischen Eichung ist sie jedoch sowohl in x - als auch in y -Richtung um ein Vielfaches der feldfreien Einheitszelle vergrößert. Entsprechend höher ist damit in letzterem Falle die Zahl der Basisatome in der magnetischen Einheitszelle und damit der numerische Aufwand zur Diagonalisierung der Hamiltonmatrix. Zur Berechnung der Bandstruktur wird daher stets die asymmetrische Eichung verwendet.

Die kleinere Einheitszelle scheint man sich durch eine deutlich größere Brillouin-Zone als im symmetrischen Fall zu erkaufen, was nachteilig für die notwendige \mathbf{k} -Raum-Integration wäre. Wie im Folgenden gezeigt wird, ist dies jedoch nicht der Fall: Die primitiven Translationen $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$) spannen die Wigner-Seitz-Zelle (Brillouin-Zone) des feldfreien Kristalls und $Q\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ bzw. $\frac{1}{Q}\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ die entsprechenden Zellen im Magnetfeld auf. Ein Eigenzustand $|n\mathbf{k}\rangle$ in einem beliebigen \mathbf{k} -Raum Punkt der Brillouin-Zone kann dann aus einem Zustand $|n\mathbf{k}'\rangle$ konstruiert werden, wobei \mathbf{k}' innerhalb der von $\frac{1}{Q}\mathbf{b}_1, \frac{1}{Q}\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ aufgespannten Subzelle liegt. Letztere entspricht aber gerade der Brillouin-Zone bei symmetrischer Eichung. Der Ursprung dieser „verborgenen“ Symmetrie liegt in der Freiheit der Wahl des Eichursprungs.

Analog können Matrixelemente wie die Eigenenergie oder Impuls-Matrixelemente auf die verkleinere Brillouin-Zone zurückgefaltet werden. Das \mathbf{k} -Raum Hamiltonmatrixelement zweier Orbitale mit $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$ ergibt sich nach den Gln.

(1.3,7.1,7.2) zu:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}, \alpha | H | \mathbf{k}, \alpha' \rangle &= \sum_{L, m, L', m'} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)} \langle I, \alpha | H | I', \alpha' \rangle \\
&= \sum_{L, m, L', m'} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)} t_{I\alpha, I'\alpha'} + \delta_{I, I'} \langle I, \alpha | H | I, \alpha' \rangle \\
&= \sum_{L, m, L', m'} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)} e^{i\frac{eB}{2\hbar}(\mathbf{R}_{I'} + \mathbf{R}_I)_x (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)_y} t_{I\alpha, I'\alpha'}^0 \\
&\quad + \delta_{I, I'} \langle I, \alpha | H | I, \alpha' \rangle \\
&= \sum_{L, m, L', m'} e^{i\{k_x(\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)_x + [k_y + \frac{eB}{2\hbar}(\mathbf{R}_{I'} + \mathbf{R}_I)_x](\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)_y + k_z(\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)_z\}} \\
&\quad \times t_{I, \alpha, I', \alpha'}^0 + \delta_{I, I'} \langle I, \alpha | H | I, \alpha' \rangle
\end{aligned} \tag{8.34}$$

Mit $(\dots)_i$ wurde dabei die i -te Komponente des Vektors bezeichnet. Anhand der letzten Gleichung wird deutlich, dass bis auf den mittleren Summanden im Exponenten nur die Positions-Differenzen zweier Atome in das Säkular-Problem eingeht. Liegt nun eine der primitiven Translationen \mathbf{a}_1 des Gitters parallel zur x -Achse, so ist eine Verschiebung des Eichursprungs um $-\mathbf{a}_1$ durch Umeichen äquivalent zu einer Erhöhung von k_y um $\frac{e}{\hbar}Ba_1$, da beides zusammen die Hamiltonmatrix invariant lässt. Ist nun ein Eigenvektor

$$|n, \mathbf{k}\rangle = \sum_{m, \alpha} C_{m, n\alpha}(\mathbf{k}) |m, \alpha, \mathbf{k}\rangle \tag{8.35}$$

des Hamilton-Operators zur Eigenenergie $E_n(\mathbf{k})$ bekannt, so ist umgekehrt der Eigenvektor $|n, \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}B\mathbf{a}_1\rangle$ zur Eigenenergie $E_n(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}B\mathbf{a}_1) = E_n(\mathbf{k})$ gegeben durch

$$\left| n, \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}B\mathbf{a}_1 \right\rangle = \sum_{I, \alpha} C_{m-1, n\alpha}(\mathbf{k}) \left| m, \alpha, \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}B\mathbf{a}_1 \right\rangle \tag{8.36}$$

Wobei mit C_{m-1} eine zyklische Rotation des Kristallzellen-Index gemeint ist. Jeder Zustand ist also Q -fach entartet, wobei $P/Q\Phi_0$ der Fluss durch die Einheitszelle ist. Ist nun die Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit entlang der x -Achse sehr ungleich verteilt, was aufgrund der Kontraktion der Wellenfunktion im Magnetfeld der Fall ist, bewirkt eine Erhöhung von k_y um $\frac{e}{\hbar}Ba_1$ eine Verschiebung der Verteilung entlang der x -Achse, wie aus Gl. (8.34) ersichtlich ist. Genau dies ist auch das Ergebnis von Rechnungen; so zeigt Abb. 8.1 den Betrag der gemittelten TB-Wellenfunktion entlang der Längsachse der magnetischen Einheitszelle $|\Psi_{n\mathbf{k}}(x)| = \sum_{\alpha} |C_{m=[x/a], n\alpha}(\mathbf{k})|$.

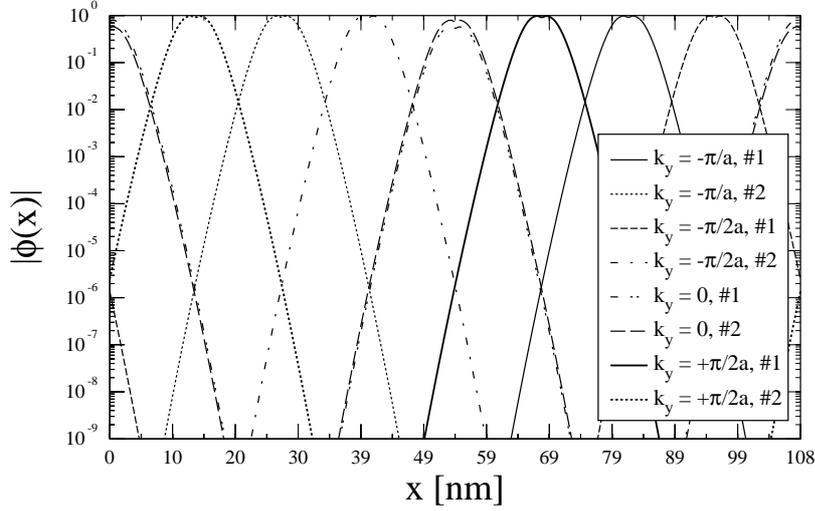


Abbildung 8.1: Absolutbetrag von $\Psi(x)$ für das zweifach entartete (#1 und #2) unterste Leitungsband von GaAs bei 190 T aufgetragen über eine magnetischen Einheitszelle für verschiedene Werte von k_y . Deutlich ist zu erkennen wie sich die von der Gauß-Funktion resultierende einhüllende Parabel linear mit k_y entlang der Einheitszelle verschiebt.

Wie leicht gezeigt werden kann, führt Gl. (8.36) zu einer deutlichen Reduktion der unabhängigen Impuls-Matrixelemente:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{p}_{n',n}(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}B\mathbf{a}_1) &= i\frac{m_0}{\hbar} \sum_{\alpha m, \alpha' m'} C_{m',n'\alpha'}^* \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}B\mathbf{a}_1 \right) C_{m,n\alpha} \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}B\mathbf{a}_1 \right) \\
 &\quad \times \sum_L (\mathbf{R}_{Lm\alpha} - \mathbf{R}_{m'\alpha'}) e^{i(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}B\mathbf{a}_1) \cdot (\mathbf{R}_{Lm\alpha} - \mathbf{R}_{m'\alpha'})} t_{m'\alpha', Lm\alpha} \\
 &= i\frac{m_0}{\hbar} \sum_{\alpha m, \alpha' m'} C_{m',n'\alpha'}^* (\mathbf{k}) C_{m,n\alpha} (\mathbf{k}) \sum_L (\mathbf{R}_{Lm-1\alpha} - \mathbf{R}_{m'-1\alpha'}) \\
 &\quad \times e^{i(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}B\mathbf{a}_1) \cdot (\mathbf{R}_{Lm-1\alpha} - \mathbf{R}_{m'-1\alpha'})} t_{m'-1\alpha', Lm-1\alpha}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= i \frac{m_0}{\hbar} \sum_{\alpha m, \alpha' m'} C_{m', n' \alpha'}^*(\mathbf{k}) C_{m, n \alpha}(\mathbf{k}) \sum_L (\mathbf{R}_{Lm\alpha} - \mathbf{R}_{m' \alpha'}) \\
&\quad \times e^{i(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} B \mathbf{a}_1) \cdot (\mathbf{R}_{Lm\alpha} - \mathbf{R}_{m' \alpha'})} t_{m' \alpha', Lm\alpha} e^{-\frac{i e}{\hbar} B a_1 (\mathbf{R}_{Lm\alpha} - \mathbf{R}_{m' \alpha'})_y} \\
&= \mathbf{p}_{n', n}(\mathbf{k})
\end{aligned}$$

Die Impuls-Matrixelemente sind also periodisch in k_y mit einer Periode von $\frac{e}{\hbar} B a_1$.

Mit einem ganz analogen Schluss zeigt man auch, dass $T_{n, n'}(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar} B \mathbf{a}_1) = T_{n, n'}(\mathbf{k})$. Da dies neben der Energie die einzigen beiden Größen sind, die in die lineare Suszeptibilität eingehen, kann die \mathbf{k} -Raum Integration bei der Berechnung der Dielektrizitätskonstante auf den nichttrivialen Teil der Brillouin-Zone reduziert werden.

KAPITEL 9

KLASSIFIKATION DER ZUSTÄNDE

Um den Magnetozuständen des Leitungsbandes Landau-Quantenzahlen zuzuordnen, die denen freier Elektronen im Landau-Modell entsprechen, muss eine analytische Beziehung zwischen dem Tight-Binding und dem Landau-Modell hergestellt werden. Diese Klassifikation ist jedoch nur möglich, falls sich die Elektronen in einem näherungsweise parabolischen Leitungsband-Extremum befinden. Das periodische Potenzial wird dabei in die renormierten Größen Masse m^* und Lande- g^* -Faktor der Quasiteilchen absorbiert. Wächst das Magnetfeld aber soweit an, dass die Magnetozustände merkliche Beiträge mehrerer Bänder/Täler aufweisen, bricht die Analogie zum Landau-Modell zusammen. Aufgrund der Entartung bzw. geringen energetischen Separation der oberen Valenzbänder, tritt dieser Effekt bei Löchern schon für relativ kleine Felder auf [107].

In diesem Kapitel wird eine Magneto-Transfermatrix-Methode für den Zinkblende Kristall abgeleitet. Obwohl analoge Ableitungen für alle Feldrichtungen möglich sind, soll das Magnetfeld hier parallel zur [001]-Kristallachse liegen. Auch auf andere Bravais-Gitter kann diese Ableitung erweitert werden. Für s -artige Bänder, wie z.B. das erste Leitungsband in GaAs, lässt sich dieses Modell weiter vereinfachen, und man erhält eine Modulation, die für kleine Magnetfelder als kosinusförmiges Magnetopotenzial interpretiert werden kann. Beschränkt man sich zusätzlich auf bandkantennahe Zustände, gelangt man in einem dritten Schritt zurück zum Landau-Modell, das Grundlage für die Klassifikation der Magnetobandstrukturen ist.

9.1. Magneto-Transfermatrix für *s*-artige Bänder

Befindet sich ein Zinkblende-Kristall in einem [001]-Magnetfeld, wählt man der Bequemlichkeit halber eine tetragonale Einheitszelle, wie sie in Abschnitt 11.1 beschrieben und in Abb. 9.1 dargestellt ist.

Um die Notation einfach zu halten, dreht man das Koordinatensystem 45° um die z -Achse, so dass \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 parallel zur x - bzw. y -Achse liegen. Da nur nächste Nachbar-Koppelungen berücksichtigt werden, sind die Differenz-Vektoren $(\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)$ gerade die Vektoren von den Kationen zu den Anionen:

$$(\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I) \frac{2\sqrt{2}}{a} \in \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \right\} \quad (9.1)$$

Die Vektoren von den Anionen zu ihren Koppelungs-Partnern sind natürlich gerade das Negative der obigen.

Die Magnetophasen in den Tight-Binding Matrixelementen

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{k}, m, \alpha | H | \mathbf{k}, m', \alpha' \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{L, L'} \exp \left[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{L'} - \mathbf{R}_L) + \frac{i}{2l_c^2} (\mathbf{R}_{L'} + \mathbf{R}_L)_x (\mathbf{R}_{L'} - \mathbf{R}_L)_y \right] t_{L\alpha, L'\alpha'} \end{aligned} \quad (9.2)$$

hängen über die magnetische Länge $l_c := \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ von der Feldstärke, der absoluten x -Position der beiden Atome und der y -Komponente des Koppelungs-Vektors $(\mathbf{R}_{L'} - \mathbf{R}_L)_y$ ab. Betrachtet man die Koppelungen des Zinkblende-Gitters in Abb. 9.2 bzw. Gl. (9.1), ist ersichtlich, dass die Koppelungs-Vektoren $\mathbf{R}_{L'} - \mathbf{R}_L$ ausschließlich in die xz - oder in die yz -Ebene fallen. Daher hängen nur diejenigen TB-Matrixelemente vom Magnetfeld ab, die Atome zu verschiedener y -Position koppeln. Für Koppelungen, die in der xz -Ebene liegen, fällt der feldabhängige, zweite Summand im Exponenten von Gl. (9.2) heraus.

Zerlegt man die m 'te Einheitszelle in x -Richtung in zwei atomare Lagen, mit den TB-Eigenvektoren $\mathbf{C}_m^{(1)}$ und $\mathbf{C}_m^{(2)}$, so lässt sich die Schrödinger-Gleichung mit den

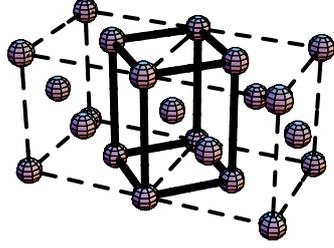


Abbildung 9.1: Gestrichelt sind zwei konventionelle Einheitszellen des fcc-Gitters mit Kugeln an den Positionen der Kationen. Mit durchgehenden Linien ist die neue, durch die orthogonalen Translationen $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ aufgespannte Einheitszelle eingezeichnet.

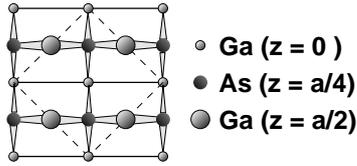


Abbildung 9.2: Dreht man einen Zinkblendekristall 45 Grad um die z -Achse liegen alle Koppelungen parallel zur xz - oder yz -Ebene.

dimensionslosen Konstanten $\lambda^2 = a^2/2l_c^2$ und $m\frac{a}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}(\mathbf{R}_I + \mathbf{R}_I)_x$ schreiben:

$$\left(\mathbb{H}_{0,1} + \mathbb{H}_{1,1} e^{i\frac{ak_y}{\sqrt{8}} + i\frac{\lambda^2 m}{2}} + \mathbb{H}_{2,1} e^{-i\frac{ak_y}{\sqrt{8}} - \frac{\lambda^2 m}{2}} \right) \mathbf{C}_m^{(1)} + \mathbb{T}_{12}^{(+)} \mathbf{C}_{m-1}^{(2)} + \mathbb{T}_{12}^{(-)} \mathbf{C}_m^{(2)} = 0, \quad (9.3a)$$

$$\left(\mathbb{H}_{0,2} + \mathbb{H}_{1,2} e^{i\frac{ak_y}{\sqrt{8}} + i\frac{\lambda^2}{2}(m+\frac{1}{2})} + \mathbb{H}_{2,2} e^{-i\frac{ak_y}{\sqrt{8}} - i\frac{\lambda^2}{2}(m+\frac{1}{2})} \right) \mathbf{C}_m^{(2)} + \mathbb{T}_{21}^{(-)} \mathbf{C}_{m+1}^{(1)} + \mathbb{T}_{21}^{(+)} \mathbf{C}_m^{(1)} = 0. \quad (9.3b)$$

Dabei sind $\mathbb{H}_{0,i}$, $\mathbb{H}_{1,i}$ und $\mathbb{H}_{2,i}$ die von der Energie E , k_x und k_z abhängigen Hamilton-Teilmatrizen, welche lokal bzw. in $\pm y$ -Richtung koppeln. Die Koppelungs-Matrizen $\mathbb{T}_{12}^{(+)}$, $\mathbb{T}_{12}^{(-)}$, $\mathbb{T}_{21}^{(-)}$, $\mathbb{T}_{21}^{(+)}$ sind Funktionen von k_x und k_z . Eine analoge Zerlegung ist Ausgangspunkt für die Transfermatrix-Methode, wie sie prinzipiell auch in Kapitel 2 verwendet wird.

Bei nicht zu großen Feldern ist die Wellenfunktion über viele Einheitszellen ausgedehnt, wobei sich die Koeffizientenvektoren benachbarter Schichten bis auf einen Faktor gleichen. Da man aber ohnehin nicht an den Lösungen der einzelnen Orbitale interessiert ist, sondern an deren Verlauf über viele Gitterkonstanten hinweg, empfiehlt sich ein enveloppenähnlicher Ansatz in x -Richtung für die Koeffizienten-

Vektoren als Funktion der reduzierten Länge $\xi := \lambda m = x/l_c$

$$\mathbf{C}_m^{(1)} = \sum_{j=1}^N f_j(\xi) e^{ik_x \xi / l_c} \mathbf{C}^{(1,j)}, \quad (9.4a)$$

$$\mathbf{C}_m^{(2)} = \sum_{j=1}^N f_j\left(\xi + \frac{\lambda}{2}\right) e^{ik_x(\xi + \lambda/2)/l_c} \mathbf{C}^{(2,j)}. \quad (9.4b)$$

Mit $\mathbf{C}^{(1,j)}$ und $\mathbf{C}^{(2,j)}$ sind Sätze der TB-Koeffizienten innerhalb einer Einheitszelle bezeichnet und $f_j(\xi = x/l_c)$ moduliert die Koeffizientenvektoren über viele Gitterzellen hinweg. Ist die Zahl der Summanden N gleich der Anzahl der Orbitale in der Schicht, bilden die Gln. (9.4a,9.4b) eine vollständige Basis des Lösungsraumes.

Um die nachfolgende Ableitung zu vereinfachen, soll obige Summe auf *nur einen Summanden*, $k_x = 0$ und *reelles* f eingeschränkt werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_m^{(1)} &= f(\xi) \mathbf{C}^{(1)}, \\ \mathbf{C}_m^{(2)} &= f\left(\xi + \frac{\lambda}{2}\right) \mathbf{C}^{(2)}, \end{aligned}$$

Man beachte, dass der letzte Schritt *im Einband-Fall exakt* ist¹. Eingesetzt in die Gln. (9.3a,9.3b) ergibt sich:

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\mathbb{H}_{0,1} + \mathbb{H}_{1,1} e^{i\frac{ak_y}{\sqrt{8}} + i\frac{\lambda}{2}\xi} + \mathbb{H}_{2,1} e^{-i\frac{ak_y}{\sqrt{8}} - i\frac{\lambda}{2}\xi} \right) \mathbf{C}^{(1)} f(\xi) \\ &\quad + \mathbb{T}_{12}^{(+)} \mathbf{C}^{(2)} f\left(\xi - \frac{\lambda}{2}\right) + \mathbb{T}_{12}^{(-)} \mathbf{C}^{(2)} f\left(\xi + \frac{\lambda}{2}\right), \end{aligned} \quad (9.6a)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\mathbb{H}_{0,2} + \mathbb{H}_{1,2} e^{i\frac{ak_y}{\sqrt{8}} + i\frac{\lambda}{2}(\xi + \frac{\lambda}{2})} + \mathbb{H}_{2,2} e^{-i\frac{ak_y}{\sqrt{8}} - i\frac{\lambda}{2}(\xi + \frac{\lambda}{2})} \right) \mathbf{C}^{(2)} f\left(\xi + \frac{\lambda}{2}\right) \\ &\quad + \mathbb{T}_{21}^{(-)} \mathbf{C}^{(1)} f(\xi + \lambda) + \mathbb{T}_{21}^{(+)} \mathbf{C}^{(1)} f(\xi). \end{aligned} \quad (9.6b)$$

Wegen der Hermitizität des Hamilton-Operators folgt zudem $\mathbb{T}_{12}^{(-)} = \left(\mathbb{T}_{21}^{(+)}\right)^\dagger$ und $\mathbb{T}_{21}^{(-)} = \left(\mathbb{T}_{12}^{(+)}\right)^\dagger$.

¹Diese Aussage bezieht sich natürlich auf eine analoge Ableitung für ein primitives Gitter mit nur einem Orbital.

Betrachtet man speziell ein s -artiges Band, sind also die Komponenten der s - oder s^* -Orbitale in den Tight-Binding Vektoren $\mathbf{C}^{(1)}$ und $\mathbf{C}^{(2)}$ deutlich größer als alle anderen, gilt wegen der Isotropie der ss -Koppelungen näherungsweise:

$$\begin{aligned} b_n &:= \mathbf{C}^{\dagger(1)} \mathbb{H}_{1,1} \mathbf{C}^{(1)} \approx \mathbf{C}^{\dagger(1)} \mathbb{H}_{2,1} \mathbf{C}^{(1)}, \\ e_n &:= \mathbf{C}^{\dagger(2)} \mathbb{H}_{1,2} \mathbf{C}^{(2)} \approx \mathbf{C}^{\dagger(2)} \mathbb{H}_{2,2} \mathbf{C}^{(2)}, \\ c_n &:= \mathbf{C}^{\dagger(1)} \mathbb{T}_{12}^{(+)} \mathbf{C}^{(2)} \approx \mathbf{C}^{\dagger(1)} \mathbb{T}_{12}^{(-)} \mathbf{C}^{(2)}, \\ g_n &:= \mathbf{C}^{\dagger(2)} \mathbb{T}_{21}^{(-)} \mathbf{C}^{(1)} \approx \mathbf{C}^{\dagger(2)} \mathbb{T}_{21}^{(+)} \mathbf{C}^{(1)}. \end{aligned}$$

Multipliziert man die Gleichungen (9.6a,9.6b) skalar mit $\mathbf{C}^{\dagger(1)}$ bzw. $\mathbf{C}^{\dagger(2)}$ und definiert man zusätzlich $a_n := \mathbf{C}^{\dagger(1)} \mathbb{H}_{0,1} \mathbf{C}^{(1)}$ und $d_n := \mathbf{C}^{\dagger(2)} \mathbb{H}_{0,2} \mathbf{C}^{(2)}$, so ergibt sich der kompakte Ausdruck

$$a_n f(\xi) + b_n f(\xi) 2 \cos \left[\frac{\lambda \xi}{2} + \frac{a k_y}{\sqrt{8}} \right] + c_n \left[f \left(\xi - \frac{\lambda}{2} \right) + f \left(\xi + \frac{\lambda}{2} \right) \right] = 0 \quad (9.8a)$$

$$d_n f \left(\xi + \frac{\lambda}{2} \right) + e_n 2 \cos \left[\frac{\lambda \xi}{2} + \frac{\lambda^2}{4} - \frac{a k_y}{\sqrt{8}} \right] f \left(\xi + \frac{\lambda}{2} \right) + g_n [f(\xi + \lambda) + f(\xi)] = 0 \quad (9.8b)$$

Jeweils die zweiten Summanden in obigen Gleichungen wirken — bei festem k_y — effektiv wie Kosinuspotenziale in x -Richtung, deren Stärke proportional der Koppelung in y -Richtung ist. Die Periode des kosinusförmigen Magnetopotenzials wird durch das Verhältnis der Gitterkonstante zur magnetischen Länge l_c vorgegeben. Lösungen zu verschiedenen k_y sind nur entlang der x -Achse verschoben, ansonsten aber unverändert. Daher sei im Folgenden o.B.d.A. $k_y = 0$ gesetzt.

9.2. Näherung für kleine Magnetfelder

Ist die magnetische Länge l_c groß gegenüber der Gitterkonstante a , also λ^2 klein (in GaAs bei 200 T gilt: $\lambda^2 = a^2/2l_c^2 = a^2 eB/2\hbar \approx 0,05$), liegt eine Kontinuumsnäherung der Gleichungen (9.8a,9.8b) nahe. Substituiert man

$$f''(\xi) \approx \frac{4}{\lambda^2} \left[f \left(\xi + \frac{\lambda}{2} \right) - 2f(\xi) + f \left(\xi - \frac{\lambda}{2} \right) \right]$$

in die Gln. (9.8a,9.8b) folgt:

$$\left(4 \frac{a_n - 2c_n}{\lambda^2 c_n} + \frac{8b_n}{\lambda^2 c_n} \cos \left[\frac{\lambda \xi}{2} \right] \right) f(\xi) + f''(\xi) = 0 \quad (9.9a)$$

$$\left(4 \frac{d_n - 2g_n}{\lambda^2 g_n} + \frac{8e_n}{\lambda^2 g_n} \cos \left[\frac{\lambda \xi}{2} + \frac{\lambda^2}{4} \right] \right) f\left(\xi + \frac{\lambda}{2}\right) + f''\left(\xi + \frac{\lambda}{2}\right) = 0 \quad (9.9b)$$

Diese Differentialgleichungen sind in der Mathematik als **Mathieu-Gleichung**

$$[p - 2q \cos(2x)] y(x) + y''(x) = 0 \quad (9.10)$$

bekannt. Da ihre Koeffizienten p, q genau eine Lösung spezifizieren und die Gl. (9.9a) und Gl. (9.9b) gleichzeitig erfüllt sein müssen, folgt:

$$\frac{a_n}{c_n} = \frac{d_n}{g_n}, \quad (9.11a)$$

$$\frac{b_n}{c_n} = \frac{e_n}{g_n}. \quad (9.11b)$$

Wegen der Gln. (9.11a,9.11b) kann man sich auf Gleichung (9.9a) beschränken.

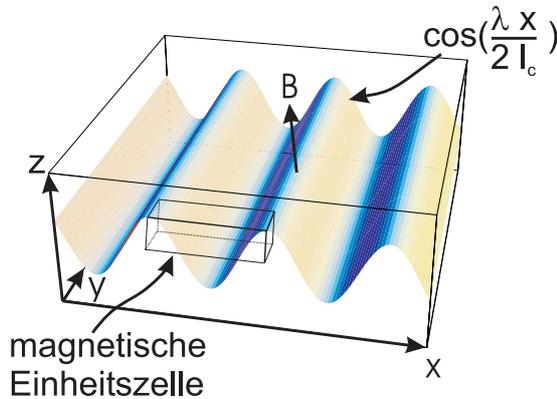


Abbildung 9.3: In einem s -Band wirkt das Magnetfeld effektiv wie ein kosinusförmiges Potenzial das die Wellenfunktionen lokalisiert. Die Orientierung der Wellen in x -Richtung folgt aus der speziellen Wahl der Eichung $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$. Die Position der Täler entlang der x -Achse ist durch k_y bestimmt.

Betrachtet man $f(m)$ als die Einhüllende der Wellenfunktion, so liegt die Interpretation von $p - 2q = 4 \frac{a_n - 2c_n}{\lambda^2 c_n} - \frac{8b_n}{\lambda^2 c_n}$ als die renormierte Energie und $\frac{8b_n}{\lambda^2 c_n} \cos[2\xi]$ als effektives Potenzial nahe. Dieses effektive Potenzial und die von ihr mitbestimmte magnetische Einheitszelle ist in Abb. 9.3 veranschaulicht.

Für die Gültigkeit obiger Ableitung ist die Rationalität des Magnetfeldes nicht erforderlich. Allerdings erhält man für irrationale Felder aperiodische Lösungen.

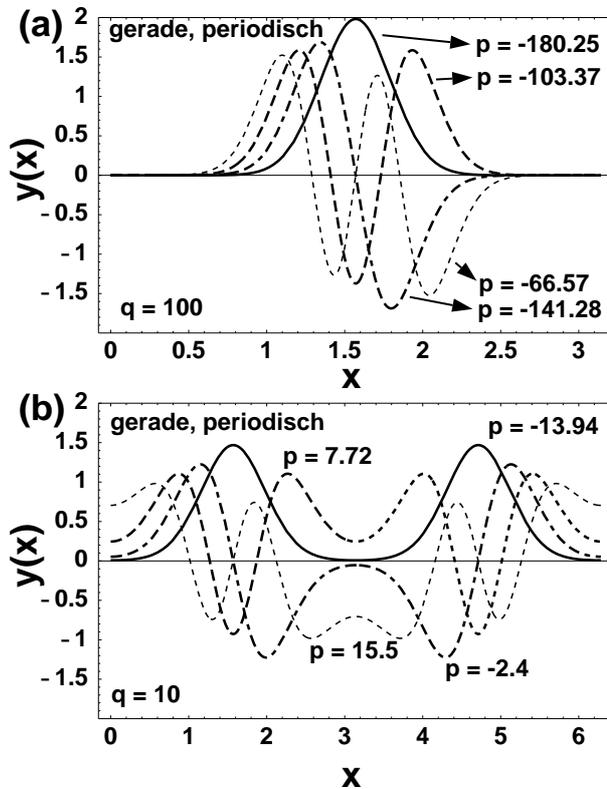


Abbildung 9.4: Die ersten vier geraden, periodischen Mathieu-Funktionen (vgl. Gl. (9.10)) für (a) $q = 100$ und (b) $q = 10$. Für kleine effektive Energien $p - 2q$ gegenüber der Amplitude des Potenzialterms $2q$ streben die Mathieu-Funktionen gegen die Lösungen des harmonischen Oszillators.

Ganz analog dazu sind die Lösungen der Mathieu-Gleichung im Allgemeinen aperiodisch. Wie aus der Mathematik bekannt [92], existieren abzählbar unendlich viele Koeffizienten $p_i(q)$, so genannte charakteristische Größen, die zu periodischen Lösungen führen. Sie entsprechen gerade den rationalen Feldern aus Kapitel 6.

Abb. 9.4 zeigt die ersten vier geraden, periodischen Lösungen der Mathieu-Gleichung für (a) im Vergleich zur Amplitude des „Modulations-Potenzials“ kleiner „Energie“ (kleines $p/q - 2$) und (b) vergleichbarer Energie und Potenzial. Die Ähnlichkeit mit den Lösungen im Fall (a) mit denen des harmonischen Oszillators wird im Folgenden Abschnitt diskutiert.

Für eine eingehendere Diskussion der Mathieu-Funktionen sei auf Ref. [92] verwiesen.

9.3. Bandkantennahe Zustände

Bei bandkantennahen Zuständen, ist die (effektive) Energie klein gegenüber der Amplitude des Magnetopotenzials. Die Wellenfunktion ist dann um das Minimum des Kosinuspotenzials lokalisiert. Entwickelt man Letzteres um das Minimum, so folgt ($\frac{b_n}{c_n} < 0$):

$$\left(4 \frac{a_n - 2c_n + 2b_n}{\lambda^2 c_n} - \frac{b_n}{c_n} \xi^2\right) f(\xi) + f''(\xi) = 0.$$

Vergleicht man dies mit dem Ergebnis eines effektiven Massen-Modells in asymmetrischer Eichung $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$ mit $k_y = k_z = 0$ und unter Verwendung des Ansatzes $\Psi(x, y, z) = \phi(\xi = x/l_c)$:

$$\left(\frac{2mE}{\hbar^2} l_c^2 - \xi^2\right) \phi(\xi) + \phi''(\xi) = 0,$$

erkennt man, dass die Interpretation von $f(\xi)$ als Einhüllende der Wellenfunktion durchaus korrekt ist.

Das Tight-Binding Modell mit der Peierls-Phase führt also im Grenzfall $a/l_c \rightarrow 0$ und bandkantennaher Zustände auf exakt die gleiche Lösung wie das Modell der effektiven Masse.

9.4. Vergleich mit numerischen Lösungen

Abschließend sollen die analytisch gewonnenen Lösungen noch mit numerischen Lösungen des vollen Hamilton-Operators verglichen werden. Das verkleinerte Bild in Abb. 9.5 zeigt den Realteil des TB-Koeffizientenvektors des ersten Leitungsbandes von GaAs am Γ -Punkt bei einem in [001]-Richtung angelegten Feld von 190 T. Die ungerade Wellenfunktion ist in einem kleinen Teil der Einheitszelle lokalisiert und wie erwartet s -artig, was die Beschränkung auf nur einen Summanden in Gl. (9.4a) im Nachhinein rechtfertigt. Die starke Kontraktion auf etwa ein Zehntel der Einheitszelle zeigt, dass die Näherung als bandkantennahe Zustand bei 190 T gerechtfertigt ist.

Im Hauptbild von Abb. 9.5 sind die Beimischungen anderer Orbitale vergrößert dargestellt. Wie bereits aus der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie bekannt ist [93], weisen die Enveloppen p - oder d -artiger Beimischungen die Form höherer Hermite-Polynome auf.

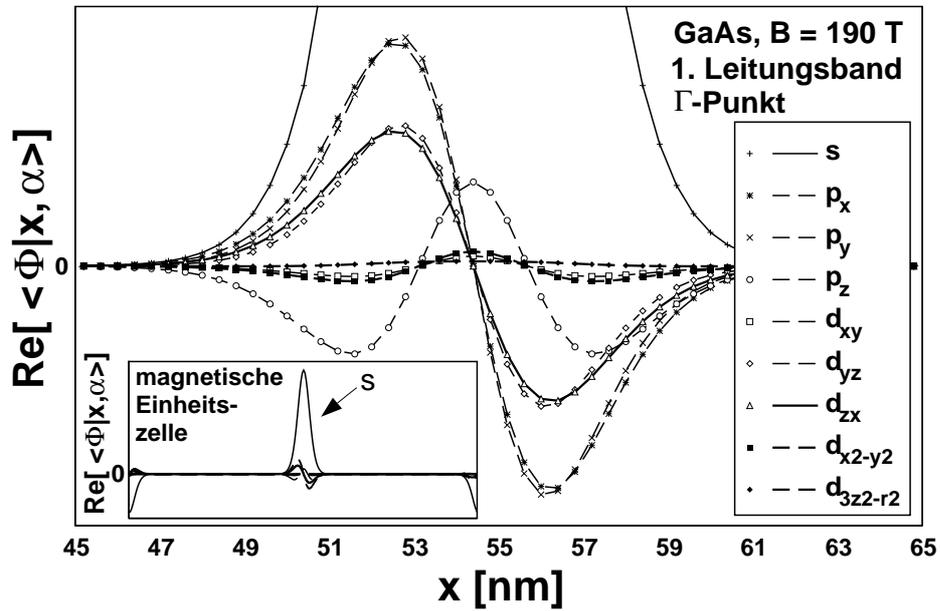


Abbildung 9.5: Realteil des Tight-Binding Koeffizientenvektors für die Orbitale der Ga-Atome entlang der Längsachse der magnetischen Einheitszelle. Der gezeigte Zustand ist das erste Leitungsband am Γ -Punkt von GaAs bei einem entlang der [001]-Achse angelegten Magnetfeld von 190 T. Im unteren Teilbild ist die Wellenfunktion über die gesamte Einheitszelle hinweg dargestellt.

Man beachte auch, dass auch L_z mit dem Hamilton-Operator im Feld kommutiert $[H, L_z] = 0$. Daher können alle Zustände statt nach den Quantenzahlen (n, \mathbf{k}) auch nach n und dem Erwartungswert von L_z klassifiziert werden (vgl. Anhang A).

KAPITEL 10

ABLEITUNG DER DIELEKTRISCHEN FUNKTION IN TIGHT-BINDING

Um Magnetfelder oberhalb von etwa 30 Tesla zu erzeugen, benötigt man extrem hohe Spulenströme. Der einhergehende riesige Energieverbrauch, die Verlustwärme, sowie die immense mechanische Belastung erlauben lediglich einen gepulsten Betrieb [94]. Die damit verbundene rapide Änderung des magnetischen Flusses führt zu einer starken Induktion in den Messleitungen. Diese Induktionsspannungen kann man zwar durch geschickte Anordnungen minimieren aber nie vollständig eliminieren [94], was präzise Messungen der Transport-Eigenschaften erheblich erschwert. Optische Experimente werden dagegen — wenn man von seltenen 4-Photonen-Prozessen einmal absieht — durch ein sich zeitlich änderndes Magnetfeld nicht beeinträchtigt und empfehlen sich daher besonders zur Analyse der elektronischen Struktur im gepulsten Magnetfeld. Die typische Zeitskala, innerhalb der optische Übergänge stattfinden, ist zudem klein gegenüber der Mikrosekundskaala auf der sich das Magnetfeld verändert. Bei geeigneter Spulen-anordnung und kleinen Proben sind daher Experimente in zeitlich und räumlich homogenen „Megagauß“ Magnetfeldern möglich. Naturgemäß basieren fast alle Experimente auf Transmissions-Messungen. Die entsprechenden Koeffizienten können von theoretischer Seite her im Rahmen des Kubo-Formalismus berechnet werden. Das ungestörte System ist hier stets der *Kristall im räumlich homogenen und zeitlich konstanten Magnetfeld*. Lediglich der zusätzlich eingestrahlte, schwache Laser-Puls wird als Störung betrachtet. Erst diese Aufteilung rechtfertigt die Anwendung störungstheoretischer Methoden.

Im Folgenden soll die transversale Dielektrizitäts-Konstante des Kristalls im Magnetfeld abgeleitet werden. Dazu wird zunächst der Stromdichte-Operator allgemein und innerhalb des Tight-Binding Modells hergeleitet. Mit diesem kann

über die Strom-Strom Korrelationsfunktion der Response des Systems auf einen elektromagnetischen Puls berechnet werden. Temperatureffekte werden durch die Evaluation der Green'schen-Funktionen bei komplexer Zeit (Matsubara Formalismus) inkludiert. Als Resultat erhält man die elektrische Suszeptibilität und direkt damit zusammenhängende Größen wie Dielektrizitäts-Konstante, Brechungsindex, Absorptions- und Reflexions-Koeffizient.

10.1. Der elektromagnetische Störterm im Kontinuumsmodell

Als allgemeiner Ausgangspunkt soll hier der Dirac-Hamilton Operator dienen, der bis auf die von der Quanten-Elektrodynamik stammenden Korrekturen als exakt angesehen werden kann. Mit der kanonischen Darstellung der beiden Dirac-Matrizen α, β hat er die Form [80]:

$$\hat{H}_D = c\alpha \cdot (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}) + \beta mc^2 + e\phi(\hat{\mathbf{r}}) \quad (10.1)$$

Mit c wurde die Lichtgeschwindigkeit bezeichnet. Die vier-komponentige Dirac-Gleichung, welche die Wellenfunktion des Elektrons mit der seines Anti-Teilchens koppelt, kann durch eine Foldy-Wouthuysen Transformation in zwei entkoppelte zwei-komponentige Gleichungen aufgeteilt werden, so dass sich nur noch die beiden Spineinstellungen der Teilchen untereinander mischen. Diese Transformationen muss für ein endliches Vektorpotenzial $\hat{\mathbf{A}}$ durchgeführt werden. Diese, etwas längliche Rechnung findet man z.B. in Ref. [81]. Entwickelt man die resultierende Gleichung für das Elektron nach v/c lauten die Beiträge bis einschließlich der Ordnung $(v/c)^2$:

$$\begin{aligned} \hat{H} = mc^2 + e\phi(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}})^2 + \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \hat{\mathbf{A}} \\ - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \hat{\phi} \times (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}) + \frac{\hbar\mu_B}{4mc^2} \Delta \hat{\phi} - \frac{1}{8m^3c^2} (\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}})^4 \end{aligned} \quad (10.2)$$

Die letzten zwei Terme können bei allen hier relevanten Feldern als sehr klein ($\ll 1$ meV) abgeschätzt werden, so dass der verbleibende Operator mit $\hat{\Pi} := \hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}$ sich vereinfacht:

$$\hat{H} = mc^2 + e\phi(\hat{\mathbf{r}}) + \frac{\hat{\Pi}^2}{2m} + \frac{i\mu_B}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{A}} - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \hat{\phi} \times \hat{\Pi}. \quad (10.3)$$

Wie in der Einleitung erwähnt, soll der Stromdichte-Operator in Tight-Binding Näherung bis zur ersten Ordnung eines zeit- und ortsabhängigen elektromagnetischen Feldes bestimmt werden. Das ungestörte System ist dabei der Kristall im konstanten Magnetfeld $\nabla \times \mathbf{A}$. Die eingestrahlte elektromagnetische Welle, repräsentiert durch die mit einem δ versehenen Potenziale $\delta \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)$ und $\delta \phi(\hat{\mathbf{r}}, t)$, führt zu einem Störterm \hat{H}_1 im Hamilton-Operator, der bis auf Terme zweiter Ordnung in $\delta \hat{\mathbf{A}}$ und $\delta \hat{\phi}$ lautet:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \hat{H}(\hat{\mathbf{A}} + \delta \hat{\mathbf{A}}, \hat{\phi} + \delta \hat{\phi}) - \hat{H}(\hat{\mathbf{A}}, \hat{\phi}) \\ &\approx e \delta \hat{\phi} + \frac{e}{2m} (\hat{\Pi} \cdot \delta \hat{\mathbf{A}} + \delta \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\Pi}) \\ &\quad + \frac{i\mu_B}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \times \delta \hat{\mathbf{A}} - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (e \nabla \hat{\phi} \times \delta \hat{\mathbf{A}} + \nabla \delta \hat{\phi} \times \hat{\Pi}) \end{aligned}$$

Der zu $\hat{\mathbf{p}} \times \delta \hat{\mathbf{A}}$ proportionale Term rührt von der unterschiedlich starken Aufspaltung der beiden Spineinstellungen des magnetischen Moments der Elektronen im veränderten Feld her. Schiebt man vor bzw. nach $\delta \hat{\mathbf{A}}$ jeweils die Ortsraum-Identität ein, ergibt sich:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \frac{e}{2m} \int \left([\hat{\Pi} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | + h.c.] + i [\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{p}}, | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} |] \right. \\ &\quad \left. - \frac{\mu_B}{c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla \hat{\phi} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \right) \cdot \delta \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) d^3 r + \\ &\quad + e \delta \hat{\phi}(\mathbf{r}, t) - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \delta \hat{\phi} \times \hat{\Pi} \end{aligned} \quad (10.4)$$

Um der Klarheit willen wurde in obiger Gleichung noch einmal explizit zwischen Operatoren (mit Dach) und Skalaren/Vektoren (ohne Dach) unterschieden, was aber im Folgenden unterbleiben soll. Definiert man nun den zum Spin-Bahn Hamilton-Operator im Magnetfeld Gl. (10.3) gehörigen Stromdichte-Operators \mathbf{j} als

$$\mathbf{j} := \underbrace{\frac{-e}{2m} (\hat{\Pi} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | + h.c.)}_{=: \mathbf{j}^{(B)}} + \underbrace{\frac{-ie}{2m} [\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\Pi}, | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} |]}_{=: \mathbf{j}^{(S)}} + \underbrace{\frac{e\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla \phi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} |}_{=: \mathbf{j}^{(SO)}} \quad (10.5)$$

und setzt diesen in Gl. (10.4) ein, erhält man den einfacheren Ausdruck:

$$\hat{H}_1 = - \int \mathbf{j} \cdot \delta \mathbf{A} d^3 r + e \delta \phi - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \delta \phi \times \hat{\Pi} + O(\delta \mathbf{A}^2, \delta \mathbf{A} \cdot \nabla \delta \phi) \quad (10.6)$$

Die Definition des Stromdichte-Operators in Gl. (10.5) weicht von der in den Lehrbüchern angegebenen ab und bedarf der Kommentierung: Der erste Summand ist der Bahn-Beitrag $\mathbf{j}^{(B)}$ zur Stromdichte. Gegenüber der konventionellen Definition der Stromdichte wurde \mathbf{p} durch den kanonischen Impuls im Magnetfeld ersetzt. Der zu $\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\Pi}$ proportionale Kommutator beschreibt die Veränderung des Spinkreisstromes $\mathbf{j}^{(S)}$ durch $\delta\mathbf{A}$. Wie im Anhang C gezeigt wird, ist dieser divergenzfrei und trägt daher nicht zum makroskopischen Ladungs-Transport bei. Der einfache Impuls-Operator im Spinterm wurde durch den kanonischen $\boldsymbol{\Pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ ersetzt, da das Vektorpotenzial lokal ist und daher ohnehin herausfällt. Von der Spin-Bahn Koppelung herrührende Beiträge zur Stromdichte $\mathbf{j}^{(SO)}$ werden durch den dritten Term in Gl. (10.5) beschrieben. Dass die so definierte Stromdichte Gl. (10.5) auch wirklich die Kontinuitäts-Gleichung der Ladung erfüllt, wird in Anhang C explizit bewiesen.

Überträgt man die zu $\delta\mathbf{A}$ proportionalen Komponenten der beiden Gleichungen (10.5,10.6) in den Wellenzahl-Raum, so erhält man die für das weitere Vorgehen vorteilhaftere Darstellung:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{q}) &= \frac{-e}{2mV} (\boldsymbol{\Pi}e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\boldsymbol{\Pi}) + \frac{ie}{2mV} [\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}] - \frac{\mu_B}{c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla\phi(\mathbf{q}) \\ H_1 &= -V \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{j}(\mathbf{q}) \cdot \delta\mathbf{A}(-\mathbf{q}) + e\delta\phi(\mathbf{r},t) - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\delta\phi \times \boldsymbol{\Pi} \end{aligned} \quad (10.7)$$

Die Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{q})$ ergibt sich also aus der Ableitung des Störoperators nach $\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})$:

$$\mathbf{j}(\mathbf{q}) = -\frac{1}{V} \frac{dH_1}{d\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})} \quad (10.8)$$

Diese sehr allgemeine Relation kann nun dazu verwendet werden einen Ausdruck für den Stromdichte-Operator im empirischen Tight-Binding zu finden.

10.2. Der Stromdichte-Operator in Tight-Binding

Die in der folgenden Ableitung auftretenden Wellenlängen des einfallenden Lichts sollen groß gegenüber den atomaren Abständen sein, d.h. $\delta\mathbf{A}(\mathbf{q})$ soll nur für Wellenzahlen \mathbf{q} von Null verschieden sein, die klein gegenüber den Dimensionen der (feldfreien) Brillouin-Zone sind.

Die einzelnen kristallinen Einheitszellen innerhalb einer magnetischen Einheitszelle werden in diesem Abschnitt formal als erweiterte Basis aufgefasst. In den Rechnungen wird zudem häufig von der Translations-Invarianz des *feldfreien* Hamilton-Operators um einen Gittervektor \mathbf{R} Gebrauch gemacht:

$$t_{I\alpha, I'\alpha'}^0 = t_{\alpha, \alpha'}^0 (\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I)$$

Mit $t_{I\alpha, I'\alpha'}$ wird die Koppelung zwischen zwei nahe beieinander liegenden Orbitalen beschrieben. Folglich ist $\mathbf{R}_{I'} - \mathbf{R}_I$ weder Null noch größer als einige Gitterkonstanten.

Nach dem Hellman-Feynman-Theorem gilt für den Erwartungswert des Stromdichte-Operators für einen Eigenzustand des Hamilton-Operators mit Gl. (10.8):

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{q}) \rangle = - \left\langle \frac{1}{V} \frac{dH}{d\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})} \right\rangle = - \frac{1}{V} \frac{d \langle H_1[\delta\mathbf{A}(\mathbf{q})] \rangle}{d\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})} \quad (10.9)$$

Gesucht wird also die Ableitung des Tight-Binding Hamilton-Matrixelements nach $\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})$. Das Stromdichte-Matrixelement zwischen den beiden Magnetoblochzuständen *im homogenen, rationalen Magnetfeld* (n, \mathbf{k}) und (n', \mathbf{k}') lautet folglich:

$$\begin{aligned} \langle n\mathbf{k} | \mathbf{j}(\mathbf{q}) | n'\mathbf{k}' \rangle &= \mathbf{j}_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) \quad (10.10) \\ &= \frac{-1}{NV} \frac{d}{d\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})} \sum_{I\alpha I'\alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_{I'} - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_I} \\ &\quad \times \left[t_{I\alpha, I'\alpha'} + \delta_{I, I'} \left(\delta_{\alpha, \alpha'} \epsilon_\alpha^0 + \delta_{\beta\lambda, \beta'\lambda'} \frac{1}{3} \Delta_{\alpha, \alpha'} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \delta_{\beta\lambda, \beta'\lambda'} \mu_B \langle I s | \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times (\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}) | I s' \rangle \right) \right] \quad (10.11) \end{aligned}$$

Das Vektorpotenzial geht sowohl in das Hopping-Matrixelement t als auch in das Spin-Matrixelement ein. Um die weitere Ableitung übersichtlicher zu halten, werden die $\delta\mathbf{A}$ abhängigen Terme beginnend mit der Zeeman-Aufspaltung des Spins gesondert betrachtet. Leitet man das Matrixelement im letzten Term von Gl. (10.11) nach $\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})$ ab, erhält man:

$$\begin{aligned} \frac{d \langle I s | \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \delta\mathbf{A} | I s' \rangle}{d\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})} &= \frac{d}{d\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})} \sum_{\mathbf{q}} i\mathbf{q} \times \delta\mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot \langle I s | \boldsymbol{\sigma} | I s' \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_I} \\ &= -ie^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_I} \langle I s | \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{q} | I s' \rangle. \end{aligned}$$

Der Spinstrom wirkt sich also nur auf die *lokalen* Matrixelemente aus und verschwindet im langwelligen Limes. Setzt man diesen Ausdruck in Gl. (10.10) ein ergibt sich die Spinkomponente des Stromdichte-Matrixelements, $\mathbf{j}^{(S)}$, zu:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{n,n'}^{(S)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &= \frac{ie\hbar}{2mNV} \sum_{\alpha, \alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') \langle \alpha | \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{q} | \alpha' \rangle \sum_I e^{i\mathbf{R}_I \cdot (\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q})} \\ &= \frac{ie\hbar}{2mV} \sum_{\mathbf{K}, \alpha, \alpha'} \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{K}, \mathbf{q}} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') \langle \alpha | \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{q} | \alpha' \rangle e^{-i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda} \end{aligned} \quad (10.12)$$

Der Impuls \mathbf{q} des absorbierten oder emittierten Photons bewirkt aufgrund des (Kristall-)Impulserhaltungssatzes einen nichtsenkrechten Übergang im Banddiagramm. Einem möglichen Wechsel der Brillouin-Zone trägt die Summe über die reziproken Gittervektoren $\mathbf{K} = n_1 \mathbf{b}'_1 + n_2 \mathbf{b}'_2 + n_3 \mathbf{b}'_3$ mit $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}$ Rechnung:

$$\sum_L e^{i\mathbf{R}_L \cdot (\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q})} = N e^{-i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda} \sum_{\mathbf{K}} \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{K}, \mathbf{q}} \quad (10.13)$$

Definiert man die Spinkoppelungs-Funktion durch

$$\boldsymbol{\sigma}_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) := i \sum_{\mathbf{K}, \alpha, \alpha'} \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{K}, \mathbf{q}} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') \left\langle \alpha \left| \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{q} \right| \alpha' \right\rangle e^{-i\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda} \quad (10.14)$$

vereinfacht sich die Spinkomponente des Stromdichte-Matrixelements zu:

$$\mathbf{j}_{n,n'}^{(S)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) = \frac{e}{mV} \boldsymbol{\sigma}_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}). \quad (10.15)$$

Die Ableitung der Hopping-Matrixelemente $t_{I\alpha, I'\alpha'}$ nach $\delta \mathbf{A}(\mathbf{q})$ ist etwas länglicher. Das Magnetfeld geht hier lediglich über die Peierls-Phase ein. Nimmt man als Integrationsweg wieder die Gerade entlang der Kernverbindungsline $\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}$, kann die Peierls-Phase im Frequenzraum analytisch integriert werden:

$$\int_{\mathbf{R}_{I'}}^{\mathbf{R}_I} \delta \mathbf{A}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{q}} \int_{\mathbf{R}_{I'}}^{\mathbf{R}_I} \delta \mathbf{A}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}) \cdot \sum_{\mathbf{q}} \delta \mathbf{A}(\mathbf{q}) \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_I} - e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{I'}}}{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'})} \quad (10.16)$$

Die Summe über \mathbf{q} und das Integral vertauschen, da nach dem am Anfang des Abschnitts angegebenen Voraussetzungen die Summe nur endlich viele Summanden enthält¹. Wie man leicht überprüfen kann, geht im langwelligen Limes die rechte wie die linke Seite gegen $(\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}) \cdot \delta\mathbf{A}$.

Für die Ableitung von $t_{I\alpha, I'\alpha'}$ nach $\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})$ folgt damit:

$$\begin{aligned} \frac{dt_{I\alpha, I'\alpha'}}{d\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})} &\approx t_{I\alpha, I'\alpha'}^0 \left(1 - \frac{ie}{\hbar} (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}) \cdot \sum_{\mathbf{q}'} \delta\mathbf{A}(\mathbf{q}') \frac{e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{R}_I} - e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{R}_{I'}}}{i\mathbf{q}' \cdot (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'})} \right) \quad (10.17) \\ &\times \frac{e e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_I} - e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{I'}}}{\hbar \mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'})} (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}) \end{aligned}$$

Weil nur Terme bis zur linearen Ordnung in $\delta\mathbf{A}$ betrachtet werden sollen, wurde die Exponentialfunktion nach $\delta\mathbf{A}$ entwickelt. Mit $t_{I\alpha, I'\alpha'}^0$ ist das Tight-Binding Matrixelement *im Magnetfeld* bezeichnet. Setzt man nun Gl. (10.17) in Gl. (10.10) ein, erhält man die interatomare Komponente des Stromdichte-Matrixelements. Aufgrund des Umfangs dieser Ableitung wurde sie in den Anhang B verlagert. Hier sollen lediglich die wichtigsten Ergebnisse aufgezeigt werden. Zur kompakteren Darstellung des Folgenden wird das auf nichtsenkrechte Übergänge verallgemeinerte Impuls-Matrixelement

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &:= \frac{m}{\hbar} \sum_{\mathbf{K}, L, \alpha, \alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') t_{L\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q}, 2\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot (\boldsymbol{\tau}_\lambda + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \quad (10.18) \\ &\times (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}) \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I)} \frac{1 - e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})}}{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \end{aligned}$$

definiert. Im Limes $\mathbf{q} \rightarrow 0$ und damit $\mathbf{K} = 0$ geht Gl. (10.18) in die von Graf [79] für den Spezialfall $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, $\mathbf{q} = \mathbf{K} = 0$, $\mathbf{B} = 0$ gefundene Form über:

$$\begin{aligned} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \mathbf{p}_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &= \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \frac{m}{\hbar} \sum_{L, \alpha, \alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I) t_{\mathbf{R}_L, \alpha\alpha'} \\ &\times \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{i\mathbf{k}' \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I)} \left(i - \frac{1}{2} \mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) \right) \\ &= \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \frac{m}{\hbar} \frac{d}{d\mathbf{k}} \langle n\mathbf{k} | H | n'\mathbf{k} \rangle. \end{aligned}$$

¹Da \mathbf{q} klein gegenüber der (feldfreien) Brillouin-Zone sein soll, ist $|\mathbf{q}|$ beschränkt. Zudem ist aufgrund des endlichen Kristall-Volumens V eine nichtverschwindende k -Raum Diskretisierung vorgegeben.

Des Weiteren wird die \mathbb{T} -Matrix eingeführt:

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &:= \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{\alpha\alpha', L} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') t_{L,\alpha\alpha'} \frac{(\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I) \otimes (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I)}{[\mathbf{q} \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I)]^2} \\ &\times \left[\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} 2 \sin^2 [\mathbf{q} \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I) / 2] e^{i\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I)} \right. \\ &- \sum_{\mathbf{K}} \delta_{\mathbf{k} - \mathbf{k}' + 2\mathbf{q}, 2\mathbf{K}} e^{i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda}} \left(e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_L / 2} e^{-i2\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda}} \right. \\ &\left. \left. + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_L / 2} e^{-i2\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}} - 2e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_L} e^{-i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda} - i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}} \right) \right] \end{aligned} \quad (10.19)$$

Auch sie geht im Fall $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, $\mathbf{q} = \mathbf{K} = 0$, $\mathbf{B} = 0$ in die von Graf [79] definierte \mathbb{T} -Matrix über:

$$\begin{aligned} \mathbb{T}_{n,n'}(\mathbf{k}) &:= -\frac{m}{\hbar^2} \sum_{\alpha\alpha', L} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}) t_{L\alpha,\alpha'} \\ &\times e^{i\mathbf{k} \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I)} (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I) \otimes (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I). \end{aligned} \quad (10.20)$$

Die rein lokal genäherte Spin-Bahn Koppelung Gl. (1.9) liefert aufgrund der fehlenden $\delta\mathbf{A}(\mathbf{q})$ -Abhängigkeit keinen Beitrag zur Stromdichte. Der dritte Term des Stromdichte-Operators $\mathbf{j}^{(SO)}$ in Gl. (10.5) fällt daher heraus. Mittels der Definitionen (10.14, 10.18) und (10.19) lässt sich das Stromdichte-Matrixelement in einer sehr kompakten Weise schreiben:

$$\begin{aligned} \langle n\mathbf{k} | \mathbf{j}(\mathbf{q}) | n'\mathbf{k}' \rangle &= \frac{-e}{mV} (\mathbf{p}_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) - \boldsymbol{\sigma}_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q})) \\ &+ \frac{e^2}{mV} \mathbb{T}_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) \delta\mathbf{A}(-\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (10.21)$$

$$\mathbf{j}_{n,n'}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}} \langle n\mathbf{k} | \mathbf{j}(\mathbf{q}) | n'\mathbf{k} \rangle. \quad (10.22)$$

Im langwelligen Limes ($\mathbf{q} \rightarrow 0$, $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$) reduziert sich dieser Ausdruck auf das aus der Literatur [79] bekannte Resultat:

$$\langle n\mathbf{k} | \mathbf{j} | n'\mathbf{k} \rangle = \frac{-e}{mV} \mathbf{p}_{n,n'}(\mathbf{k}) + \frac{e^2}{mV} \mathbb{T}_{n,n'}(\mathbf{k}) \delta\mathbf{A}(t) \quad (10.23)$$

mit $\mathbf{p}_{n,n'}(\mathbf{k}) := \mathbf{p}_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \mathbf{q} = 0)$ und $T_{n,n'}(\mathbf{k}) := T_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}, \mathbf{q} = 0)$. Um in diesen Ausdruck explizit das elektrische Feld \mathbf{E} einzubinden, wechselt man in den Frequenzraum: In der Coulomb-Eichung ($\mathbf{E} = \partial_t \mathbf{A}$) gilt $\delta\mathbf{E}(\omega) = -i\omega \delta\mathbf{A}(\omega)$. Setzt

man $\delta \mathbf{A}(t) = i \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \frac{1}{\omega} \delta \mathbf{E}(\omega)$ in Gl. (10.23) ein folgt:

$$\mathbf{j}_{n,n'}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{e}{mV} \mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}) \delta(\omega) + \frac{ie^2}{m\omega V} \mathbb{T}_{n,n'}(\mathbf{k}) \delta \mathbf{E}(\omega). \quad (10.24)$$

Trotz der eher üblichen Frequenzraumdarstellung soll im Folgenden mit Gl. (10.23) gearbeitet werden.

10.3. Ableitung der Kubo-Formel im Magnetfeld

Im vorigen Abschnitt wurde ausgehend von dem elektromagnetischen Störterm

$$H_1 = -V \sum_{\mathbf{q}} (\delta \mathbf{A}(-\mathbf{q}, t) \cdot \mathbf{j}(\mathbf{q}, t) + \delta \phi(-\mathbf{q}, t) \cdot \rho(\mathbf{q}, t)) - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \delta \phi \times \boldsymbol{\Pi}$$

(hier mit $\rho(\mathbf{q}) = -e e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}$) ein Ausdruck für den Stromdichte-Operator in Tight-Binding abgeleitet. In diesem Abschnitt wird nun gezeigt, dass die Strom-Strom Korrelationsfunktion im Magnetfeld gerade die Antwort des Systems auf ein zusätzliches externes Feld in linearer Näherung beschreibt (Kubo-Formalismus).

Der Erwartungswert des Stromdichte-Operators ergibt sich in der üblichen linearen Response Näherung, also bei adiabatisch eingeschalteter Störung zu:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{j}^{ind}(\mathbf{q}, t) \rangle &\approx \langle \mathbf{j}_I(\mathbf{q}, t) \rangle_0 + \left\langle \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [H_{1,I}(t'), \mathbf{j}_I(\mathbf{q}, t)] dt' \right\rangle_0 \\ &= \langle \mathbf{j}_I(\mathbf{q}, t) \rangle_0 - \frac{iV}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \sum_{\mathbf{q}'} \underbrace{\langle [\mathbf{j}_I(\mathbf{q}', t'), \mathbf{j}_I(\mathbf{q}, t)] \rangle_0}_{=:\mathbb{J}(\mathbf{q}', \mathbf{q}, t', t)} \delta \mathbf{A}(-\mathbf{q}', t') \\ &= \langle \mathbf{j}_I(\mathbf{q}, t) \rangle_0 + \frac{iV}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \sum_{\mathbf{q}'} \underbrace{\langle [\mathbf{j}_I(\mathbf{q}, t), \mathbf{j}_I(\mathbf{q}', t')] \rangle_0}_{=:\mathbb{J}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t, t')} \delta \mathbf{A}(-\mathbf{q}', t') \end{aligned} \quad (10.25)$$

Der Index I kennzeichnet Operatoren im Wechselwirkungs-Bild. Der Einfachheit halber wurde eine Eichung gewählt in der $\delta \phi$ verschwindet. Da der Hamilton-Operator zeitunabhängig ist gilt für den Strom-Strom-Korrelationstensor:

$$\mathbb{J}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t, t') = \mathbb{J}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', t - t') = \mathbb{J}(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \tau).$$

Auch die Wellenzahl-Vektoren \mathbf{q} und \mathbf{q}' sind nicht unabhängig. Am einfachsten sieht man dies aus der Fouriertransformierten $\mathbb{J}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)$. Für sie gilt wegen der Translations-Symmetrie des Gitters:

$$\mathbb{J}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \mathbb{J}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_L, \mathbf{r}' + \mathbf{R}_L, \tau).$$

Man beachte, dass \mathbf{R}_L ein primitiver, *magnetischer* Gittervektor ist, da nur die Gruppe der magnetischen Translationen mit dem Hamilton-Operator kommutiert. Durch Rücktransformation der rechten und linken Seite obiger Gleichung und unter Verwendung der Vollständigkeit, lässt sich leicht zeigen, dass \mathbb{J} durch einen (einigen) \mathbf{k} -Raum Vektor \mathbf{q} und zwei zugehörige reziproke Gittervektoren \mathbf{K}, \mathbf{K}' des magnetischen Übergitters charakterisiert werden kann:

$$\mathbb{J}_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}(\mathbf{q}, \tau) = \langle [\mathbf{j}_I(\mathbf{q} + \mathbf{K}', \tau), \mathbf{j}_I(-\mathbf{q} + \mathbf{K}, 0)] \rangle \quad (10.26)$$

Aus Kausalitätsgründen verschwindet \mathbb{J} für $\tau < 0$.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass der Kubo-Formalismus auch im Magnetfeld gilt, nur müssen in allen Operatoren, wie z.B. der Stromdichte, die Impulse \mathbf{p} , etc. durch die kanonischen Operatoren im Magnetfeld ersetzt werden.

Wird zusätzlich obige Darstellung auf eine unvollständige Tight-Binding Basis abgebildet, verkompliziert sich das Vorgehen etwas, da ein Basiswechsel durch Einschleiben einer Identität i.d.R. nicht mehr möglich ist. Die Strom-Strom Korrelationsfunktion \mathbb{J} ist nun eine Funktion der Gitterplätze und Orbitale:

$$\mathbb{J}_{\alpha, \alpha'}(\mathbf{R}_I, \mathbf{R}'_{I'}, \tau) = \sum_{I'', \alpha''} \langle [\langle I, \alpha | \mathbf{j}_I(\tau) | I'', \alpha'' \rangle, \langle I'', \alpha'' | \mathbf{j}_I(0) | I', \alpha' \rangle] \rangle$$

Aufgrund der unvollständigen Ortsraum-Basis ist auch das \mathbf{k} -Raum Pendant $|n, \mathbf{k}\rangle$ unvollständig (endl. Anzahl von Bändern), so dass die Relation

$$\mathbb{J}_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}(\mathbf{q}, \tau) \approx \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} \langle [\mathbf{j}_{I, nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} + \mathbf{K}, \tau), \mathbf{j}_{I, n'n}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, -\mathbf{q} + \mathbf{K}', 0)] \rangle$$

nur näherungsweise gilt.

10.4. Die Korrelationsfunktion für $T > 0$ im Matsubara Formalismus

Zur Berechnung der Suszeptibilität bei endlichen Temperaturen kann auf den Matsubara-Formalismus [96] zurückgegriffen werden. Der Kern dieser Theorie besteht

aus der Beobachtung, dass die thermodynamische Gewichtsfunktion $\exp(-\beta H)$ mit $\beta = 1/k_B T$ und der Zeitentwicklungs-Operator für einen skleronomen Hamilton-Operator $\exp(-\frac{i}{\hbar}tH)$ formal identisch sind, wenn man die reduzierte Temperatur β als komplexe Komponente der Zeit $t' = t - i\beta/\hbar$ auffasst. Die Grundidee besteht darin, statt einer (kohärenten) zeitlichen Mittelung, wie sie in Gl. (10.26) auftritt, und anschließenden (inkohärenten) thermodynamischen Mittelung über das jeweilige Ensemble, nur noch eine Mittelung mit komplexer Zeit durchzuführen.

Wie aus Gl. (10.25) ersichtlich, wird \mathbb{J} in der Kubo-Formel mit $\delta\mathbf{A}$ multipliziert. Da nur Terme bis zur linearen Ordnung in $\delta\mathbf{A}$ berücksichtigt werden sollen kann für das Folgende der zu $\delta\mathbf{A}$ proportionale Term in der Strom-Strom-Korrelationsfunktion wegfallen. Die zu Gl. (10.26) gehörende Korrelationsfunktion im Matsubara-Formalismus lautet:

$$\mathbb{J}_{\mathbf{K},\mathbf{K}'}(\mathbf{q}, \tau) = \langle T_\tau \mathbf{j}_I(\mathbf{q} + \mathbf{K}', \tau) \mathbf{j}_I(-\mathbf{q} + \mathbf{K}, 0) \rangle$$

Mit T_τ wird dabei der Zeitordnungs-Operator für komplexe Zeiten bezeichnet. Für $\tau > 0$ gilt insbesondere:

$$\mathbb{J}_{\mathbf{K},\mathbf{K}'}(\mathbf{q}, \tau) = -e^{\Omega\beta} \langle e^{-H\beta} \mathbf{j}_I(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \tau) \mathbf{j}_I(-\mathbf{q} + \mathbf{K}', 0) \rangle$$

Dabei bezeichnet $e^{-\Omega\beta}$ die kanonische Zustandssumme. Wertet man obigen Ausdruck im Schrödinger-Bild und mit Bloch-Funktionen $|n\mathbf{k}\rangle$ als Basis aus, erhält man:

$$\begin{aligned} \mathbb{J}_{\mathbf{K},\mathbf{K}'}(\mathbf{q}, \tau) &= -e^{\Omega\beta} \langle e^{-H\beta} e^{\tau H/\hbar} \mathbf{j}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \tau) e^{-\tau H/\hbar} \otimes \mathbf{j}(-\mathbf{q} + \mathbf{K}', 0) \rangle \quad (10.27) \\ &= -e^{\Omega\beta} \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} \langle n\mathbf{k} | e^{(\tau/\hbar - \beta)H} \mathbf{j}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \tau) e^{-\tau H/\hbar} | n'\mathbf{k}' \rangle \\ &\quad \otimes \langle n'\mathbf{k}' | \mathbf{j}(-\mathbf{q} + \mathbf{K}', 0) | n\mathbf{k} \rangle \\ &= - \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} \frac{e^{-E_n(\mathbf{k})\beta}}{e^{-\Omega\beta}} e^{\tau(E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k}'))/\hbar} \\ &\quad \times \langle n\mathbf{k} | \mathbf{j}(\mathbf{q} + \mathbf{K}, \tau) | n'\mathbf{k}' \rangle \otimes \langle n'\mathbf{k}' | \mathbf{j}(-\mathbf{q} + \mathbf{K}', 0) | n\mathbf{k} \rangle \\ &= - \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} f_n(\mathbf{k}) e^{\tau\omega_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} \\ &\quad \times \mathbf{j}_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} + \mathbf{K}, \tau) \otimes \mathbf{j}_{n',n}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, -\mathbf{q} + \mathbf{K}', 0) \end{aligned}$$

Dabei wurde mit $E_n(\mathbf{k})$ die Eigenenergie des Blochzustands im Magnetfeld bezeichnet und mit $f_n(\mathbf{k})$ die zugehörige Besetzungswahrscheinlichkeit. Für $E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k}')$ wurde die Abkürzung $\hbar\omega_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ eingeführt. Wird die Tight-Binding Darstellung der Stromdichte Gl. (10.21) mit $\delta\mathbf{A} = \mathbf{0}$ in Gl. (10.27) substituiert und beschränkt man sich auf das erste Element der $\mathbb{J}_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'}$ Matrix², erhält man:

$$\begin{aligned} \mathbb{J}(\mathbf{q}, \tau) &= -\frac{e^2}{m^2 V^2} \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} f_n(\mathbf{k}) e^{\tau\omega_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} \\ &\times \underbrace{(\mathbf{p}_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) - \boldsymbol{\sigma}_{n, n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q})) \otimes (\mathbf{p}_{n', n}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, -\mathbf{q}) - \boldsymbol{\sigma}_{n', n}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, -\mathbf{q}))}_{=:\mathbb{P}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q})} \end{aligned} \quad (10.28)$$

Aus Kausalitätsgründen verschwindet \mathbb{J} für $\tau < 0$. Im Folgenden wird daher stets $\tau \geq 0$ gesetzt. Für die Korrelationsfunktion bei endlichen Temperaturen muss über die komplexe Zeit von 0 bis β integriert werden:

$$\begin{aligned} \mathbb{J}(\mathbf{q}, i\omega) &= \int_0^\beta e^{-i\omega\tau} \mathbb{J}(\mathbf{q}, \tau) d\tau \\ &= \int_0^\beta \frac{-e^2}{m^2 V^2} \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} f_n(\mathbf{k}) e^{-\tau(i\omega - \omega_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'))} \mathbb{P}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) d\tau \\ &= \frac{e^2}{m^2 V^2} \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} f_n(\mathbf{k}) \mathbb{P}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) \frac{e^{-i\omega\beta + \omega_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\beta} - 1}{i\omega - \omega_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} \\ &= \frac{e^2}{m^2 V^2} \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} \mathbb{P}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) \frac{f_{n'}(\mathbf{k}') - f_n(\mathbf{k})}{i\omega - \omega_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} \end{aligned}$$

Beim Übergang von der 3. in die 4. Zeile wurde von der für effektiv bosonische Operatoren geltenden Relation $\exp(i\omega\beta) = 1$ Gebrauch gemacht [96]. Die retardierte

²Für immer kleinere Magnetfelder „wachsen“ die magnetischen Einheitszellen senkrecht zu \mathbf{B} was zu einer effektiven Verkleinerung der Brillouin-Zone führt. Die Beschränkung auf das $\mathbf{K} = \mathbf{K}' = 0$ Element der Matrix bedarf daher im Gegensatz zum feldfreien Fall in dem ein Wechsel in die angrenzende Brillouin-Zone durch Absorption eines Photons sicherlich vernachlässigt werden kann, der Überlegung. Während im Falle der Faraday-Konfiguration ($\mathbf{B} \parallel \mathbf{q}$) die feldfreie Näherung weiterhin uneingeschränkt gilt müssen bei der Voigt-Konfiguration ($\mathbf{B} \perp \mathbf{q}$) unterhalb von etwa 100 T und für Photonen-Energien oberhalb von etwa 1 eV mehrere Komponenten von \mathbb{J} mitgenommen werden. Da dieser doch sehr spezielle Fall in dieser Arbeit nicht auftritt wird im Folgenden $\mathbf{K} = \mathbf{K}' = 0$ gesetzt.

Greens-Funktion bei endlichen Temperaturen erhält man nun durch Substitution $i\omega \rightarrow \omega + i\delta$ ($\delta > 0$):

$$\begin{aligned} \mathbb{J}^{ret}(\mathbf{q}, \omega) &= \frac{e^2}{m^2 V^2} \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} \mathbb{P}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) \frac{f_{n'}(\mathbf{k}') - f_n(\mathbf{k})}{\omega - \omega_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + i\delta} \\ &= \frac{e^2}{m^2 V^2} \sum_{n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'} \mathbb{P}_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{q}) [f_{n'}(\mathbf{k}') - f_n(\mathbf{k})] \\ &\quad \times \left(P \frac{1}{\omega - \omega_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} - i\pi\delta(\omega - \omega_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')) \right) \end{aligned} \quad (10.29)$$

Mit Gl. (10.29) kann nun ein kompakter Ausdruck für die lineare Antwort der Stromdichte und damit die Suszeptibilität abgeleitet werden.

10.5. Suszeptibilität

Kombiniert man Gl. (10.25)

$$\langle \mathbf{j}^{ind}(\mathbf{q}, t) \rangle \approx \langle \mathbf{j}(\mathbf{q}, t) \rangle_0 + \frac{iV}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} e^{-i\omega'(t-t')} \mathbb{J}^{ret}(\mathbf{q}, \omega') \delta\mathbf{A}(-\mathbf{q}, t')$$

mit Gl. (10.29) und wechselt man zusätzlich vom Zeit- in den Frequenzraum folgt:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{j}^{ind}(\mathbf{q}, \omega) \rangle &= \sum_{n, \mathbf{k}} f_n(\mathbf{k}) \frac{ie^2}{m\omega V} \mathbb{T}_{n,n}(\mathbf{k}) \delta\mathbf{E}(\omega) \\ &\quad + \frac{V}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} e^{i(-\omega-\omega')t} \mathbb{J}^{ret}(\mathbf{q}, \omega') \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega't'} \delta\mathbf{A}(-\mathbf{q}, t') \\ &= \sum_{n, \mathbf{k}} f_n(\mathbf{k}) \frac{ie^2}{m\omega V} \mathbb{T}_{n,n}(\mathbf{k}) \delta\mathbf{E}(\omega) \\ &\quad + \frac{iV}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi\omega'} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega+\omega')t} \mathbb{J}^{ret}(\mathbf{q}, \omega') \delta\mathbf{E}(-\mathbf{q}, -\omega') \\ &= \left[\sum_{n, \mathbf{k}} f_n(\mathbf{k}) \frac{ie^2}{m\omega V} \mathbb{T}_{n,n}(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{q},0} - \frac{iV}{\hbar\omega} \mathbb{J}^{ret}(\mathbf{q}, -\omega) \right] \delta\mathbf{E}(-\mathbf{q}, \omega) \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde $\delta\mathbf{A}(\omega) = i\mathbf{E}(\omega)/\omega$ und die Definition der Delta-Funktion substituiert. Der Term innerhalb der eckigen Klammer ist wegen $\mathbf{j} = \sigma\delta\mathbf{E}$ gerade

der Leitfähigkeitstensor. Mit $\chi_{i,j}(\omega) = i\sigma_{i,j}(\omega)/\varepsilon_0\omega$ folgt daraus:

$$\chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = - \sum_{n,\mathbf{k}} f_n(\mathbf{k}) \frac{e^2}{m\omega^2\varepsilon_0V} \mathbb{T}_{ij,nn}(\mathbf{k}) + \frac{V}{\hbar\omega^2\varepsilon_0} \mathbb{J}_{ij}^{ret}(\mathbf{q}, -\omega). \quad (10.30)$$

Setzt man schließlich die Gln. (10.29,10.28) in obigen Ausdruck ein, ergibt sich die komplexe, transversale Suszeptibilität für nichtsenkrechte Übergänge als Funktion der \mathbb{T} und \mathbf{p} -Matrixelemente:

$$\begin{aligned} \chi_{ij}(\mathbf{q}, \omega) = & \frac{-e^2}{m\omega^2\varepsilon_0V} \left\{ \sum_{n,\mathbf{k}} f_n(\mathbf{k}) \mathbb{T}_{ij,nn}(\mathbf{k}) - \frac{1}{m} \sum_{n,n',\mathbf{k},\mathbf{k}'} [f_{n'}(\mathbf{k}') - f_n(\mathbf{k})] \right. \\ & \times [p_{inn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) - \sigma_{inn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q})] [p_{jn'n}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, -\mathbf{q}) - \sigma_{jn'n}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, -\mathbf{q})] \\ & \left. \times \left[P \frac{-1}{\hbar\omega - \hbar\omega_{n'n}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} - i\pi\delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{n'n}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')) \right] \right\} \end{aligned} \quad (10.31)$$

Im langwelligen Limes reduziert sich Gl. (10.31) zu einem formal mit dem feldfreien Fall [87] identischen Resultat:

$$\begin{aligned} \chi_{ij}(\omega) = & \frac{-e^2}{m\omega^2\varepsilon_0V} \sum_{n,\mathbf{k}} \left\{ f_n(\mathbf{k}) \mathbb{T}_{ij,nn}(\mathbf{k}) - \frac{1}{m} \sum_{n'} [f_{n'}(\mathbf{k}) - f_n(\mathbf{k})] p_{inn'}(\mathbf{k}) p_{jn'n}(\mathbf{k}) \right. \\ & \left. \times \left(P \frac{-1}{\hbar\omega - \hbar\omega_{n'n}(\mathbf{k})} - i\pi\delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{n'n}(\mathbf{k})) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (10.32)$$

Der komplexe Suszeptibilitätstensor $\chi_{ij}(\omega)$ kann in der Praxis nicht direkt aus Gl. (10.32) berechnet werden, da aus numerischen Gründen eine Summation über alle Bänder i.d.R. nicht möglich ist. Im Abschnitt 11.3 wird das konkrete Vorgehen diskutiert. Für das Folgende sei $\chi_{ij}(\omega)$ bzw. die Projektion auf eine skalare Komponente $\chi(\omega) = \sum_{ij} \epsilon_i^* \chi_{ij}(\omega) \epsilon_j$, wobei ϵ ein normierter Eigenvektor von χ_{ij} ist, als bekannt vorausgesetzt. Die Gleichungen des nächsten Abschnitts beziehen sich somit auf χ .

10.6. Zusammenhang mit messbaren Größen

Obwohl die komplexe Suszeptibilität selbst nicht direkt messbar ist, dient sie jedoch als Ausgangspunkt zur Berechnung aller optischen Kenngrößen. Zunächst steht sie in direkten Zusammenhang mit der dielektrischen Funktion ε :

$$\varepsilon_{ij} = \delta_{ij} + \chi_{ij} \quad (\text{Tensor}) \quad (10.33)$$

$$\varepsilon = 1 + \chi \quad (\text{Skalar}) \quad (10.34)$$

welche zwischen der (linearisierten) dielektrischen Verschiebung \mathbf{D} und dem elektrischen Feld \mathbf{E} vermittelt:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \approx \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E}.$$

Wegen $\mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi \mathbf{E}$ und der Relation

$$\mathbf{j} = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{P} = \frac{\partial}{\partial t} \varepsilon_0 \chi \mathbf{E} = \sigma \mathbf{E}$$

kann die elektrische Leitfähigkeit σ im Frequenzraum direkt durch χ ausgedrückt werden:

$$\sigma(\omega) = -i\varepsilon_0 \omega \chi(\omega).$$

Für optische Experimente wichtiger ist der (komplexe) Brechungsindex n , der als Wurzel von ε definiert ist

$$n(\omega) := \sqrt{\varepsilon(\omega)} = n_r + i n_i. \quad (10.35)$$

Während der Realteil von n gleich dem gewöhnlichen optischen Brechungsindex ist, weist der Imaginärteil eine enge Verwandtschaft mit dem Absorptionskoeffizienten α auf [97]:

$$\alpha(\omega) = 2 \frac{\omega}{c} n_i(\omega). \quad (10.36)$$

Die Reflektivität $R(\omega)$, das Verhältnis von einfallender und reflektierter Intensität, ist bei senkrechtem Einfall gegeben durch [97]:

$$R(\omega) = \frac{(n_r - 1)^2 + n_i^2}{(n_r + 1)^2 + n_i^2} \quad (10.37)$$

Die transmittierte Intensität bei senkrechtem Einfall durch eine homogene Schicht der Dicke d ist (unter Vernachlässigung von Randeffekten)

$$T(\omega) = \frac{16 \frac{n_r^2 + n_i^2}{[(n_r + 1)^2 + n_i^2]^2} e^{-2\alpha d}}{e^{2\alpha d} + R^2 e^{-2\alpha d} + 2R \cos[2(\phi + n_r \omega d/c)]}. \quad (10.38)$$

wobei ϕ der Phasenwinkel $\arctan[2n_i/(n_r^2 + n_i^2 - 1)]$ ist. Typischerweise liegt das Argument der Kosinusfunktion im drei- oder vierstelligen Bereich. Speziell für das in Abschnitt 12.1.5 diskutierte Experiment ($d \approx 0,1$ mm, $n_r \approx 3,6$, $\hbar\omega = 117$ meV) beträgt es rund 427. Lokale Inhomogenitäten der Probendicke führen zu einer raschen Ausmittelung des Kosinustermes, so dass näherungsweise

$$T(\omega) = \frac{16 \frac{n_r^2 + n_i^2}{[(n_r + 1)^2 + n_i^2]^2} e^{-2\alpha d}}{e^{2\alpha d} + R^2 e^{-2\alpha d}}$$

gemessen wird. Normiert man diesen Wert auf die Nullfeld-Transmitivität $T_0(\omega) = T(\omega, B = 0)$ und nimmt man zudem an, dass der Brechungsindex sich im Magnetfeld nur geringfügig ändert und $R^2 e^{-2\alpha d} \ll e^{2\alpha d}$, $n_i \ll n_r$ gilt, erhält man

$$\frac{T(\omega)}{T_0(\omega)} = e^{-4(\alpha - \alpha_0)d} \approx e^{-4\alpha d} \quad (10.39)$$

Aus den normierten, experimentellen Transmittivitäten kann daher näherungsweise der Absorptionskoeffizient im Magnetfeld bestimmt werden.

KAPITEL 11

IMPLEMENTIERUNG

Thema dieses Kapitels ist die Implementierung der in den letzten Kapiteln abgeleiteten Gleichungen und die dabei aufgetretenen Probleme sowie deren Lösung. Um die Qualität der Theorie sowie der numerischen Routinen zu überprüfen, wurden zahlreiche Tests durchgeführt, wie die f-Summen-Regel, die Auswahlregeln bei der optischen Absorption und die resultierenden effektiven Lande g -Faktoren. Die Ergebnisse werden in diesem Kapitel dokumentiert und diskutiert. Die numerischen Resultate und die daraus abgeleiteten physikalischen Vorhersagen sind Gegenstand der nächsten beiden Kapitel.

11.1. Einheitszellen von Zinkblende-Gittern im Magnetfeld

Vor der Berechnung der Magnetbandstruktur eines Zinkblende-Kristalls muss eine geeignete magnetische Einheitszelle konstruiert werden. Wie in Kapitel 6 erläutert, wählt man eine primitive Translation — hier mit \mathbf{a}_3 bezeichnet — parallel zur Feldachse. Um den involvierten numerischen Aufwand so klein wie möglich zu halten, empfiehlt es sich, \mathbf{B} parallel einer niedrig indizierten Kristallrichtung zu orientieren. Exemplarisch sollen die magnetischen Einheitszellen für die gebräuchliche [001]- und [011]-Richtung konstruiert werden.

11.1.1. Feld parallel zur [001]-Achse

Die kürzeste, primitive Translation in [001]-Richtung ist $\mathbf{a}_3 = (0, 0, a)$, wobei a die Gitterkonstante des jeweiligen Kristalls ist, also im Falle von GaAs gerade 0,56533 nm. Aus numerischen Gründen wird eine orthogonale Einheitszelle

gewählt. Prinzipiell könnte man auch mit einer nur halb so viele Atome umfassenden nichtorthogonalen Einheitszelle arbeiten, aber zwei Gründe wiegen diesen scheinbaren Vorteil mehr als auf: Erstens ist die Größe der magnetischen Einheitszelle durch die Fläche der Einheitszelle senkrecht zum Magnetfeld bestimmt. Diese ist im nichtorthogonalen Fall nur halb so groß, so dass beide magnetischen Einheitszellen wieder gleich viele Atome umfassen. Zweitens erschweren nichtorthogonale Einheitszellen den Vergleich der Magnetbandstrukturen für verschiedene Felder erheblich, da keiner der reziproken Gittervektoren in Feldrichtung weist und die Brillouin-Zone mit der Feldstärke ihre Form ändert.

Die kleinstmöglichen zu \mathbf{a}_3 und zueinander orthogonalen primitiven Translationen sind durch $\mathbf{a}_1 = \left(\frac{a}{\sqrt{2}}, 0, 0\right)$ und $\mathbf{a}_2 = \left(0, \frac{a}{\sqrt{2}}, 0\right)$ gegeben. Der Einfachheit halber wurde wie schon in Kapitel 9 die konventionelle Einheitszelle 45° um die z -Achse gedreht, damit \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 parallel zur x - bzw. y -Achse liegen. Diese tetragonale Zelle umschließt das doppelte Volumen der minimalen Einheitszelle. In Abb. 9.1 ist diese in einem fcc-Gitter eingezeichnet. Die Vergrößerung der Einheitszelle geht mit einer Faltung der Brillouin-Zone einher. In der resultierenden Bandstruktur von GaAs (vgl. Abb. 11.1) sind die beiden X -Punkte entlang der Magnetfeldrichtung auf den Γ -Punkt zurückgefaltet (gestrichelte Linien), während die verbleibenden vier X -Punkte am Brillouin-Zonenrand bleiben.

Die Positionen der Basisatome in Einheiten von $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ lauten:

$$\begin{aligned} \text{Ga} : & \left\{ (0, 0, 0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \right\} \\ \text{As} : & \left\{ \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}\right), \left(1, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}\right) \right\} \end{aligned} \quad (11.1)$$

Wählt man $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$, liegt \mathbf{A} parallel zu \mathbf{a}_2 und $|\mathbf{A}|$ wächst nur in Richtung der \mathbf{a}_1 -Achse. Die magnetische Einheitszelle zum Magnetfeld

$$\mathbf{B} = \Phi_0 \frac{P}{Q} \frac{\mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_3 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_1} = \Phi_0 \frac{P}{Q} \frac{2}{a^2} (0, 0, 1)^T \quad (11.2)$$

soll nun anhand des in Kapitel 6 und Abschnitt 7.3 beschriebenen Procedere konstruiert werden. Schreibt man die Abstandsvektoren von Anion zum Kation als Linearkombinationen der \mathbf{a}_i mit rationalen Koeffizienten x_i/y_i , so lauten die gekürzten Nenner $(y_1, y_2, y_3) = (2, 1, 4)$. Nach den Gln. (7.28, 7.29) wird dann die magnetische Einheitszelle durch die drei Vektoren:

$$Q \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3 \quad (11.3)$$

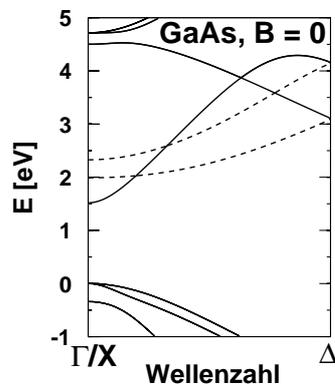


Abbildung 11.1: Bandstruktur von GaAs ($sp^3d^5s^*$ -TB-Modell mit den Parametern aus Ref. [7]) bei Wahl einer tetragonalen Einheitszelle. Die gestrichelten Bänder sind in die kleinere tetragonale Brillouin-Zone zurückgefaltet.

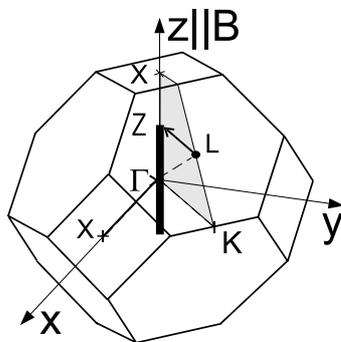


Abbildung 11.2: Die Brillouin-Zone des feldfreien Kristalls (hier fcc) wird durch das Magnetfeld auf eine stabförmige Magnetobrigouin-Zone gefaltet. Im hier dargestellten Fall $\mathbf{B} \parallel \hat{\mathbf{e}}_z$ wird der X- und Γ -Punkt auf den Γ -Punkt der neuen Zelle projiziert. Der L-Punkt findet sich in der Nähe des Z-Punktes wieder.

aufgespannt. Offensichtlich nimmt sie für wachsendes Q die Form eines Stabes an.

Mit wachsendem Q schrumpft die magnetische Brillouin-Zone zu einem flächigem Gebilde. Wird zusätzlich von der Eichinvarianz Gebrauch gemacht (vgl. Abschnitt 8.3), lässt sich Brillouin-Zone auf ein Q 'tel reduzieren. Diese nichttriviale, nadelförmige Brillouin-Zone ist nur noch entlang der Magnetfeldrichtung ausgedehnt. Abb. 11.2 veranschaulicht die ursprüngliche Brillouin-Zone eines fcc-Volumen-Kristalls und die neue stabförmige BZ. Senkrecht zur Stabachse weist die Magnetobandstruktur keine Dispersion auf. Lediglich bei sehr hohen Feldern, kleinem Q und Zuständen tief innerhalb der Bänder kann es zu einer Dispersion senkrecht zur Magnetfeldrichtung kommen. Hauptursache für dieses schon früher beobachtete Phänomen [70] ist, neben der vielfachen Rückfaltung der Bänder, die Ausbildung geschlossener Ortsraum-Bahnen und damit die effektive Lokalisierung der Elektronen. Nicht von Lokalisierungs-Effekten betroffen ist die Bewegung in Feldrichtung.

11.1.2. Feld parallel zur [011]-Achse

Behält man obige tetragonale Einheitszelle bei und orientiert lediglich das Magnetfeld parallel zur \mathbf{a}_1 Achse, hat man bereits die korrekte Einheitszelle für ein in [110]-Richtung orientiertes Magnetfeld. Um konsistent mit der bisherigen Konvention eines in z -Richtung zeigenden Magnetfeldes zu bleiben, wird das Koordinatensystem in obiger Einheitszelle um 90° gedreht, so dass $\mathbf{a}_3 = (0, 0, a/\sqrt{2})$ wieder parallel zum Magnetfeld orientiert ist und $\mathbf{a}_1 = (a/\sqrt{2}, 0, 0)$ wie $\mathbf{a}_2 = (0, a, 0)$ entlang von Koordinatenachsen liegen. Die Position der Basisatome in Einheiten der neuen \mathbf{a}_i ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} \text{Ga} &: \left\{ (0, 0, 0), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \right\}, \\ \text{As} &: \left\{ \left(0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2} \right), \left(\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 0 \right) \right\}, \end{aligned} \quad (11.4)$$

was natürlich nur einer Permutation der Komponenten von Gl. (11.1) entspricht. Die gemeinsamen Nenner (y_1, y_2, y_3) der Anion-Kation Vektoren $\pm \frac{1}{4}\mathbf{a}_2 \pm \frac{1}{2}\mathbf{a}_3$ sind $(1, 4, 2)$, was für nicht durch vier Teilbare P eine größere magnetische Einheitszelle

$$\text{Nenner} \left[\frac{P}{4} \right] Q \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3 \quad (11.5)$$

als im [001]-Fall zur Folge hat. Die weitere Reduktion der Brillouin-Zone und Faltung der Hochsymmetriepunkte ist analog zu den in [001]-Richtung orientierten Feldern.

11.2. Berechnung der magnetischen Bandstruktur

Soll ein Vergleich magnetischer Bandstrukturen für unterschiedliche \mathbf{B} durchgeführt werden, ergeben sich prinzipielle sowie numerische Probleme.

11.2.1. Numerik

Die numerischen Schwierigkeiten sind überwiegend durch die Dimension der Hamiltonmatrix bedingt: Bei einem Feld von ca. 20 T enthält die magnetische Einheitszelle im günstigsten Fall rund 200.000 Orbitale. Eine Diagonalisierung oder

gar Speicherung der vollen Matrix ist gegenwärtig unmöglich. Durch die stabförmige Gestalt der Einheitszelle koppeln aber nur vergleichsweise wenige inäquivalente¹ Atome miteinander. Bis auf einen kleinen Prozentsatz sind somit die meisten Einträge der Hamiltonmatrix gleich Null. Es empfiehlt sich daher, lediglich die wenigen nicht verschwindenden Einträge dieser dünn besetzten Matrix zu speichern. Hierfür wurde eine auf spezielle blockförmige Gestalt der TB-Matrix zugeschnittene „Sparse-Matrix“-Darstellung des Hamilton-Operators entwickelt. Diese Rechen- und Speicherressourcen schonende Vorgehensweise ermöglichte es erstmals auch moderate Magnetfelder zu untersuchen.

Die hier relevanten physikalischen Größen werden durch die elektronischen Zustände in der Umgebung der Fermienergie E_F dominiert. Da diese in Halbleitern in- oder zumindest in der Nähe der Bandlücke liegt, reicht es aus, die Eigenwerte und Eigenvektoren der Bandkantenannahen Zustände zu bestimmen. Dazu wird das Eigenwert-Spektrum der Hamiltonmatrix \mathbb{H} durch Subtraktion von E_F verschoben und die Eigenwerte in einer δ -Umgebung von 0 gesucht. Formal werden also die betragsmäßig kleinsten Lösungen des Eigenwert-Problems

$$(\mathbb{H} - 1E_F) \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x} \quad (11.6)$$

bestimmt. Ein numerisch effizientes Verfahren zur Diagonalisierung eines Sub-Raumes einer großen Matrix ist das Lanczos/Arnoldi-Verfahren [98]. Sein Vorteil liegt darin, dass lediglich eine Matrix-Multiplikations-Funktion $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ bei gegebenen \mathbf{A} und \mathbf{x} zur Verfügung stehen muss. Aufgrund der wenigen Einträge in der Matrix \mathbb{H} und der internen Blockdarstellung ist diese Multiplikation effizient durchführbar. Deutlich schneller als innere Eigenwerte lassen sich die äußeren Eigenwerte, d.h. größten oder kleinsten berechnen. Prinzipiell können auch die betragsmäßig kleinsten Eigenvektoren durch Anwenden des Arnoldi-Verfahrens auf die invertierte, verschobene Matrix („Shift-Inverse“) ebenso effektiv bestimmt werden. Man sucht also die betragsmäßig größten Eigenwerte λ^{-1} des neuen Eigenwert-Problems

$$(\mathbb{H} - 1E_F)^{-1} \mathbf{y} = \lambda^{-1} \mathbf{y}. \quad (11.7)$$

Für die Arnoldi-Routine benötigt man dann aber die Operation $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{y}$ bzw. $\mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{b}$ zu vorgegebenen \mathbf{A} und \mathbf{b} , was leider erheblichen Aufwand bedeutet.

¹Inäquivalent im Sinne von nicht durch primitive magnetische Translationen ineinander überführbar.

Eine prinzipielle Schwäche des Arnoldi Verfahrens ist, dass meist nur wenige Eigenzustände von entarteten Unterräumen gefunden werden. Wie jedoch numerische Tests zeigen, reicht bereits eine schwache, die Entartung aufhebende Störung um alle Zustände zu finden. Bei den magnetischen Bandstrukturen reicht es aus, zur Orbital-Energie der Atome entlang der Längsachse der magnetischen Einheitszelle eine Sinus-Modulation $\gamma \sin(x/x_0)$ zu addieren, wobei x_0 die Länge der magnetischen Einheitszelle in x -Richtung bezeichnet. Schon bei einer Amplitude γ , welche eine Größenordnung *unterhalb* der erforderlichen Genauigkeit liegt, werden alle Eigenvektoren gefunden. Die durch die Störung verursachte Abweichung in den abgeleiteten Eigenenergien liegt deutlich unter der vorgegebenen Genauigkeit.

11.2.2. Rationalitätsbedingung

Die zweite Problematik ergibt sich durch die Rationalitätsbedingung.

Kleine Schwankungen im Betrag des Magnetfelds führen zu beliebig großen Änderungen in den rationalen Faktoren P und Q oder gar zu irrationalen Magnetfeldern, welche diesem Zugang verschlossen sind. So kann eine Zunahme des Magnetfeldes um zwei Promille den Fluss durch eine Seite von $\frac{1}{2}\Phi_0$ auf $\frac{501}{1000}\Phi_0$ erhöhen und die magnetische Einheitszelle um einen Faktor 500 vergrößern. Dies erschwert den Vergleich der zugehörigen Bandstrukturen wegen der stark unterschiedlichen Zahl der Bänder erheblich. Noch dramatischer wirkt sich dies auf die numerische Handhabbarkeit aus, da die Zeit zur Diagonalisierung der Matrix mit $O(N^3)$ steigt. Um fraktale Energiespektren von Halbleitern aufzulösen (vgl. Kapitel 13) ist es aber unabdingbar die Bandstruktur für nahe benachbarte Feldstärken und damit für große Nenner mit zahlreichen Eigenwert-Clustern zu berechnen. Ist man dagegen weit von fraktalen Strukturen entfernt, kann durch eine geschickte Wahl der Feldstärken ($P = 1$) der Rechenaufwand ohne Vernachlässigung physikalischer Effekte minimiert werden.

Nicht nur Betrags- sondern auch Richtungsänderungen von \mathbf{B} sollen untersucht werden. Auch hier haben beliebig kleine Modifikationen rapide wechselnde Formen und Größen der Brillouin-Zone zur Folge, welche meist nur mit erheblichem Aufwand berechenbar sind.

11.3. Berechnung der Suszeptibilität

Für die konkrete Berechnung von Gl. (10.32) ist das Vorgehen komplexer als im feldfreien Fall. Aufgrund der sehr hohen Anzahl der Magnetobänder — bei 20 T rund 200.000 — verbietet sich die vollständige Diagonalisierung des magnetischen Hamilton-Operators und damit die Summation über alle Bänder in Gl. (10.32). Die reduzierte Kramers-Symmetrie im Magnetfeld² lässt den Beitrag $\sum_{n,n',\mathbf{k}} p_{inn'}(\mathbf{k}) p_{jn'n}(\mathbf{k})$ für $i \neq j$ i.A. komplex werden. Eine direkte Aufspaltung des Tensors in einen Realteil und einen zur δ -Funktion proportionalen Imaginärteil ist daher nicht ohne weiteres möglich.

Wird hingegen die Suszeptibilität $\chi_{\epsilon} = \sum_{ij} \epsilon_i^* \chi_{ij} \epsilon_j$ für ein konkretes elektrisches Feld $\mathbf{E}(t) = \boldsymbol{\epsilon} E_0 e^{i\omega t}$ berechnet, kann diese Aufteilung dennoch vorgenommen werden. Wie leicht gezeigt werden kann, löst eine mit dem Vektor $\boldsymbol{\epsilon}$ polarisierte elektromagnetische Welle die homogene Maxwellgleichung im Dielektrikum, falls $\boldsymbol{\epsilon}$ ein Eigenvektor von χ_{ij} ist. Die Suszeptibilität für eine entsprechend polarisierte elektromagnetische Welle ist mit Gl. (10.32)³:

$$\begin{aligned} \chi(\omega) = & \frac{-e^2}{m\omega^2 \epsilon_0 V} \sum_{n,\mathbf{k}} \{ f_n(\mathbf{k}) \boldsymbol{\epsilon}^* \mathbb{T}_{nn}(\mathbf{k}) \boldsymbol{\epsilon} \\ & + \frac{1}{m} \sum_{n'} [f_{n'}(\mathbf{k}) - f_n(\mathbf{k})] \boldsymbol{\epsilon}^* \cdot \mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}) \mathbf{p}_{n'n}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\epsilon} \\ & \times \left(P \frac{1}{\hbar\omega - \hbar\omega_{n'n}(\mathbf{k})} + i\pi\delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{n'n}(\mathbf{k})) \right) \}. \end{aligned} \quad (11.8)$$

Offensichtlich sind nun die ersten beiden Zeilen nach dem Gleichheitszeichen reell, so dass χ problemlos in eine reelle χ_r und eine imaginäre χ_i Komponente aufgespalten werden kann:

$$\begin{aligned} \chi_r(\omega) = & \frac{-e^2}{m\omega^2 V \epsilon_0} \sum_{n,\mathbf{k}} \boldsymbol{\epsilon}^* \cdot \{ f_n(\mathbf{k}) \mathbb{T}_{nn}(\mathbf{k}) \\ & + \frac{1}{m} \sum_{n'} [f_{n'}(\mathbf{k}) - f_n(\mathbf{k})] \frac{\mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}) \mathbf{p}_{n'n}(\mathbf{k})}{\hbar\omega - \hbar\omega_{n'n}(\mathbf{k})} \} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \end{aligned} \quad (11.9a)$$

²Für $B \neq 0$ reduziert sich die Kramers-Symmetrie auf $E_{n,s=\uparrow}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) = E_{n,s=\downarrow}(-\mathbf{k}, -\mathbf{B})$.

³Der Polarisationsindex entfällt im Folgenden.

$$\chi_i(\omega) = \frac{\pi e^2}{m^2 \omega^2 V \epsilon_0} \sum_{n,n',\mathbf{k}} [f_n(\mathbf{k}) - f_{n'}(\mathbf{k})] \times |\mathbf{p}_{n'n}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\epsilon}|^2 \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_{n'n}(\mathbf{k})) . \quad (11.9b)$$

Während zum Realteil der Suszeptibilität alle Bänder beitragen, gehen in den Imaginärteil von $\chi(\omega)$ nur diejenigen Zustände ein, zwischen denen auch wirklich ein Übergang erfolgen kann⁴. Diese liegen in einem Energie-Intervall von $\pm(\hbar\omega_{\max} + N_d k_B T)$ um die Fermikante, wobei $N_d \gg 1$ und $\hbar\omega_{\max}$ die höchste auftretende Photonenenergie ist.

Um physikalisch messbare Größen, wie die Absorption zu ermitteln, wurde χ_r aus χ_i über die Kramers-Kronig-Relation berechnet:

$$\chi_r(\omega_o) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\omega \chi_i(\omega)}{\omega^2 - \omega_o^2} d\omega \quad (11.10)$$

Bei Kenntnis aller Eigenzustände des Hamilton-Operators in einem Intervall von $E_F - \hbar\omega_1$ bis $E_F + \hbar\omega_1$ lässt sich χ_i im Intervall von 0 bis etwa $\hbar\omega_1$ berechnen. Für die komplexe Suszeptibilität $\chi = \chi_r + i\chi_i$ ist das Intervall deutlich einzuschränken, da andernfalls die Kramers-Kronig-Relation ein verfälschtes χ_r liefert. Die direkte Berechnung von χ_r mittels Gl. (11.9a) oder Gl. (11.8) verbietet sich, da hierfür über *alle* Bänder summiert werden müsste.

11.3.1. Bestimmung der Polarisations-Vektoren

Die Aufteilung von Gl. (11.8) in einen reellen und imaginären Teil (Gl. (11.9a) bzw. Gl. (11.9b)) gilt für beliebige (komplexe) Vektoren $\boldsymbol{\epsilon}$. Für die in dieser Arbeit behandelten kubischen Kristalle mit einem entlang der [001]-, [011]- oder [111]-Achse orientierten Magnetfeld hat die Suszeptibilität die Form [99, 100]:

$$\chi = \begin{bmatrix} \chi_{11} & \chi_{12} & 0 \\ -\chi_{12} & \chi_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{33} \end{bmatrix} .$$

Das Magnetfeld liegt auch hier parallel zur z -Achse. Die Eigenschaft $\chi_{21} = -\chi_{12} \in i\mathbb{R}$ für [001]- und [011]-Felder folgt auch direkt aus den Gln. (8.29,8.31). Speziell

⁴Übergänge höherer Ordnung werden vernachlässigt.

für ein parallel zur [001]- oder [111]-Kristallrichtung anliegendes Feld gilt darüber hinaus $\chi_{11} = \chi_{22}$, woraus direkt die drei Eigenvektoren von χ_{ij} folgen:

$$\boldsymbol{\epsilon}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon}_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Links-, rechts- und in z -Richtung polarisiertes Licht löst also gerade die Maxwellgleichung.

Für die verbleibende [011]-Richtung ist folgendermaßen vorzugehen: Alle Diagonalkomponenten χ_{ii} können direkt durch Einsetzen von $\boldsymbol{\epsilon} = \hat{\mathbf{e}}_i$ in Gl. (11.9b) und anschließender Kramers-Kronig Transformation berechnet werden. Für zirkular polarisiertes Licht $\boldsymbol{\epsilon}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, \pm i, 0)^T$ liefert Gl. (11.9b)

$$\chi \boldsymbol{\epsilon}_\pm = \frac{\chi_{11} + \chi_{22}}{2} \pm i\chi_{12},$$

woraus χ_{12} und damit der Tensor χ_{ij} vollständig bestimmt werden kann. Die Berechnung der Eigenvektoren und damit der „korrekten“ Suszeptibilität/Absorption ist nun problemlos möglich.

11.3.2. Brillouin-Zonen Integration

Soll der Vergleich mit dem Experiment über die effektive Masse — welche sich aus dem Abstand der Landau-Niveaus bestimmen lässt — hinausgehen, ist die Dielektrizitätskonstante $\varepsilon(\omega)$ über Gl. (11.9b) und Gl. (11.10) zu berechnen. Hierfür muss über die magnetische Brillouin-Zone integriert und über die magnetischen Bänder summiert werden.

Für die \mathbf{k} -Raum Integration sind die in Kapitel 8 abgeleiteten Punkt- und Eichsymmetrien von entscheidender Bedeutung. Die Eichfreiheit (Abschnitt 8.3) erlaubt, es alle \mathbf{k} -abhängigen Observablen, wie Energie und Impuls, auf einen \mathbf{k} -Wert im nichttrivialen Streifen der (eigentlich) blattförmigen Brillouin-Zone zurückzuführen, was den involvierten Rechenaufwand signifikant vermindert. Die im Magnetfeld verbleibenden Punkt-Symmetrien verkleinern den zu integrierenden Bereich der Brillouin-Zone auf einen irreduziblen Keil.

Bei nicht zu kleinem Q ,⁵ kann die Brillouin-Zonen Integration weiter eingeschränkt werden, da sowohl $E(\mathbf{k})$ als auch $\mathbf{p}(\mathbf{k})$ nur verschwindende Variationen in den

⁵Für typische Halbleiter bei $B < 1500$ T stets der Fall.

normal zum Magnetfeld stehenden Richtungen aufweisen⁶. Die dreidimensionale \mathbf{k} -Integration wurde daher effektiv auf eine eindimensionale Integration über k_z mit 32 oder mehr Stützpunkten reduziert. Für die Integration wurde die Dispersion entlang k_z quadratisch, das Impulsmatrixelement lediglich linear interpoliert, um unphysikalische „Überschwinger“ infolge stark schwankender Impulsmatrixelemente zu vermeiden.

11.4. F-Summen-Regel

Ausgehend von der Spur-Darstellung des Leitfähigkeitstensors [101]

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{imV_0} \int_0^\infty e^{-i\omega t} \text{Tr} \{[\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_j] \rho_0\} dt \quad (11.11)$$

kann mit der Kramers-Kronig Relation eine Summen-Regel für die diagonalen Komponenten der transversalen dielektrischen Funktion abgeleitet werden [101]:

$$\int_0^\infty \omega \text{Im} [\epsilon_{ii}(\omega)] d\omega = \frac{2\pi^2 e^2}{m\epsilon_0 V_0} N_{\text{val}}. \quad (11.12)$$

Mit V_0 wurde das Volumen und mit N_{val} die Zahl der Valenzelektronen der magnetischen Einheitszelle bezeichnet.

Innerhalb des empirischen Tight-Binding Formalismus ist jedoch die Ableitung von Gl. (11.12) nicht gültig, da mehrmals die Vollständigkeit und die Kommutatorrelation $[\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ eingehen, welche in einer endlichen Basis nicht erfüllt sind. Am einfachsten erkennt man dies daran, dass — unabhängig von der (endlichdimensionalen) Matrixdarstellung der Operatoren \mathbf{r} und \mathbf{p} — wegen $\text{Tr} \{\mathbf{r}\mathbf{p}\} = \text{Tr} \{\mathbf{p}\mathbf{r}\}$ auch $\text{Tr} \{[\mathbf{r}, \mathbf{p}]\} = 0$ gilt. Nichtsdestotrotz kann eine zu Gl. (11.12) komplementäre Summenregel bei $T = 0$ aus Gl. (11.9b) abgeleitet werden [87]:

$$\int_0^\infty \omega \text{Im} [\epsilon_{ii}(\omega)] d\omega = \frac{2\pi^2 e^2}{m\epsilon_0 V_0} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, n \in \text{VB}} (\mathbb{T}_{nn}(\mathbf{k}))_{ii} \quad (11.13)$$

⁶Im Falle kleiner Nenner, also $P/Q \in \{1/5, 1/4, 2/5, 1/3, 1/2, \dots\}$, besitzt sowohl die Energie, als auch das Impulsmatrixelement eine merkliche Variation in k_x - und k_y -Richtung, weshalb in diesem Falle über den gesamten irreduziblen Keil integriert werden muss.

Da Gl. (11.12) mit der Wahrscheinlichkeitserhaltung bei optischen Übergängen zusammenhängt, sollte Gl. (11.12) zumindest näherungsweise auch im Tight-Binding-Formalismus erfüllt sein. Graf [87] schlug daher vor, die Abweichung

$$\delta = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, n \in \text{VB}} (\mathbb{T}_{nn}(\mathbf{k}))_{ii} - N_{\text{Val}}$$

als Test für die Qualität von Tight-Binding-Parametersätzen zu verwenden. Substituiert man alle Größen durch die entsprechenden Äquivalente im Magnetfeld, gilt diese Gleichung entsprechend und kann in der Form

$$\delta = \frac{m\varepsilon_0 V_0}{2\pi^2 e^2} \int_0^\infty \omega \text{Im}[\epsilon_{ii}(\omega)] d\omega - N_{\text{Val}}$$

zur Überprüfung der Korrektheit und der Qualität der numerischen Integrationsroutinen dienen.

11.5. Überprüfung der Auswahlregeln der Absorption

Um die Validität des optischen Tight-Binding Modells zu prüfen, wird zunächst der feldfreie Fall im langwelligen Limes betrachtet. Die Suszeptibilität für diesen Grenzfall wurde bereits in Ref. [79] abgeleitet, aber bis auf einen Vergleich von $\text{Im}(\epsilon(\omega))$ aus einem sp^3s^* -Modell ohne Spin mit experimentellen Daten nicht weiter verifiziert. Zur Überprüfung der korrekten Auswahlregeln bei den optischen Übergängen wurde das so genannte Spinpumpen untersucht. Dieser sowohl theoretisch ($\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$), als auch experimentell eingehend untersuchte Effekt beruht auf der Drehimpulserhaltung bei optischen Übergängen. Wird ein direkter Halbleiter mit einem p -artigen Valenzbandmaximum am Γ -Punkt und s -artigen Leitungsbandminimum mit links-zirkular polarisiertem Licht bestrahlt, dessen Energie gerade der Bandlücke entspricht, so ist ein Übergang in den Spin-Hinauf Zustand des Leitungsbandes $|\alpha = s, \uparrow\rangle$ dreimal so wahrscheinlich wie in den dazu entarteten Zustand mit entgegengesetzter Spineinstellung $|\alpha = s, \downarrow\rangle$. Effektiv resultiert also eine Spinpolarisation von $-\frac{1}{2}$ im Leitungsband.

Eine analytische und numerische Verifizierung ergibt, dass sich die Vorhersagen mit denen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie decken.

Ein weiterer Test für das magnetische Tight-Binding-Modell sind die Auswahlregeln der Magnetoabsorption. Für wenige Tesla große Magnetfelder geben die

störungstheoretischen Methoden der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie analytische Auswahlregeln, welche mit den numerischen Tight-Binding Ergebnissen verglichen werden. Der Einfachheit halber sollen hier Intrabandübergänge in einem s -artigen Γ -Tal des Leitungsbandes von GaAs diskutiert werden. Das Magnetfeld ist entlang der $[001]$ -Kristallachse orientiert und beträgt 20 T, was etwa 200.000 Orbitalen pro Einheitszelle entspricht.

11.5.1. Magnetoabsorption im Enveloppen-Modell

Da \mathbf{B} die Periodizität bricht und — bei moderaten Feldern — zu einer langwelligeren effektiven Potenzialmodulation führt, empfiehlt sich die Entwicklung von $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ nach den feldfreien Wellenfunktionen am Γ -Punkt $\langle \mathbf{r} | \Gamma, n \rangle = u_{n,\Gamma}(\mathbf{r})$. Die effektive Schrödingergleichung für die Entwicklungskoeffizienten $\phi_{n'}(\mathbf{r})$ lautet dann⁷ [102]:

$$\sum_{n'} \mathbf{\Pi} \mathbb{D}_{nn'} \mathbf{\Pi} \phi_{n'}(\mathbf{r}) = E_n \phi_n(\mathbf{r}), \quad (11.14)$$

wobei

$$(\mathbb{D}_{nn'})_{ij} := \frac{1}{2m} \delta_{nn'} \delta_{ij} + \frac{1}{m^2} \sum_{l \neq n, n'} \frac{(\boldsymbol{\pi}_{nl})_i (\boldsymbol{\pi}_{ln'})_j}{E_0 - E_l}, \quad (11.15)$$

$$(\boldsymbol{\pi}_{nl})_i := \int u_n^* \left[p_i - \frac{\hbar}{4mc^2} (\nabla V \times \boldsymbol{\sigma})_i \right] u_l d^3r, \quad (11.16)$$

V das periodische Potenzial, E_0 die Energie des entarteten Valenzbandmaximums und E_l die Energie des ungestörten Zustandes ist. In erster Ordnung haben die Lösungen von Gl. (11.14) die Form [102]

$$\psi = \sum_n \phi_n(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}) + \frac{1}{m} \sum_{n' \neq n} \frac{\boldsymbol{\pi}_{n'n} \cdot \mathbf{\Pi}}{E_n - E_{n'}} \phi_n(\mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{r}), \quad (11.17)$$

wobei $\phi_n(\mathbf{r})$ die Lösung der effektiven Enveloppen-Gleichung

$$\frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m^*} \phi_n(\mathbf{r}) = E_n \phi_n(\mathbf{r}) \quad (11.18)$$

⁷Vereinfachend wurde angenommen, dass $[\Pi_i, \Pi_j] = 0$. Wird diese Näherung nicht vorgenommen ist \mathbb{D} in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Anteil zu zerlegen.

ist. In der asymmetrischen Eichung ist $\phi_n \rightarrow \phi_{n,n_l}$ die n_l 'te harmonische Oszillatorfunktion im Band n (vgl. Anhang A).

Die Übergangswahrscheinlichkeit in niedrigster Ordnung im Leitungsband (Zyklotronresonanz) ist proportional zum Quadrat des (kanonischen) Impulsmatrixelements mal dem Polarisationsvektor $\boldsymbol{\epsilon}$ (Fermis goldene Regel). In niedrigster Ordnung kann die Wellenfunktion des ersten Leitungsbandes Gl. (11.17) auf einen einzigen Summanden reduziert werden: $\psi_{n,n_l} \approx \phi_{n,n_l}(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r})$. Die Übergangsamplitude zwischen ψ_{n,n_l} und ψ_{n',n'_l} ist in dieser Näherung proportional zu:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{\Pi}_{nn_l, n'n'_l} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \rangle &= \langle \psi_{n,n_l} | \mathbf{\Pi} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | \psi_{n',n'_l} \rangle & (11.19) \\ &\approx \int u_n^*(\mathbf{r}) \phi_{nn_l}^*(\mathbf{r}) \mathbf{\Pi} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \phi_{n'n'_l}(\mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{r}) d^3r \\ &\approx \int \phi_{nn_l}^*(\mathbf{r}) \mathbf{\Pi} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \phi_{n'n'_l}(\mathbf{r}) d^3r \times \underbrace{\int u_n^*(\mathbf{r}) u_{n'}(\mathbf{r})}_{\delta_{n,n'}} \\ &\quad + \int \phi_{nn_l}^*(\mathbf{r}) \phi_{n'n'_l}(\mathbf{r}) d^3r \times \int u_n^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\epsilon} u_{n'}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Da sich ϕ und \mathbf{A} bei moderaten Feldern nur sehr langsam im Vergleich zu u_n ändern, wird das Integral im 2. Schritt in einen rasch- und einen langsam oszillierenden Teil aufgespalten. Wegen der Orthogonalität der Blochzustände liefert der erste Summand nur bei Intra-bandübergängen einen nichtverschwindenden Beitrag und beschreibt damit maßgeblich die Zyklotronresonanz. Der zweite Summand dominiert bei Inter-bandübergängen, wie z.B. vom Valenz- in das Leitungsband.

Intra-band in erster Ordnung

Für die hier diskutierte Zyklotronresonanz ($n = n'$) bestimmt das Enveloppenintegral

$$\int \phi_{nn_l}^*(\mathbf{r}) \mathbf{\Pi} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \phi_{n'n'_l}(\mathbf{r}) d^3r \quad (11.20)$$

maßgeblich die Auswahlregeln. Steht das elektrische Feld senkrecht zum Magnetfeld ($\boldsymbol{\epsilon} \perp \mathbf{B}$), verschwindet Gl. (11.20) bei nichtsenkrechten Übergängen, also für $k_y \neq k'_y$ oder $k_z \neq k'_z$. Wie aus der mathematischen Physik bekannt, reduziert der Impuls-Operator die nichtverschwindenden Übergänge zusätzlich auf $n_l = n'_l \pm 1$.

Erlaubt sind also — in erster Ordnung — lediglich senkrechte Übergänge zwischen benachbarten Landau-Niveaus.

Für $\boldsymbol{\epsilon} \parallel \mathbf{B}$ ist das Integral (bei senkrechten Übergängen) gleich $\hbar k_z$, allerdings ist dieser Übergang experimentell nicht beobachtbar, da er zwischen Zuständen gleicher Energie erfolgt.

Insgesamt ergeben sich folgende Auswahlregeln in erster Ordnung [103] ($n_l \leq n'_l$):

$$\left\langle n, n_l, k_y, k_z \mid \boldsymbol{\Pi} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \mid n, n'_l, k'_y, k'_z \right\rangle = \delta_{k_z, k'_z} \delta_{k_y, k'_y} \begin{pmatrix} -1\sqrt{\hbar e B} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{n_l+1}{2}} \delta_{n_l, n'_l+1} \\ i\sqrt{\hbar e B} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{n_l+1}{2}} \delta_{n_l, n'_l+1} \\ \hbar k_z \delta_{n_l, n'_l} \end{pmatrix} \cdot \boldsymbol{\epsilon}.$$

Setzt man hierin den Polarisationsvektor $\boldsymbol{\epsilon}_{\pm} = (1/\sqrt{2}, \pm i/\sqrt{2}, 0)^T$ für links- (+) bzw. rechtszirkular (−) polarisiertes Licht ein und bildet man das Betragsquadrat, folgt:

$$\left| \left\langle n, n_l, k_y, k_z \mid \boldsymbol{\Pi} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\pm} \mid n, n'_l, k'_y, k'_z \right\rangle \right|^2 = \delta_{k_z, k'_z} \delta_{k_y, k'_y} \hbar e B \frac{1}{\pi} \frac{n_l + 1}{2} \delta_{n_l, n'_l+1} \left(\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right). \quad (11.21)$$

Linkszirkular polarisiertes Licht wird also absorbiert, während rechtszirkular polarisiertes Licht in erster Ordnung transmittiert wird.

Intraband in höherer Ordnung

Neben den Übergängen erster Ordnung werden zahlreiche — meist schwächere — Übergänge höherer Ordnung beobachtet. Sie haben ihre Ursache in der Nichtparabolizität und der Asphärizität der Bänder. So ist z.B. bei in [001]-Richtung orientiertem Magnetfeld aufgrund der Asphärizität der $\Delta l = 3$ Übergang in zweiter Ordnung möglich [102].

11.5.2. Vergleich mit den numerischen Ergebnissen

Tabelle 11.1 vergleicht die Eigenenergien aus der Enveloppen-Theorie der untersten Landau-Level am Γ -Punkt von GaAs

$$E_{n_l, s}(B) = E_{\Gamma} + \hbar \omega_c \left(n_l + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar k_z^2}{2m_{\Gamma}^*} + \frac{1}{2} s g_{\Gamma}^* \mu_B B \quad (11.22)$$

$B = 20 \text{ T}$	Landau-Level	$n_l=0$	$n_l=1$	$n_l=2$
Enveloppen	$s = \uparrow$	1,5363 eV	1,571 eV	1,605 eV
	$s = \downarrow$	1,5364 eV	1,571 eV	1,605 eV
Tight-Binding	$s = \uparrow$	1,5360 eV	1,569 eV	1,601 eV
	$s = \downarrow$	1,5360 eV	1,569 eV	1,600 eV
Differenz	(gemittelt)	0,0003 eV	0,002 eV	0,005 eV

Tabelle 11.1: Eigenenergien der ersten drei Landau-Level am Γ -Punkt von GaAs bei 20 T nach dem Enveloppen-Modell Gl. (11.22) und dem $sp^3d^5s^*$ -TB Modell. Für das Enveloppen-Modell wurden die Parameter $E_\Gamma = 1,519 \text{ eV}$, $m_\Gamma^* = 0,067 m$ und $g_\Gamma^* = -0,063$ eingesetzt. Der letzte Wert ist der Nullfeldlimites im verwendeten TB-Modell (vgl. Abschnitt 11.6).

mit den numerischen TB-Ergebnissen für 20 T. Das Tight-Binding Modell liefert bei 20 T die umgekehrte Spinaufspaltung wie das Enveloppen-Modell. Die Ursache hierfür ist bei dem kleinen, negativen effektiven g -Faktor am Γ -Punkt zu suchen, welcher mit dem Magnetfeld rapide anwächst und bei 20 T schon das Vorzeichen gewechselt hat. Die Abweichungen zwischen dem Enveloppen- und TB-Modell sind vergleichsweise gering. Für höhere Landau-Level nimmt der Fehler hauptsächlich durch die (experimentell verifizierte) erhöhte effektive Masse zu.

Um die Übergangsmatrixelemente der Tight-Binding- und der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie miteinander vergleichen zu können, müssen diese auf das Volumen der magnetischen Einheitszelle normiert werden⁸. Zudem ist über alle entarteten Bänder der Landau-Level n_l und n'_l zu summieren:

$$I \propto \frac{1}{V_0} \sum_{i,j} |\langle n, n_{l,i} | \mathbf{\Pi} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_\pm | n, n'_{l,j} \rangle|^2$$

Im Enveloppen-Modell kann die Summation natürlich entfallen. Abb. 11.3 vergleicht die resultierenden Γ -Punkt Intensitäten von $0^\pm \rightarrow n'_l{}^\pm$ der Enveloppen-Theorie erster Ordnung mit der Tight-Binding Rechnung. Das Plus- bzw. Minus-Zeichen gibt die Spinpolarisation des entsprechenden Landau-Levels an. Die beiden „erlaubten“ Übergänge $0^\pm \rightarrow 1^\pm$ besitzen erwartungsgemäß auch die mit Abstand höchsten Übergangswahrscheinlichkeiten. Um viele Größenordnungen schwächer erkennt man die Übergänge $0^\pm \rightarrow 3^\pm$, welche für [001]-Richtung in höherer Ordnung erlaubt sind. Mehrfach „verbotene“ Übergänge wie $0^+ \rightarrow 2^+$ fallen bereits aus dem dargestellten Bereich heraus. Man beachte, dass — in Übereinstim-

⁸Im Enveloppen-Modell ist V_0 natürlich gleich dem Volumen der feldfreien Einheitszelle

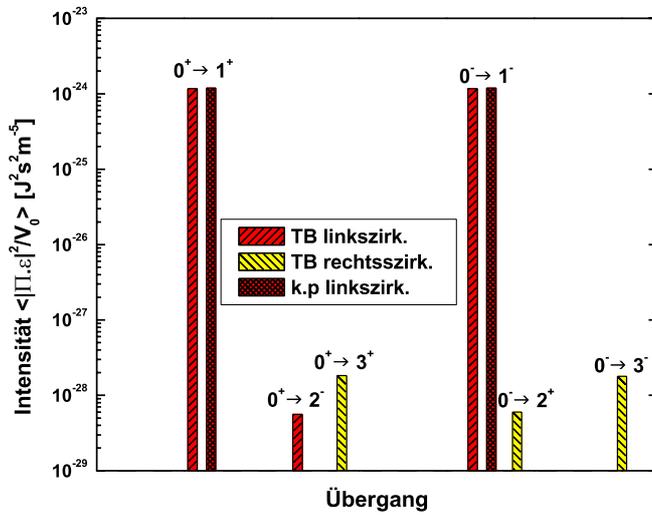


Abbildung 11.3: Intensität der Übergänge (elektrischer Dipolübergang) vom untersten $n_l = 0$ auf die ersten vier Landau-Level in Tight-Binding (Leitungsband GaAs, $B = 20$ T in [001]) und Enveloppen-Theorie. Das $+/-$ Zeichen oberhalb des Landau-Levels gibt die Spinpolarisation in z -Richtung an.

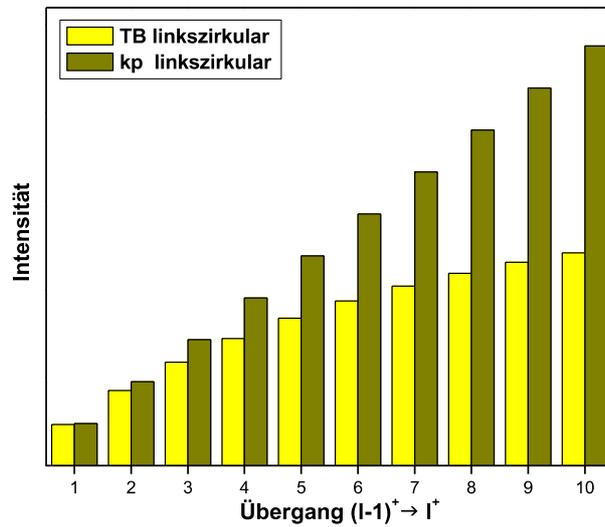


Abbildung 11.4: Intensität der Zyklotronresonanz-Übergänge von einem Landau-Level in den nächst höheren gleicher Spinpolarisierung in der Tight-Binding- und Enveloppen-Theorie. Für die Tight-Binding Rechnung wurde wieder GaAs mit einem in [001]-Richtung orientierten Magnetfeld von 20 T gewählt.

mung mit der Enveloppen-Theorie — alle rechtszirkularen Übergänge deutlich unterdrückt sind. Für höhere Magnetfelder verlieren die Auswahlregeln zunehmend an Bedeutung.

Um die Stärke der erlaubten ϵ_+ -Übergänge zwischen benachbarten Landau-Niveaus beider Theorien zu vergleichen, wurden diese in Abb. 11.4 gegenübergestellt. Während die Intensitäten entsprechend Gl. (11.21) mit $n_l + 1$ zunehmen, flacht der anfangs gleichstarke Anstieg im Tight-Binding Modell ab. Entsprechend weichen beide Modelle für höhere Zyklotronresonanzen verstärkt voneinander ab.

Für höhere Landau-Level verliert die im Enveloppen-Modell vorgenommene Einbandnäherung ihre Gültigkeit.

11.6. Effektiver g -Faktor in Tight-Binding

Als weiteren Test des Hamilton-Operators mit Peierls-Phase soll der korrekte Übergang der Substitutionen in Gl. (7.15a,7.15b) in den Niederfeldlimes anhand des effektiven g -Faktors diskutiert werden. Da das empirische Tight-Binding Modell nicht exakt den experimentellen Wert liefert, sondern mit Artefakten behaftet ist, gilt es, die numerisch gewonnenen Resultate mit einem innerhalb des Modells exakten analytischen $B \rightarrow 0$ Limes zu vergleichen. Im Folgenden wird der effektive g -Faktor im Limes $B \rightarrow 0$ analytisch abgeleitet. Ausgangspunkt ist dabei der *feldfreie* Hamilton-Operator. Entsprechend kennzeichnen n und \mathbf{k} den Bandindex bzw. den Wellenvektor des feldfreien Kristalls.

Ausgehend von der Potenzreihen-Darstellung des Tight-Binding Hamilton-Operators in \mathbf{k} um \mathbf{k}_0 [79]

$$\begin{aligned} H_{n,n'}(\mathbf{k}) &\approx E_n(\mathbf{k}_0) \delta_{n,n'} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{p}_{n,n'}(\mathbf{k}_0) \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \\ &+ \frac{\hbar}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbb{T}_{n,n'}(\mathbf{k}_0) \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \\ &+ \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{m \neq n,n'} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \frac{\mathbf{p}_{n,m}(\mathbf{k}_0) \mathbf{p}_{m,n'}(\mathbf{k}_0)}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \end{aligned} \quad (11.23)$$

mit den Definitionen der „senkrechten“ Impuls- und \mathbb{T} -Matrixelemente

$$\mathbf{p}_{n,n'}(\mathbf{k}_0) = \frac{m}{\hbar} \mathbf{C}^\dagger(n\mathbf{k}_0) \cdot \left. \frac{\partial H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \cdot \mathbf{C}(n'\mathbf{k}_0), \quad (11.24)$$

$$\mathbb{T}_{n,n'}(\mathbf{k}_0) = \frac{\hbar^2}{m^2} \mathbf{C}^\dagger(n\mathbf{k}_0) \cdot \left. \frac{\partial^2 H(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k} \partial \mathbf{k}} \right|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \cdot \mathbf{C}(n'\mathbf{k}_0), \quad (11.25)$$

die denen von Gl. (10.18) bzw. von Gl. (10.19) im feldfreien und senkrechten ($\mathbf{q} \rightarrow 0$) Grenzfall entsprechen, erhält man eine zur $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie analoge Darstellung des Hamilton-Operators um einen extremalen Punkt \mathbf{k}_0 . Die Ableitung des effektiven g -Faktors kann, ausgehend von Gl. (11.23), in einer ganz analogen Weise wie in der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie erfolgen [79, 104]. Hierbei wird in Gl. (11.23)

eine Peierls-Substitution vorgenommen, d.h. der Wellenzahl-Vektor \mathbf{k} durch den kanonischen Operator im Magnetfeld ersetzt:

$$\mathbf{k} \rightarrow \hat{\mathbf{k}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{\hbar} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (11.26)$$

Offensichtlich ist $\hat{\mathbf{k}}$ ein Vektor-Operator, dessen Komponenten nicht miteinander kommutieren. Für das weitere Vorgehen ist es vorteilhaft, $\hat{\mathbf{k}}$ in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Anteil zu zerlegen:

$$\hat{k}_i \hat{k}_j = \frac{1}{2} \{ \hat{k}_i, \hat{k}_j \} + \frac{1}{2} [\hat{k}_i, \hat{k}_j] = \frac{\hat{k}_i \hat{k}_j + \hat{k}_j \hat{k}_i}{2} - \frac{ie}{2\hbar} \sum_k \epsilon_{ijk} B_k, \quad (11.27)$$

oder allgemeiner:

$$\left(\hat{\mathbf{k}} - \mathbf{k}_0 \right)_i \left(\hat{\mathbf{k}} - \mathbf{k}_0 \right)_j = \frac{\hat{k}_i \hat{k}_j + \hat{k}_j \hat{k}_i}{2} - \frac{ie}{2\hbar} \sum_k \epsilon_{ijk} B_k - \hat{k}_i k_{0j} - \hat{k}_j k_{0i} + k_{0i} k_{0j}. \quad (11.28)$$

Während der symmetrische Anteil die effektive Masse mitbestimmt und damit über die Landau-Energien $\hbar\omega_c$ einen *spinunabhängigen* Anteil zu den Eigenenergien im Magnetfeld liefert, führt der antisymmetrische Anteil zu einer Korrektur des elektronischen g -Faktors $g^0 = 2 \left(1 + \frac{\alpha}{2\pi} + \dots \right)$. Letzterer sorgt allein für die Spinaufspaltung im Magnetfeld. Setzt man Gl. (11.27) in Gl. (11.23) ein und vernachlässigt man alle linearen Anteile in \mathbf{k} , erhält man für den antisymmetrischen Teil des Hamilton-Operators:

$$\begin{aligned} H_{n,n'}^{(as)}(\mathbf{k}_0) &= -\frac{ie\hbar}{2m^2} \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} B_k \left(\frac{m}{2\hbar} \mathbb{T}_{nn',ij}(\mathbf{k}_0) + \sum_{m \neq n,n'} \frac{p_{i,n,m}(\mathbf{k}_0) p_{j,m,n'}(\mathbf{k}_0)}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)} \right) \\ &= -i \frac{\mu_B}{m} \sum_{ijk, m \neq n,n'} \frac{p_{i,n,m}(\mathbf{k}_0) p_{j,m,n'}(\mathbf{k}_0)}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)} \epsilon_{ijk} B_k. \end{aligned} \quad (11.29)$$

Im letzten Schritt wurde u.a. von $\mathbb{T}_{ij} = \mathbb{T}_{ji}$ Gebrauch gemacht. Für den effektiven g -Faktor ergibt sich also:

$$H_{n,n'}^{(Zem.)}(\mathbf{k}_0) = \frac{1}{2} \mu_B \mathbf{g}_{n,n'}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{B} \quad (11.30)$$

$$\mathbf{g}_{n,n'}^{\text{eff}} = g^0 \boldsymbol{\sigma}_{n,n'}(\mathbf{k}_0) - i \frac{2}{m} \sum_{m \neq n,n'} \frac{\mathbf{p}_{n,m}(\mathbf{k}_0) \times \mathbf{p}_{m,n'}(\mathbf{k}_0)}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_m(\mathbf{k}_0)} \quad (11.31)$$

Kristall	Symmetrie- punkt	Experiment	TB-Modell $sp^3d^5s^*$	TB-Modell sp^3s^*
GaAs	Γ_{6c}	-0,447 [105]	-0,063	0,80
	X_{6c}	-	1,89	2,0
	L_{6c}	-	1,74	1,93
InSb	Γ_{6c}	-50,9 [106]	-57	-26,6
	X_{6c}	-	1,31	2,0
	L_{6c}	-	0,91	1,7

Tabelle 11.2: Experimentelle sowie zwei theoretische (sp^3s^* -TB Modell [76] und $sp^3d^5s^*$ -TB Modell [7]) effektive Lande- g -Faktoren am Γ -, L - und X -Punkt des Leitungsbandes von GaAs und InSb.

Der antisymmetrische Beitrag zum Hamilton-Operator Gl. (11.30) ist also gerade die (effektive) Zeeman-Aufspaltung des Spins im Magnetfeld. Interpretiert man \mathbf{p} als Impulsmatrixelement, stimmt Gl. (11.31) mit dem Ergebnis in der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie überein. Tabelle 11.2 vergleicht den Wert von Gl. (11.31) für verschiedene Tight-Binding Parametersätze mit experimentellen Daten.

Im Falle von InSb wurde die Spinaufspaltung des untersten Landau-Niveaus des Leitungsbandes numerisch (Peierls-Phase) bei 5 T im sp^3s^* -Modell von Priester *et al.* [76] bestimmt. Sie stimmt bis auf einige Prozent mit dem analytischen $B \rightarrow 0$ Resultat von Gl. (11.31) überein. Somit liefert das durch die Peierls-Phase erweiterte Tight-Binding Modell auch hier in sich konsistente Resultate.

KAPITEL 12

ANWENDUNG: ELEKTRONISCHE STRUKTUR VON HALBLEITERN

Nachdem in den vorangegangenen Kapiteln die Inkorporation magnetischer Felder in den Tight-Binding Formalismus abgeleitet sowie die Implementierung der gewonnenen Gleichungen am Beispiel von Zinkblende-Strukturen diskutiert wurde, soll in diesem und darauffolgenden Kapitel die Theorie auf mehrere Modellsysteme angewandt werden. Der Zugang erfolgt jeweils über die Magnetobandstruktur, welche zusammen mit der Charakterisierung der einzelnen Zustände bereits sehr viel über die zu erwartende Effekte aussagt. Exemplarisch für eine ganze Klasse von Volumen-Halbleitern sollen GaAs und GaSb eingehender behandelt werden. Für GaAs wird im Weiteren die dielektrische Funktion berechnet, welche über die Absorption auch den Vergleich mit experimentellen Daten ermöglicht.

12.1. Magnetobandstruktur von GaAs

Aufgrund seiner weiten Verbreitung und der zahlreichen Untersuchungen wird die Magnetobandstruktur des GaAs-Kristalls ausführlich diskutiert. Insbesondere wird auf das Leitungs- und Valenzband eingegangen sowie der Einfluss der Magnetfeldrichtung untersucht. Die dabei erzielten Ergebnisse weichen stark von früheren Vorhersagen [87] ab, was auf Artefakte des damals verwendeten Modells zurückgeführt werden kann. Über Absorptionsmessungen wird die Zuverlässigkeit der Theorie überprüft. Zuletzt wird der effektive g -Faktor als Funktion des Feldes untersucht.

12.1.1. Das Leitungsband

Konstruiert man wie in Abschnitt 11.1 beschrieben die magnetische Einheitszelle für ein parallel zur [001]-Kristallachse anliegendes Magnetfeld und verwendet man die Eichinvarianz (vgl. Abschnitt 8.3), erhält man eine parallel zur z -Achse liegende längliche Brillouin-Zone. Da die Bewegung der Elektronen in z -Richtung nicht durch das Magnetfeld beeinflusst wird, erwartet man weiterhin eine Dispersion der Bänder in diese Richtung, während orthogonal dazu aufgrund von Lokalisierungseffekten die Bänder flach sind. Abb. 12.1 zeigt die ersten Leitungsband-Zustände von GaAs bei 431 T als Funktion von k_z . Wie aus dem Modell der effektiven Masse zu erwarten ist, bilden die näherungsweise parabelförmigen Leitungsbandminimas am Γ -, X - und L -Punkt im Magnetfeld jeweils eigene Landau-Leitern aus. So sind in Abb. 12.1 die ersten beiden Sprossen der vom L -Punkt stammenden Landau-Leiter ebenso zu sehen, wie die vom Γ -Tal. Bei den X -Punkten sind zwei Fälle zu unterscheiden: Die beiden in [001]-Richtung liegenden Minima — im Folgenden mit X_{\parallel} bezeichnet — werden durch die Wahl der Einheitszelle auf den Γ -Punkt gefaltet. Da ihre schwere, longitudinale Masse parallel zur z -Achse liegt, ist die Dispersion in k_z -Richtung gering. In den verbleibenden vier X -Punkten (X_{\perp}) hingegen liegt die leichte, transversale Masse in z -Richtung. Folglich ist die Krümmung der Parabeln größer. Durch die zahlreichen am Γ -Punkt übereinanderliegenden Landau-Leitern, wird das Spektrum für höhere Energien schnell unübersichtlich

Trägt man wie in Abb. 12.2 die Energien der Leitungsbandminima am Γ - und Z -Punkt gegen das Magnetfeld auf, ergibt sich der Übergang von der Niederfeld- zur Hochfeldmagnetobandstruktur: Jedes Bandextremum bildet eigene Landau-Fächer aus. In Abb. 12.2 erkennt man die von den Γ -, L - und X -Tälern des Volumen-Materials ausgehenden Landau-Fächer. Ist das Leitungsbandminimum isotrop (Γ) oder die effektive Zyklotronmasse für alle Täler aus Symmetriegründen äquivalent, erhält man für jede Spinorientierung genau eine Landau-Leiter. Letzteres trifft bei [001]-Feldrichtung z.B. auf das L -Tal zu: Trotz unterschiedlicher Orientierungen sind die Zyklotronmassen aller L -Täler gleich. Die Zyklotronmasse berechnet sich dabei aus den drei Hauptachsen-Massen des Ellipsoids m_1, m_2, m_3 durch die Beziehung

$$m_c^* = \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{h_1^2 m_1 + h_2^2 m_2 + h_3^2 m_3}}, \quad (12.1)$$

wobei h_i der Richtungskosinus des Magnetfeldes mit der i -ten Hauptachse ist.

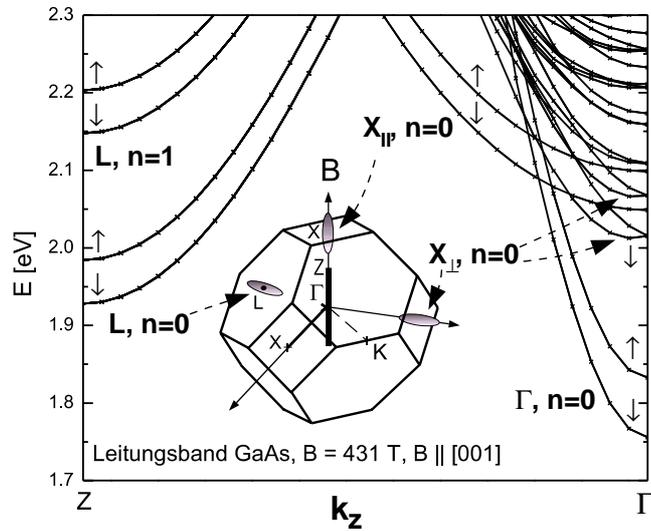


Abbildung 12.1: Spektrum des Leitungsbandes von GaAs bei einem in [001] orientierten Feld von 431 T als Funktion von k_z . Die eingebettete Grafik zeigt die ursprüngliche fcc-BZ sowie die nadelförmige magnetische Brillouin-Zone.

Im Allgemeinen hebt das Magnetfeld die Entartung der Hochsymmetriepunkte auf. So haben die $X_{||}$ und X_{\perp} -Täler unterschiedliche Zyklotronmassen und daher eigene Landau-Fächer, welche in Abb. 12.2 mit X_a und X_b gekennzeichnet sind.

Aufgrund der Nichtparabolizität der Extrema wachsen bei höheren Feldstärken die Landau-Energien nicht mehr linear mit B an. Am deutlichsten erkennt man diese Abweichung von der Landau-Theorie bei den $n = 0$ Landau-Niveaus des Γ -Tals in Abb. 12.2. Die Abweichung hängt von der Form der Nichtparabolizität und damit von der Qualität des verwendeten Bandstruktur-Modells ab.

Die Anfangssteigung der Landau-Fächer wird von der Zyklotronmasse festgelegt. Hier bestimmt schon bei kleinen Feldern die Qualität der Bandstruktur signifikant das Spektrum. Frühere Rechnungen [87] basierend auf einem sp^3s^* -Tight-Binding Modell *ohne Spin* ergaben, dass bei 647 T das L/Z -Tal *unter* dem Γ -Tal liegen sollte, was aber nach Abb. 12.2 bei dem in dieser Arbeit verwendeten Modell nicht der Fall ist. Prinzipiell ist aber eine Annäherung der Minima zu erwarten, da die kleine effektive Masse am Γ -Tal von GaAs mit $m_{c,\Gamma}^* \approx 0,067 m_0$ zu einer weitaus größeren Nullpunkts-Energie

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_c = \frac{\hbar e B}{2m_c^*}$$

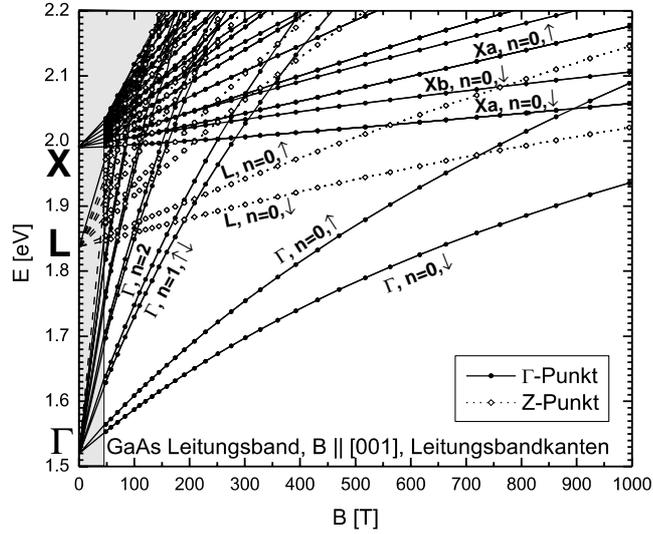


Abbildung 12.2: GaAs Energie der Leitungsbandkanten (Γ - und Z-Punkt) von GaAs als Funktion des in $[001]$ -Richtung orientierten Magnetfeldes. Die Bezeichnungen der Landau-Niveaus geben den zugehörigen Symmetriepunkt, die Quantenzahl des Landau-Niveaus und die (dominante) Spinorientierung an. Der schraffierte Bereich wurde nicht berechnet.

führen sollte als die rund doppelt so große Zyklotronmasse $m_{c,L,[001]}^* \approx 0,1257m_0$ vom L -Tal. Tabelle 12.1 vergleicht die Hauptachsen-Massen in Einheiten von m_0 an den GaAs-Hochsymmetriepunkten dieser Arbeit mit denen in Ref. [87] und mit experimentellen Daten. Zudem ist der energetische Abstand der Leitungsband-Täler angegeben.

Anhand dieser Daten lassen sich die unterschiedlichen Vorhersagen erklären: Zum einen ist die energetische Separation zwischen Γ - und L -Tal im Modell von Priester *et al.* [76] mehr als einen Faktor zwei zu klein. Zum anderen liegt die L -Punkt-Zyklotronmasse $m_{c,L,[001]}^*$ einen Faktor 7,6 über dem experimentellen Wert. Beide Artefakte verringern den $L-\Gamma$ Tal-Abstand bei endlichem Feld. Noch gravierender sind die Abweichungen im X -Tal. Der hier verwendete Parametersatz [7] weicht zwar auch teilweise von den Messungen ab. Man muss jedoch bedenken, dass auch die experimentellen Angaben der X - und L -Tal Massen mit erheblichen Unsicherheiten behaftet sind.

Symmetrie-Punkt	Wert	Experiment	TB Modell $sp^3d^5s^*$	TB Modell sp^3s^*
Γ	m^*	0,067	0,067	0,130
L	m_t^*	0,0754	0,117	0,766
	m_l^*	1,9	1,44	1,72
	$m_{c,L,[001]}^*$	0,1257	0,188	0,96
X	m_t^*	0,23	0,237	38670
	m_l^*	1,3	1,25	2,3
	$m_{c,X,[001]}^*$	(0,23;0,547)	(0,237;0,544)	(38670;298)
Energie-Aufspaltung		Experiment	TB Modell $sp^3d^5s^*$	TB Modell sp^3s^*
$E_L - E_\Gamma$		0,331 eV	0,318 eV	0,141 eV
$E_X - E_\Gamma$		0,461 eV	0,470 eV	0,480 eV

Tabelle 12.1: Longitudinale und transversale effektive Massen am Γ -, L - und X -Punkt, sowie die Zyklotronmasse für ein in $[001]$ -Richtung anliegendes Magnetfeld aus Experimenten, einem sp^3s^* -TB Modell [76] und einem $sp^3d^5s^*$ -TB Modell [7]. Die letzten beiden Zeilen geben die energetische Separation der Leitungsbandtaler im Experiment sowie im jeweiligen Modell an.

12.1.2. Das Valenzband

Wesentlich komplexer als das Leitungsband erweist sich das Valenzband von GaAs. Die Abbn. 12.3 und 12.4 zeigen die Eigenenergien als Funktion von k_z bzw. B . Die einzelnen Landau Facher sind stark verzerrt und weisen zahlreiche uberkreuzungen auf, die durch das starke Mischen von leichten und schweren Lochzustanden und Nichtparabolizitatseffekten entstehen. Die Pseudopotenzialrechnungen von Tan *et al.* [107] bis 40 T zeigen ein sehr ahnliches Verhalten und zudem eine sehr diffizile Durchmischung von schweren und leichten Lochzustanden. Die Zuordnung der einzelnen Bander zu den entsprechenden Landau-Niveaus im effektiven Massen Bild ist extrem schwierig. Die Ursache hierfur ist die schon bei relativ kleinen Feldern starke Koppelung der vier, bei $\mathbf{k} = 0$ und $B = 0$ entarteten, Lochzustande.

12.1.3. Einfluss der Magnetfeldrichtung

Wegen der Anisotropie der Bandminima sind auch die Eigenenergien eine Funktion der Feldrichtung. Diese wurden im Γ - und Z -Punkt des GaAs-Leitungsbandes fur die Feldrichtungen $[001]$, $[011]$ und $[111]$ berechnet und in Abb. 12.5 dargestellt.

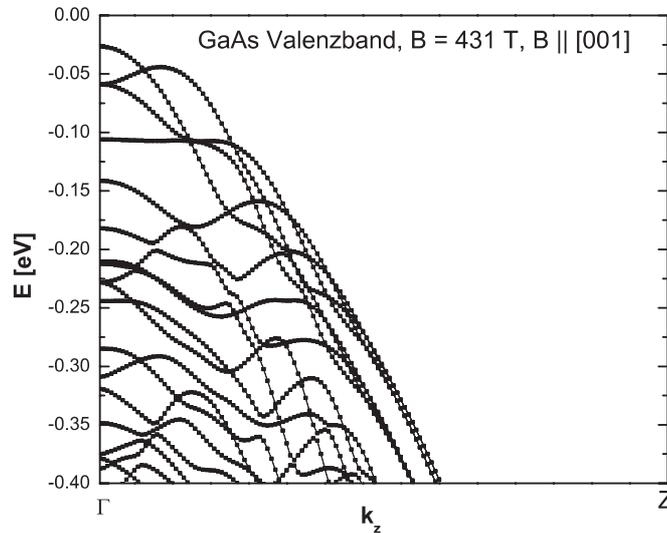


Abbildung 12.3: Die Eigenenergien des oberen Valenzbandes von GaAs bei 431 T als Funktion von k_z . Das Magnetfeld ist parallel zur [001]-Kristallachse ausgerichtet.

Wie in Abb. 12.2 wird die Leitungsbandstruktur von den Landau-Fächern der drei Minimas dominiert. Obwohl die Bandstruktur im Γ -Punkt aufgrund der kubischen Kristall-Symmetrie isotrop ist, sind oberhalb von etwa 300 T auch die vom Γ -Tal ausgehenden Landau-Niveaus von der Feldrichtung abhängig. Dies lässt sich durch die zunehmende Kontraktion der Wellenfunktion im Ortsraum und der damit einhergehenden Verbreiterung der Zustände im k -Raum verstehen. Bei hohen Feldern enthalten Γ -Punkt Zustände im Feld verstärkt Komponenten, die weit vom Γ -Punkt der feldfreien BZ entfernt liegen. Erwähnenswert ist zudem, dass GaAs für alle Feldrichtungen direkt bleibt. Selbst für die [011]-Feldrichtung, bei der die Zyklotronmasse des L -Tals maximal wird, kommen sich die entsprechenden Landau-Niveaus nahe und hybridisieren, aber überkreuzten sich nicht. Diese Hybridisierung oberhalb von etwa 1000 T führt zur Auflösung der ursprünglichen Bandstruktur und bildet für höhere Felder ein fraktales Energiespektrum aus, das in Kapitel 13 eingehend diskutiert wird.

12.1.4. Effektive Masse

Zyklotronresonanz-Experimente erlauben einen direkten Vergleich der berechneten Bandstrukturen mit realen Systemen. Hierfür wird eine dünne, schwach do-

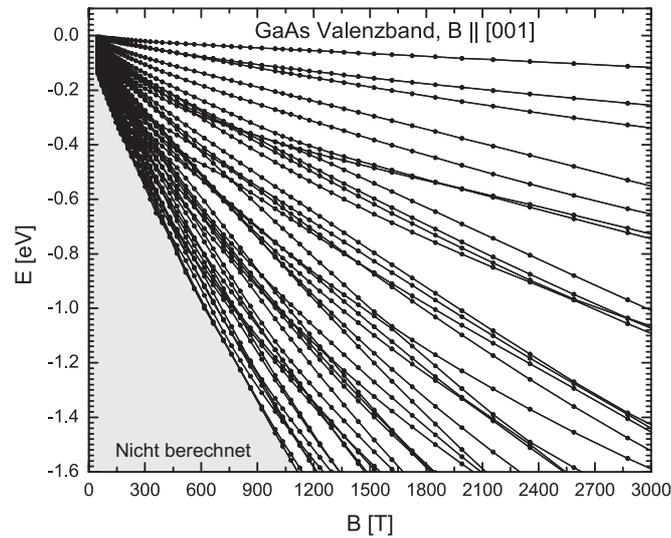


Abbildung 12.4: Eigenenergien des GaAs Valenzbandes am Γ -Punkt als Funktion des in $[001]$ -Richtung orientierten Magnetfeldes B im $sp^3d^5s^*$ Tight-Binding Modell. Der grau schattierte Bereich wurde nicht berechnet.

tierte Probe in ein homogenes Magnetfeld gebracht. Trägt man die Transmission eines auf die Probe gerichteten Laser-Pulses gegen das Magnetfeld auf, so deuten Transmissionsminima auf Übergänge zwischen benachbarten Landau-Niveaus hin. Im effektiven Massen-Modell steigt der Abstand der Niveaus linear mit dem Feld an:

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega_c = \frac{\hbar e B}{2m_c^*}$$

In Erweiterung dieses Modells kann die Abweichung aufgrund der Nichtparabolizität formal in eine feldabhängige effektive Zyklotronmasse $m_c^*(B)$ absorbiert werden. Die experimentellen und theoretischen effektiven Zyklotronmassen der ersten Zyklotronresonanz ($n = 0 \rightarrow n = 1$) sind in Abb. 12.6 für beide Spinorientierungen und für die Feldrichtungen $[001]$ und $[011]$ dargestellt. Sowohl die Theorie als auch das Experiment liefern einen annähernd linearen Anstieg von m_c^* mit B , was gleichbedeutend mit einer sublinearen Aufspaltung ist. Dieser Effekt ist in $[011]$ -Richtung stärker ausgeprägt als in der $[001]$ -Richtung. Die systematische Abweichung unterhalb von rund 150 T stammt von der in dem Modell vernachlässigten Polaronresonanz.

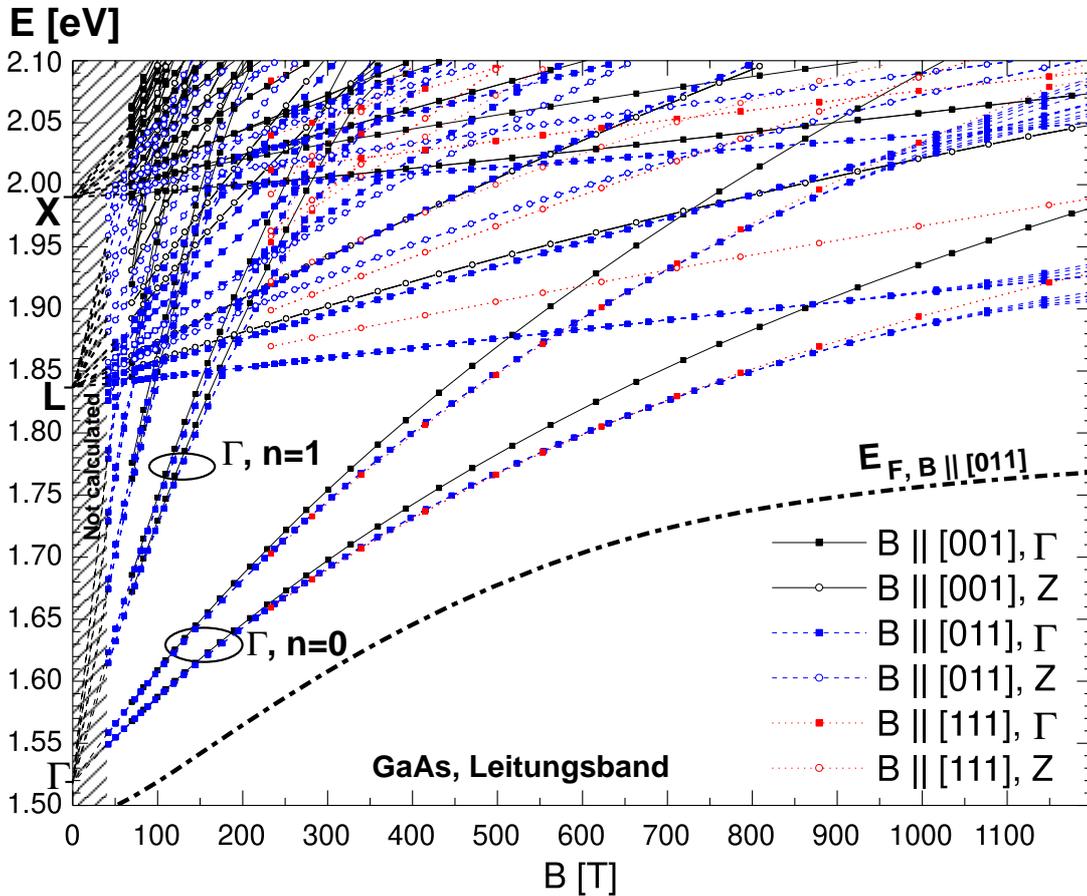


Abbildung 12.5: Energetische Lage der Leitungsbandminima am Γ - und Z -Punkt als Funktion des Magnetfeldes B . Das Feld wurde parallel zur $[001]$ - (durchgehende Linien), $[011]$ - (gestrichelt) und $[111]$ -Kristallrichtung (gepunktet) angelegt. Für die Feldrichtung $[011]$ ist zusätzlich das Fermi-niveau (dicke gestrichelte Kurve) bei 300 K und einer Ladungsträgerdichte von $n_e = 1,5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ eingezeichnet.

12.1.5. Absorptionsspektren

Die optische Absorption α aus Gl. (10.36) ermöglicht einen akkuraten Vergleich von Theorie und Experiment. Die Absorption wird von dem Imaginärteil des Brechungsindex n bestimmt, der wiederum über die Gln. (10.36, 10.35, 10.34, 11.8) allein aus der die Suszeptibilität χ berechnet werden kann. Berechnet man aber den komplexen Brechungsindex mittels der in Kapitel 11 vorgestellten Methode,

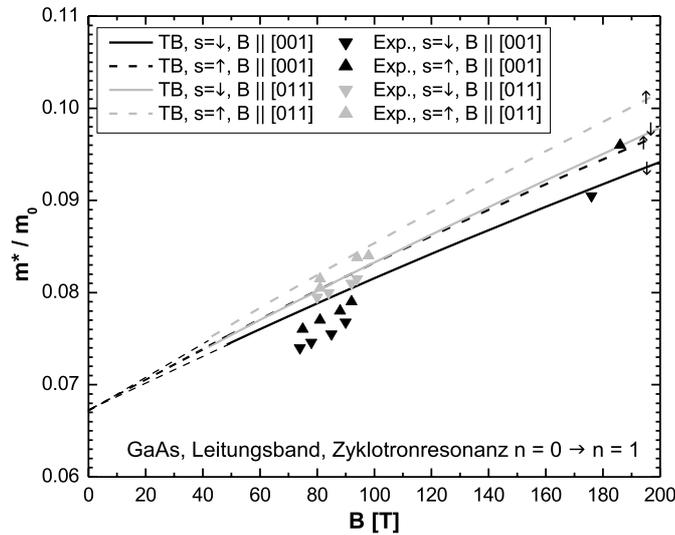


Abbildung 12.6: Berechnete Zyklotronresonanzübergänge vom ersten in das zweite Landau-Niveau im GaAs Leitungsband für in [001]- und [011]-Richtung orientiertes Magnetfeld (schwarz bzw. grau). Gestrichelte (durchgezogene) Linien sind die berechneten Resonanzmassen für den Spin hinauf (hinunter) auf Spin hinauf (hinunter) Übergang. Die entsprechenden Experimente sind mit Dreiecken, deren Spitze die Spinausrichtung angibt, eingetragen [75]. Bei Feldern unterhalb von ca. 150 T treten Abweichungen aufgrund der in der Rechnung nicht berücksichtigten Polaronresonanz auf.

wird n_r aufgrund der fehlenden Gitterbeiträge massiv unterschätzt. Da dieser Beitrag im untersuchten Energiebereich nahezu konstant ist, wurde zu ε eine feste Korrektur addiert, so dass sich der experimentelle Nullfeldlimes $\varepsilon(\omega \rightarrow 0) \approx 13,1$ ergibt. Zur numerischen Bestimmung von χ wurde für jedes B eine k -Raum Integration mit 32 Stützpunkten entlang der $Z - \Gamma - Z$ -Symmetrie-Linie durchgeführt.

Die Absorption von linkszirkular polarisiertem Licht in Faraday Konfiguration als Funktion des Magnetfeldes und der Photonenenergie ist in Abb. 12.7 mit logarithmischer Skala für α dargestellt. Die feldabhängige Fermi-Energie wurde für eine Ladungsträgerdichte von $n_e = 1,5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ und einer Temperatur von 300 K berechnet. Die im Energieraum relativ breit verschmierte, starke Absorption unterhalb von ca. 200 T stammt von der ersten Zyklotronresonanz. Bei höheren Feldern und kleinerer Photonenenergie tritt zunehmend die Spin-Flip Resonanz *innerhalb* des untersten Landau-Niveaus auf (vgl. Abb. 12.5). Deutlich schwächer erkennt man oberhalb von rund 800 T und bei kleinen Photonenener-

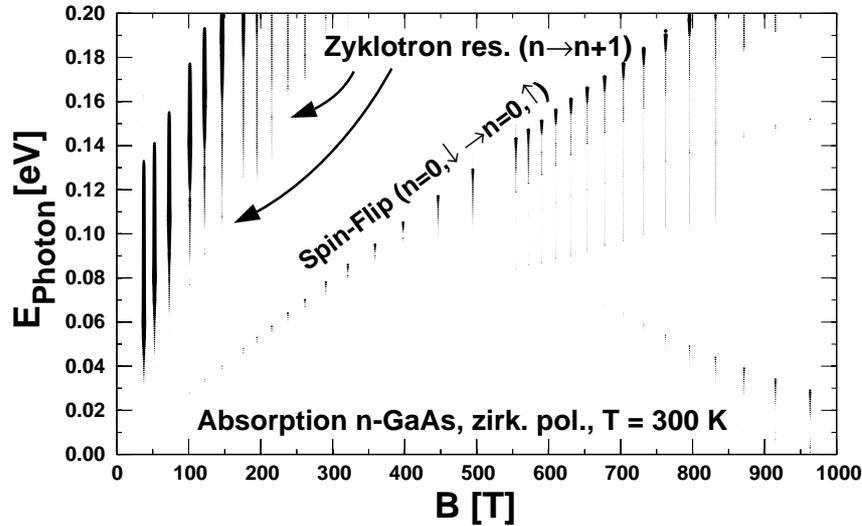


Abbildung 12.7: Absorption linkszirkular polarisierten Lichts von n -dotierten GaAs ($n_e = 1,5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) bei 300 K in Faraday Konfiguration. Das Magnetfeld wurde entlang der [011]-Achse orientiert. Die Größe der Punkte ist proportional zum Logarithmus der Absorption $\ln(\alpha/\alpha_0)$.

gien die Übergänge innerhalb der vom Γ - und L -Punkt stammenden untersten Landau-Bänder. Man beachte jedoch, dass bei diesen Feldstärken die Zuordnung zu Symmetriepunkten oder Landau-Niveaus bedeutungslos wird.

Im Experiment wurde die Transmission unpolarisierten Lichts von n -GaAs für eine feste Photonenenergie als Funktion des Magnetfeldes bestimmt und auf den Nullfeldwert normiert. Für einen Vergleich mit der Theorie eignet sich die Transmission jedoch nicht, da sie die um mehrere Größenordnungen schwankende Absorption stark verzerrt wiedergibt. Daher wurde die experimentell bestimmte, normierte Transmission unpolarisierten Lichts mittels Gl. (10.39) in eine Absorption umgerechnet¹. Zu prozentual hohen Abweichungen in α kommt es hierbei, falls die normierte Transmission nahe bei eins und somit an der Auflösungsgrenze der Apparatur liegt.

Für einen möglichst realistischen Vergleich der effektiven Absorption unpolarisiertem Lichts mit dem Experiment, wurde die *Transmission* von links- und rechts-

¹Der Realteil des Brechungsindex ist im fraglichen Bereich nahezu konstant und zudem stets deutlich größer als der Imaginärteil. Durch Normierung auf die Nullfeldtransmission, fällt der durch Reflexionen verlorengene Teil näherungsweise heraus.

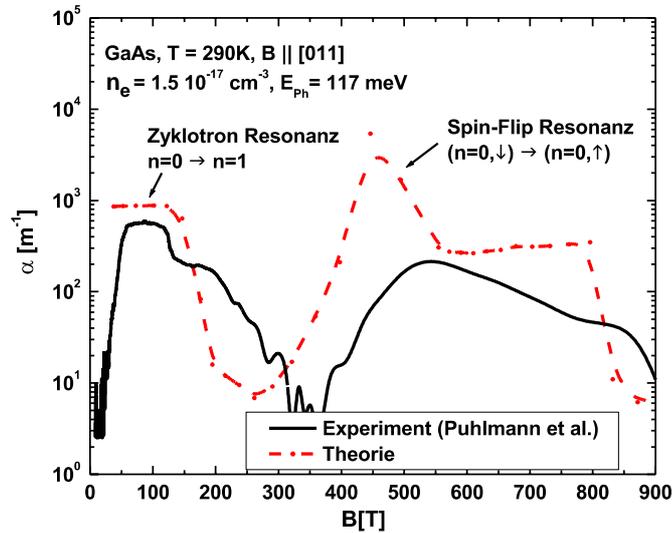


Abbildung 12.8: Absorption unpolarisierter Laser-Strahlung mit $E_{\text{Photon}} = 117 \text{ meV}$ von n-dotiertem GaAs als Funktion des in [011]-Richtung orientierten Magnetfeldes bei 290 K. Die Energie der unpolarisierten Photonen und die Ladungsträgerdichte betragen 117 meV bzw. $n_e \approx 1,5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Die Rechnung ist gestrichelt, die Messung (Puhlmann *et al.* [108].) mit einer durchgehenden Linie eingezeichnet.

zirkular polarisierten Licht gemittelt, auf den feldfreien Wert normiert und mit Gl. (10.39) in eine Absorption zurückgerechnet. Das Ergebnis für eine Photonenenergie von 117 meV ist in Abb. 12.8 gestrichelt dargestellt. Im Gegensatz zu den in der Literatur üblichen Modellen wurden hier keinerlei Anpassungen an Magnetfeld-Daten vorgenommen, sondern allein von $B = 0$ Parametern ausgegangen. Auch die Temperatur und Ladungsträgerdichte entsprechen den experimentellen Werten. Dennoch zeigt sich eine erstaunlich gute Übereinstimmung über den gesamten Feldbereich, die noch deutlich verbessert werden kann, wenn man eine etwas niedrigere Ladungsträgerdichte und eine Erhöhung der elektronischen Temperatur mit der Feldstärke annimmt. Letzteres ist zudem nicht unphysikalisch, da die hohen Felder mit mehrstufigen Implosionen erzielt wurden und daher die Induktion dem elektronischen System Energie zuführt. Die Theorie wie das Experiment liefern bei ca. 50 bis 120 T eine breite Absorption durch die Γ -Tal Zyklotronresonanz. Von 200 T bis hinauf zu etwa 400 T absorbiert die Probe nur schwach². Übereinstimmend zeigen Experiment und Theorie zwischen rund 450

²Die Oszillationen zwischen 300 und 400 T sind auf Fluktuationen in den Messdaten zurück-

und 550 T ein zweites, breites Absorptionsmaxima, das auf die schon in Abb. 12.7 erwähnte Spin-Flip-Resonanz innerhalb des ersten Landau-Niveaus zurückgeführt werden kann. Der bisher ungeklärte Ursprung des zweiten Absorptions-Maximums ist damit eindeutig erklärt.

12.1.6. Effektiver g -Faktor

Um die im Grenzfall kleiner Felder gültige Gleichung

$$E_{n,s}(B) = \hbar \frac{eB}{m_c^*} \left(n + \frac{1}{2} \right) + g^* \mu_B s B \quad (12.2)$$

für die Energie des n -ten Landau-Niveaus mit Spin s auf endliche Felder zu erweitern, ist es nicht nur notwendig, eine von Magnetfeld B und Landau-Level n abhängige effektive Masse $m_{c,n}^*(B)$ einzuführen, sondern auch einen ebensolchen g -Faktor $g_n^*(B)$ in den Nichtlinearitäten absorbiert wurden. Dieser ist durch

$$g_n^*(B) := \frac{E_{n,\uparrow}(B) - E_{n,\downarrow}(B)}{\mu_B B} \quad (12.3)$$

definiert. Im Niederfeldlimites müssen diese Größen wieder mit den Störungstheoretischen übereinstimmen:

$$g^* = \lim_{B \rightarrow 0} g_n^*(B) \quad \forall n \in \mathbb{N}_0.$$

Abb. 12.9 zeigt den numerisch aus Gl. (12.3) bestimmten effektiven g -Faktor von in [001]-Richtung orientierten GaAs. In Übereinstimmung mit Vorhersagen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Theorie [75] wächst er mit steigendem Magnetfeld sublinear an und wechselt dabei das Vorzeichen, d.h. die Spinpolarisierung der Landau-Niveaus kehrt sich um. Da g_1^* stärker mit dem Magnetfeld zunimmt als g_0^* , existiert ein Magnetfeldbereich, in dem $g_0^* < 0 < g_1^*$, also in dem die jeweils untersten Zustände der ersten beiden Landau-Niveaus unterschiedliche Spineinstellungen besitzen.

Wie aus Abb. 12.9 in der Extrapolation $B \rightarrow 0$ ersichtlich ist, beträgt der Nullfeld g -Faktor in dem verwendeten $sp^3d^5s^*$ -Modell ca. -0,07, was mit der analytisch aus dem Modell extrahierten Zahl (vgl. Abschnitt 11.6) -0,067 sehr gut übereinstimmt, aber deutlich von dem experimentellen Wert [105] von -0,447 abweicht. Diese Diskrepanz ist ein Artefakt des verwendeten Tight-Binding Parametersatzes. Das Modell ist aber in sich konsistent.

zuführen, da hier die Transmission im Rahmen der experimentellen Auflösbarkeit nahe eins lag.

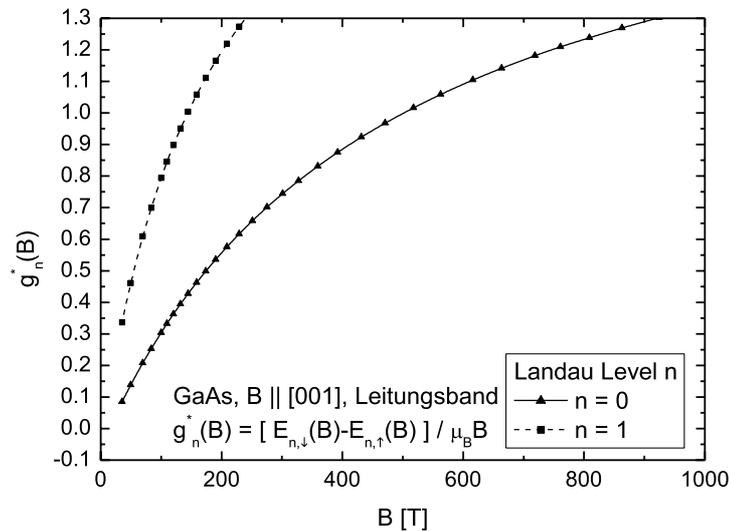


Abbildung 12.9: Effektiver Lande g -Faktor als Funktion des in [001]-Richtung orientierten Magnetfeldes für die Aufspaltung des ersten und des zweiten Landau-Niveaus. Im Limes $B \rightarrow 0$ gehen alle g_n^* — in Übereinstimmung mit dem analytischen Ergebnis aus Gl. (11.31) — gegen $-0,07$.

12.2. Elektronische Struktur von GaSb

Der zweite, eingehender diskutierte Halbleiter, GaSb, weist eine Besonderheit im Leitungsband auf: Die energetische Separation zwischen dem tiefer liegenden Γ -Tal und dem L -Tal beträgt lediglich 86 meV. Zudem unterscheiden sich die effektiven Massen von Γ - und L -Tal stark. Auch der große g -Faktor von $-7,68$ am Γ -Punkt, welcher auf die kleine Bandlücke von $E_{gap} \approx 0,81$ eV zurückzuführen ist, lässt ein interessantes Verhalten erwarten.

12.2.1. Leitungsbandkanten von GaSb

In Abb. 12.10 sind die Leitungsbandminima am Γ - und Z -Punkt gegen das in [001]-Richtung orientierte Magnetfeld aufgetragen. Wie im Falle von GaAs zeigen sich auch hier drei, von den Leitungsbandtälern ausgehende, Landau-Fächer. Aufgrund des hohen g -Faktors im Γ -Punkt ist die Spinaufspaltung der vom Γ -Tal ausgehenden Landau-Niveaus aber deutlich größer als in GaAs. Die geringe energetische Separation der untersten beiden Leitungsbandtäler in Verbindung mit den stark

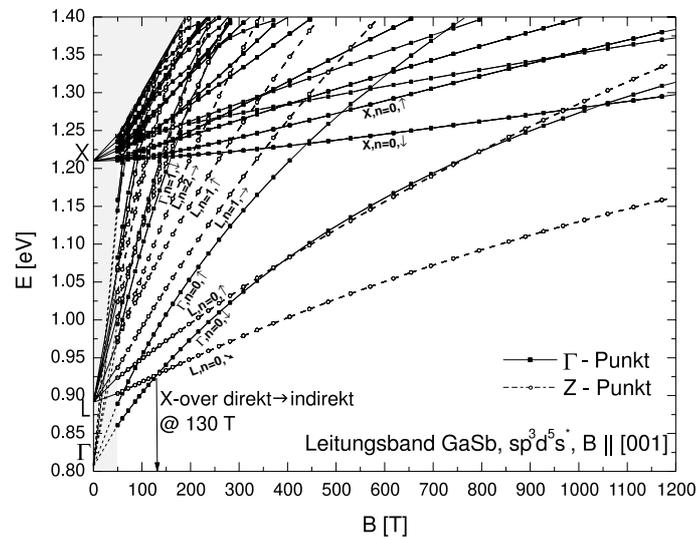


Abbildung 12.10: Eigenenergien am Γ - und Z -Punkt (Quadrate bzw. Kreise) des GaSb Leitungsbandes als Funktion des Magnetfeldes. Bei rund 130 T wechselt die Bandkante vom Γ - zum L -Punkt. Oberhalb von 130 T ist GaSb damit ein indirekter Halbleiter.

unterschiedlichen effektiven Massen bewirkt, dass das $n = 0$ Landau-Niveau des Γ -Tals bei etwa 130 T das $n = 0$ Landau-Niveau des L -Tals kreuzt und *GaSb bei 130 T indirekt wird*. Übersteigt das Magnetfeld 130 T, werden die Leitungselektronen vom Γ - in das L -Tal transferiert. Mittels optischer Transmissions-Korrelations-Spektroskopie [109] wurde die Transferzeit auf weniger als 50 fs abgeschätzt und ist damit deutlich schneller als die zeitliche Variation des Magnetfeldes. Experimentell äußert sich dies in einem Auftreten einer neuen Zyklotronresonanz-Energie und einem raschen „Ausbleichen“ der Γ -Resonanz. Dieser Effekt wurde von Arimoto *et al.* [110] experimentell bei rund 125 T beobachtet und kann somit als weiterer Beleg für die Qualität des theoretischen Modells herangezogen werden.

Die Übergangsenergien vom untersten Landau-Band ($n = 0$) in das nächsthöhere ($n = 1$) mit gleicher Spinpolarisierung ist in Figur 12.11 in Abhängigkeit des in [001]-Richtung orientierten Magnetfeldes aufgetragen. Die berechnete, sublineare Zunahme der Resonanzenergie mit dem Feld stimmt sehr gut mit den ebenfalls in der Figur eingetragen experimentellen Absorptionsmaxima von Arimoto *et al.* [110] überein. Der so dargestellte Zusammenhang kann auch in eine feldabhängige Zyklotronmasse umgerechnet werden.

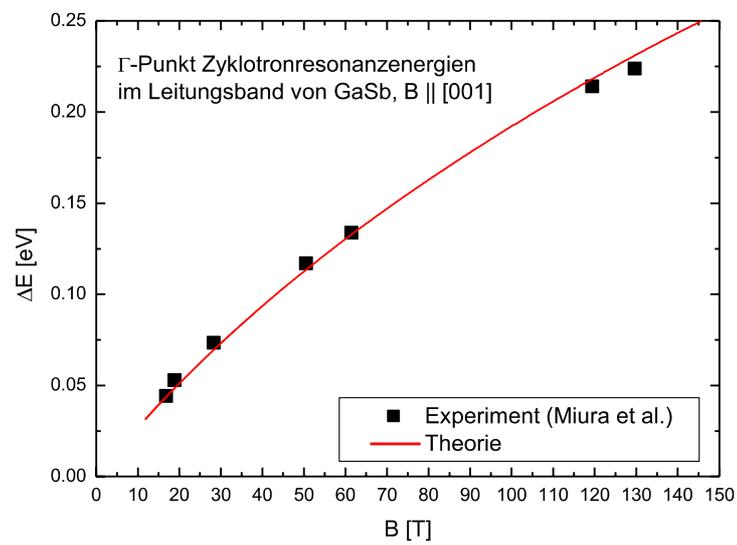


Abbildung 12.11: Γ -Punkt Übergangsenergien vom untersten Landau-Band in das $n = 1$ Niveau gleichen Spins als Funktion des Magnetfelds. Letzteres ist parallel zur [001]-Richtung der GaSb-Probe orientiert. Die Punkte sind experimentell bestimmte Absorptionsmaxima [110], während die Linie mit einem $sp^3d^5s^*$ -TB Modell berechnet wurde.

KAPITEL 13

ANWENDUNG: FRAKTALE ENERGIESPEKTREN IN 2D UND 3D

13.1. Der Hofstadter-Schmetterling

13.1.1. Zweidimensionales Elektronengas

In seiner richtungweisenden Arbeit von 1976 untersuchte Hofstadter [16] das magnetische Energiespektrum eines zweidimensionalen quadratischen Gitters mit nur einem s -Orbital pro Gitterplatz. Trotz des einfachen Modells erwies sich das Spektrum als äußerst komplex: Das im feldfreien Fall kosinusförmige Band

$$E(k_x, k_y) = \frac{1}{4}E_0 (2 + \cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \quad (13.1)$$

spaltet sich bei $\mathbf{B} \neq 0$ in Subbänder auf, deren Zahl und Dispersion stark und un stetig mit dem Fluss Φ pro Einheitszelle schwankt. Wie Hofstadter weiter zeigen konnte [16], ist das Spektrum — das gegen den Fluss aufgetragen an einen Schmetterling erinnert (Abb. 13.1) — wegen seiner rekursiven, selbstähnlichen Struktur ein Fraktal. In der Realität ist die Selbstähnlichkeit auf wenige Hierarchiestufen beschränkt, da es keine perfekt ausgerichteten homogenen Magnetfelder gibt und auch Kristalle aus thermodynamischen Gründen nie defektfrei sind. Experimentell kann daher höchstens ein mehr oder minder verwaschenes Energiespektrum beobachtet werden.

Der experimentelle Nachweis der Hofstadter-Struktur gelang kürzlich Albrecht *et al.* [111] durch Hall-Leitfähigkeits Messungen an einem schwach modulierten zweidimensionalen Elektronengas. Die Hall-Leitfähigkeit nimmt innerhalb jeder Lücke des Hofstadter-Schmetterlings ein ganzzahliges, konstantes Vielfaches von

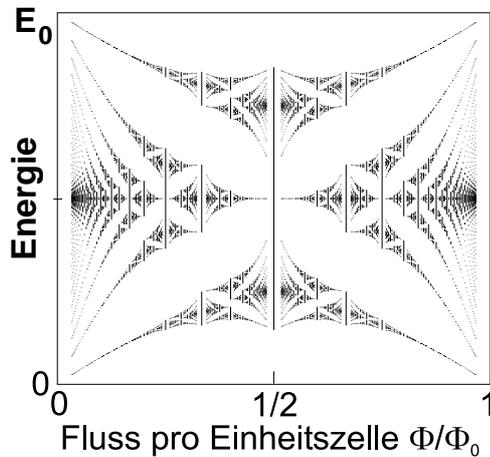


Abbildung 13.1: Der so genannte Hofstadter-Schmetterling ist das Energiespektrum eines quadratischen Gitters mit je einem s-Orbital pro Gitterplatz als Funktion des magnetischen Flusses Φ pro Einheitszelle. Oberhalb von $\Phi_0/2$ bis Φ_0 pro Einheitszelle wiederholt sich das Spektrum gespiegelt danach periodisch mit der Periode Φ_0 .

e^2/h an, welches durch die Diophantische Gleichung gegeben ist. Durch Messen der Hall-Leitfähigkeit σ_{xy} in einem Antidot-Gitter für verschiedene Magnetfelder als Funktion der Fermi-Energie konnten zumindest die beiden „Flügel“ des Schmetterlings in Form von charakteristischen Sequenzen des quantisierten σ_{xy} noch aufgelöst werden. Für das Experiment wurde das Regime $\Phi/\Phi_0 \gg 1$ gewählt, welches aufgrund der relativ großen Antidot-Gitterperiode (100 nm) schon unterhalb von einem Tesla erreicht ist. Die Energielücken in den Schmetterlingsflügeln liegen im sub-meV Bereich und sind daher für optische Messungen zu klein.

Wie das berechnete Absorptionsspektrum eines zweidimensionalen Elektronengases (Hofstadter-Anordnung) in Faraday-Konfiguration zeigt (siehe Abb. 13.2), ist der Hofstadter-Schmetterling im Prinzip spektroskopisch beobachtbar. Für die Elektronenkonzentration und die thermische Energie wurden Werte angenommen wie sie für Halbleiter typisch sind. Dieses einfache Modell untermauert also die Vermutung, dass trotz optischer Auswahlregeln, der Verbreiterung von Zuständen aufgrund endlicher Lebensdauern und der Aufweichung der Fermikante bei endlichen Temperaturen der Hofstadter-Schmetterling in Absorption erkennbar sein sollte.

13.1.2. Dreidimensionales Elektronengas

Erweitert man das Hofstadter Modell auf ein kubisches Gitter mit wieder einem s-Orbital pro Gitterplatz, schließt sich das Energiespektrum für alle Feldstärken aufgrund der Dispersion der Bänder in Feldrichtung. Statt eines Schmetterlings erhält man zahlreiche, sich überlappende kosinusartige Bänder, welche das Sy-

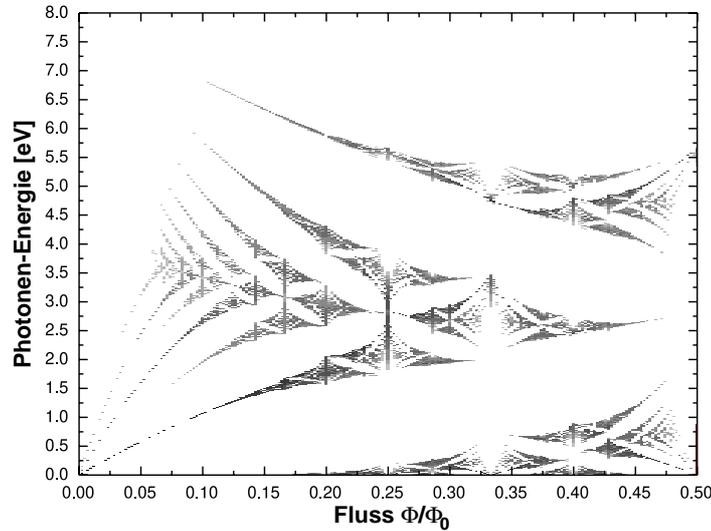


Abbildung 13.2: Absorptionsspektrum eines zweidimensionalen Elektronengases (Hofstadter-Schmetterling) in Faraday Konfiguration. Die thermische Energie wurde hierbei auf $1/1000$ von E_0 und die Ladungsträgerdichte auf ein Elektron pro 1000 Gitterplätze gesetzt.

stem für jedes Feld „metallisch“ werden lassen. Wird aber das Gitter mit nur wenigen Elektronen besetzt, kann man auf optischem Wege Spuren des Hofstadter-Spektrums finden, wie Abb. 13.3 zeigt. In der Rechnung zu Abb. 13.3 kommt ein Elektron auf 10^4 Gitterplätze bei einer thermischen Energie von $10^{-3}E_0$, wobei E_0 die Bandbreite im feldfreien Fall bezeichnet. Diese Kenngrößen entsprechen in einem typischen Halbleiter¹ einer Ladungsträgerdichte von rund $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ und einer Temperatur von rund 80 K. Wie Abb. 13.3 zeigt, dominiert für $\Phi/\Phi_0 < 0,1$ deutlich der erlaubte Übergang $n = 0 \rightarrow n = 1$, während der einfach verbotene Übergang $\Delta n = 3$ bereits deutlich schwächer ist. Mehrfach verbotene Übergänge, wie z.B. $\Delta n = 2$, sind kaum noch zu erkennen. Übersteigt Φ/Φ_0 in diesem Modell jedoch 0,15, lösen sich die Landau-Niveaus zunehmend auf und entsprechend verlieren auch die Auswahlregeln ihre Gültigkeit. Oberhalb von 0,2 dominiert sogar die Intra-Landauband-Resonanz.

Ausgehend von diesem einfachen Modellsystem mit nur einem s -Orbital pro Gitterplatz kann geschlossen werden, dass das Hofstadter-Spektrum sowohl eines

¹Das Referenzsystem ist ein GaAs-Kristall. Die Umrechnung der Temperatur erfolgte über das Verhältnis der effektiven Massen am Γ -Punkt.

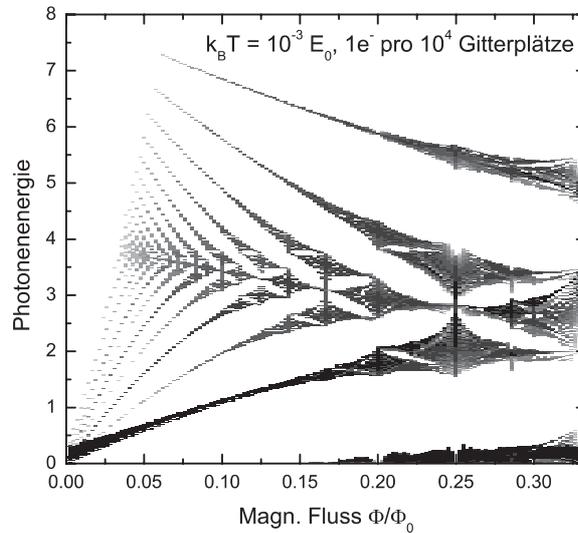


Abbildung 13.3: Absorptionsspektrum in Faraday Konfiguration eines einfach kubischen Gitters als Funktion des magnetischen Flusses Φ/Φ_0 pro Einheitszelle. Das magnetische Feld wurde parallel zu einer Gitterachse ausgerichtet. Je dunkler der Grauton desto größer ist die Absorption linkszirkular polarisierten Lichtes.

zwei- als auch eines dreidimensionalen Elektronengases in optischer Absorption beobachtbar ist. Ob fraktale Energiespektren in realen Volumenmaterialien beobachtbar sind, ist Gegenstand des nächsten Abschnitts.

Denkbar sind aber auch dreidimensionale periodische Anordnungen von Quantenpunkten. Wird eine Schicht von Quantenpunkten überwachsen, führen Verspannungen in der Deckschicht zu einer bevorzugten oder unterdrückten Nukleation eines Quantenpunktes an der gleichen lateralen Position in der darauffolgenden Schicht. Über viele Perioden hinweg bildet sich auch eine laterale Korrelation der Quantenpunkte aus, so dass ein dreidimensionales Quantenpunktgitter entsteht [112]. Die beobachteten Gitterkonstanten liegen je nach Materialsystem zwischen 55 nm und 500 nm lateral und 5 nm bis 40 nm vertikal [113, 114]. Die zum Erreichen von $\Phi/\Phi_0 \approx 1$ notwendigen Magnetfelder sinken für diese Systeme auf Werte von einigen zehn mT bis hin zu rund 75 Tesla. Eine optische Beobachtung fraktaler Spektren sollte in diesen dreidimensionalen Übergittern also möglich sein. Die hohe Defektdichte gegenwärtiger Quantenpunktgitter könnte jedoch den experimentellen Nachweis dreidimensionaler Schmetterlingsstrukturen erschweren.

Kristallgitter von Volumenhalbleitern weisen eine weitaus bessere Periodizität

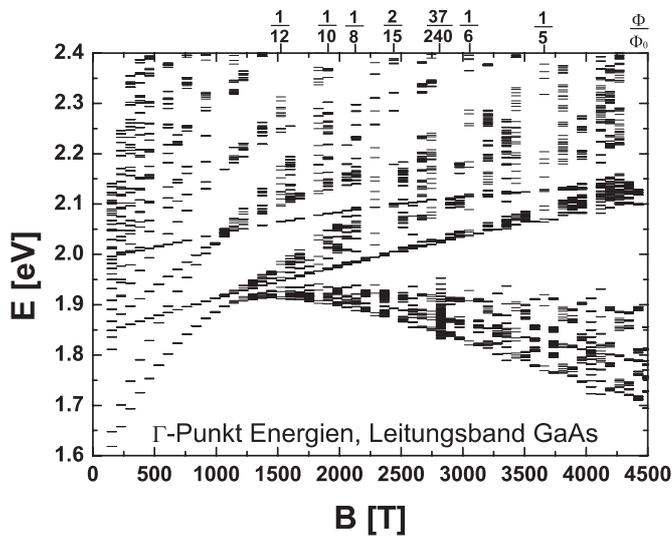


Abbildung 13.4: Eigenenergien am Γ -Punkt von GaAs in Abhängigkeit des in $[011]$ -Richtung orientierten Magnetfeld, welches in Schritten von $\Delta\Phi/\Phi_0 = \frac{1}{240}$ bis zu $\frac{1}{4}$ hochgefahren wurde. Oberhalb von rund 1000 T vermischen sich die Landau-Level verschiedener Täler und das Γ -Spektrum weist fraktale Strukturen auf. An der Oberseite ist der Fluss pro Einheitszelle ($\sqrt{2}a \times \sqrt{2}a$) in elementaren Flussquanten angegeben. Zu hohen Energien hin fehlende Niveaus wurden nicht berechnet.

auf. Jedoch stellt das Einbandmodell wie es in Abb. 13.3 verwendet wurde eine drastische Vereinfachung der Situation dar. Bei hohen Feldern beginnen sich zahlreiche, nichtkosinusförmige Bänder miteinander zu mischen. Daher soll nun am Beispiel von GaAs untersucht werden, ob sich Spuren eines fraktalen Spektrums in einer realistischen Volumen-Bandstruktur finden lassen.

13.2. Fraktales Spektrum in GaAs Volumenmaterial

Als das Leitungsbandspektrum von GaAs in Abschnitt 12.1.3 diskutiert wurde, fiel die Aufspaltung der einzelnen Landau-Niveaus oberhalb von rund 1000 T in Abb. 12.5 auf. Um dieses anomale Verhalten eingehender zu untersuchen, soll das Spektrum bis hinauf zu 4500 T berechnet werden. Nach der in Kapitel 7.1 durchgeführten Gültigkeitsabschätzung sind die im Folgenden vorgestellten Spektren sicherlich nur qualitativ korrekt. Besonderes Augenmerk gilt daher der Frage, ob ein realer Volumenkristall ein fraktales Energiespektrum zeigt, welche Effekte qualitativ zu erwarten sind, und weniger der Berechnung exakter Bandstrukturen.

13.2.1. Eigenenergien am Γ -Punkt

Werden wie in Abb. 13.4 die Γ -Punkt Eigenenergien eines GaAs Kristalls gegen das Feld aufgetragen ergibt sich oberhalb von ca. 1000 T ein rascher Übergang vom Landau-Bild in ein zunehmend komplexeres Energiespektrum. So mischen ab

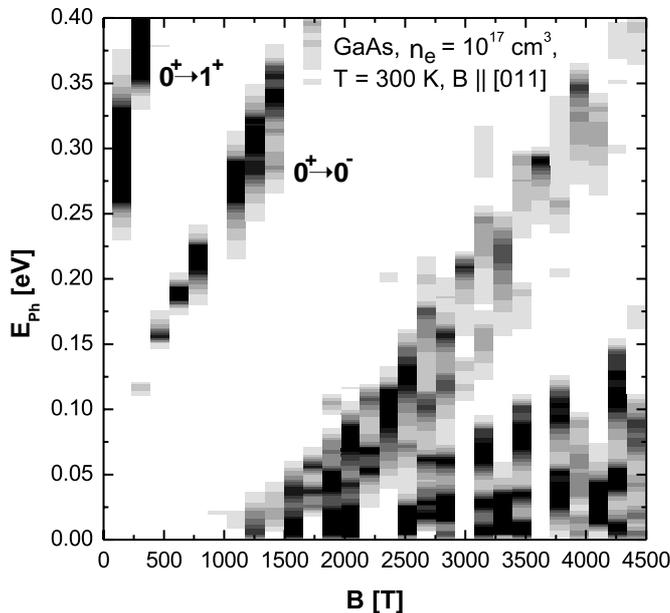


Abbildung 13.5: Absorption linkszirkular polarisierten Lichts von n-GaAs ($n_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) als Funktion des in [011]-Richtung orientierten Magnetfeldes und der Photonenenergie. Die Stärke der Absorption ist (mit linearer Skala) im Grauton kodiert. Die Temperatur entspricht 300 K. Oberhalb von rund 2000 T erkennt man Lücken im Absorptionsspektrum.

1000 T die untersten Landau-Bänder des L - und Γ -Tals und bilden zunächst ein verbreitertes Band. Ab einem Fluss von etwa $\frac{1}{12}\Phi_0$ pro Elementarzelle, also rund 1500 T, öffnen sich in dem neugebildeten Band zunehmend Lücken, die aber meist sensitiv von Φ abhängen. Bemerkenswert ist vor allem die große, sich scherenartig öffnende Lücke zwischen dem untersten, verbreiterten und den nächsthöheren, schmäleren Band.

13.2.2. Absorption

Das fraktale Γ -Spektrum aus Abb. 13.4 wird durch die Dispersion in Feldrichtung überdeckt, so dass das Leitungsband im dargestellten Bereich kontinuierlich ist. Analog zum letzten Abschnitt lässt sich aber — bei geringer Ladungsträgerdichte und moderater Temperatur — die fraktale Struktur in Absorption nachweisen. Abb. 13.5 zeigt das Absorptionsspektrum von n-GaAs als Funktion der Photonenenergie E_{Ph} und des Magnetfeldes B . Das fraktale Energiespektrum resultiert in einer stark schwankenden Absorptionskonstante oberhalb von 2000 T. Diese Vorhersagen sollten mit einem geeigneten Laser und den derzeitig erreichbaren Feldern von rund 2800 T experimentell überprüfbar sein. Dies würde den ersten experimentellen Nachweis des Hofstadter-Schmetterlings auf optischem Wege und in einem Volumenmaterial bedeuten.

ZUSAMMENFASSUNG

Teil I: Resonanter vertikaler Transport in Heterostrukturen

Im ersten Teil dieser Dissertation wird ein ballistisches Quantentransportmodell entwickelt, welches erlaubt, auf Basis des semi-empirischen Tight-Binding Modells u. a. den kohärenten Transport durch Metall/Isolator-Heterostrukturen mit realistischen Bandstrukturen zu beschreiben.

Konkret werden pseudomorph auf Si-(111) und Si-(001) gewachsene zwei- und drei-Barrieren-Strukturen untersucht. Als Barriere dient der stark ionische Isolator CaF_2 ; als Topf- und Kontaktmaterial das Metall CoSi_2 . In Übereinstimmung mit mehreren Experimenten folgt für drei-Barrieren Strukturen bereits bei Raumtemperatur eine scharfe Resonanz bei 3,6 V aus dem Modell. Als Ursache dieser überraschend ausgeprägten Struktur konnte eine neuartige Doppelresonanz zweier Co-*d*-Zustände in beiden Quantentöpfen ausgemacht werden. Die Theorie sagt aufgrund der starken Lokalisierung dieser Co-*d*-Zustände erstaunlicherweise eine hohe Unabhängigkeit der Resonanzposition von der Topfdicke vorher. Die Barrierendicke geht hingegen sensitiv in die UI-Charakteristik ein. Diese nur 8 Nanometer hohen Strukturen sind daher exzellente Kandidaten für ultra-schnelle Quantenbauelemente.

Der gleiche Streuformalismus erlaubt auch die theoretische Beschreibung von ballistischen-Elektron-Emissions-Experimenten (BEEM). Hierbei wurde mittels einer unter der Au-Basis vergrabenen Tunnelodiode die Verteilung der von der Au/GaAs-Grenzfläche her einfallenden Elektronen untersucht. Für oberflächen-nahe Tunnelstrukturen wurde experimentell ein Abflachen des bekannt linearen Anstiegs des BEEM-Stromes mit der Tunnelspannung beobachtet. Diese charakteristische Abweichung konnte durch Fokussierungseffekte im \mathbf{k}_{\parallel} -Raum erklärt werden. Letztere lassen sich auf Störstellenzustände an der durchmischten Au/GaAs-Grenzfläche zurückführen.

Teil II: Megagauß Magnetfelder in Halbleitern

Im zweiten Teil wird eine Theorie der elektronischen und optischen Eigenschaften von Festkörpern in hohen Magnetfeldern entwickelt.

Das Magnetfeld wird über die Peierls-Phase in das Tight-Binding Modell integriert. Die Gültigkeit dieser Konstruktion für allgemeine Kristallgitter wurde gezeigt und die Fehler auf einige meV unterhalb 1000 T abgeschätzt. Da die Translations-Operatoren im Magnetfeld i. A. nicht mehr kommutieren, müssen für atomistische Rechnungen die deutlich größeren, magnetischen Einheitszellen eingesetzt werden. Zur numerischen Handhabung der resultierenden riesigen Matrizen wurden Verfahren entwickelt und Symmetrioperationen des Zinkblendkristalls im Magnetfeld abgeleitet. Mit diesen Techniken gelang es erstmals, magnetische Bandstrukturen über einen weiten Feldbereich zuverlässig zu berechnen.

Da mit neueren experimentellen Methoden kurzzeitig bis zu 2800 T erreicht werden können, ist eine Theorie zur Erklärung der resultierenden Daten von großem Interesse. Die einhergehenden hohen Induktionsspannungen erzwingen optische Messungen. Ausgehend von der Kubo-Formel wurde daher die transversale, dielektrische Funktion im Tight-Binding Modell abgeleitet. Die Besonderheit ist hierbei, dass das ungestörte System der Kristall im Magnetfeld ist und nur der Laserpuls als externe Störung betrachtet wird. Im Niederfeldlimit stehen die Ergebnisse im Einklang mit denen der $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -Theorie.

Die Magnetobandstrukturen von Halbleitern zeigen von jedem Bandextremum ausgehende Landau-Fächer, die für hohe Felder zu hybridisieren beginnen. Bis hinauf zu einigen hundert Tesla stimmen die theoretischen und experimentellen Resultate für Absorption und Zyklotronresonanz quantitativ, darüberhinaus noch qualitativ überein. GaSb wird z.B. bei rund 130 T indirekt, was experimentell bestätigt werden konnte.

Erstmals wurde anhand von GaAs gezeigt, dass Spektren von Festkörpern bei hohen Feldern einem Fraktal ähnlich werden. Des Weiteren wird vorhergesagt, dass das von 2D Systemen her bekannte fraktale Energiespektrum (Hofstadter-Schmetterling) in zwei und drei Dimensionen in Absorption sichtbar ist.

ANHANG A

FREIE ELEKTRONEN IM MAGNETFELD

In diesem Anhang wird der wichtige Grenzfall quasi-freier Elektronen behandelt [116]. Diese Näherung ist dann gültig, wenn die magnetische Länge l_c groß gegenüber der Gitterkonstanten ist (kleine Felder) und die Elektronen sich in der Nähe eines parabolischen Potentialextremums befinden. Das periodische Kristallpotential kann dann in die effektive Masse m und den effektiven g -Faktor absorbiert werden. Letzterer wird hier gleich Null gesetzt, da er lediglich zu einer konstanten Energieverschiebung führt. Nicht gitterperiodische Potenzialbeiträge z.B. durch Defekte sollen klein gegenüber den Landau-Energien sein, so dass von einem effektiv konstanten Potenzial ausgegangen werden kann. Der Hamiltonoperator lautet in diesem Grenzfall dann:

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \quad (\text{A.1})$$

für das Vektorpotenzial \mathbf{A} werden explizit die symmetrische ($\mathbf{A} = -\frac{1}{2}\mathbf{r} \times \mathbf{B}$) und asymmetrische ($\mathbf{A} = (0, xB, 0)$) Eichung. Das Magnetfeld B liegt parallel zur z -Achse. Eingesetzt in den Hamiltonoperator ergibt sich:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(i\frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{2l_c^2} \right)^2 + \left(i\frac{\partial}{\partial y} - \frac{x}{2l_c^2} \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \quad (\text{A.2})$$

bzw.

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(i\frac{\partial}{\partial y} + \frac{x}{l_c^2} \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \quad (\text{A.3})$$

in asymmetrischer Eichung. Dabei wurde die sog. magnetische Länge $l_c^2 = \hbar/eB$ substituiert. Im Falle symmetrischer Eichung empfiehlt sich der Übergang zu radialsymmetrischen Koordinaten $\rho := \sqrt{x^2 + y^2}$ und φ . Wird zudem die radiale

Länge in magnetische Einheiten umskaliert ($r := l_c \rho$), ergibt sich:

$$H = \frac{\hbar\omega_c}{2} \left[-\nabla_\rho^2 + \frac{1}{4}\rho^2 + L_z \right] - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m\partial z^2} \quad (\text{A.4})$$

wobei $\omega_c = \frac{eB}{m}$ die Zyklotronfrequenz und $L_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}$ bis auf einen Faktor \hbar der Drehimpulsoperator in z-Richtung ist. Hier empfiehlt sich der Übergang zu den komplexen Koordinaten [115]:

$$\alpha = \frac{1}{2l_c}(x - iy)$$

$$\beta = l_c \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

Mit diesen können die *Inter-Landau-Band Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren*

$$a = \frac{\alpha + \beta}{\sqrt{2}} \quad \text{und} \quad a^\dagger = \frac{\alpha^\dagger + \beta^\dagger}{\sqrt{2}}$$

und *Intra-Landau-Band Operatoren*

$$b = \frac{\alpha^\dagger - \beta^\dagger}{\sqrt{2}} \quad \text{und} \quad b^\dagger = \frac{\alpha - \beta}{\sqrt{2}}$$

elegant definiert werden. Beide Operatoren erfüllen bosonische Kommutationsregeln:

$$[a, a^\dagger] = [b, b^\dagger] = 1$$

$$[a, a] = [a^\dagger, a^\dagger] = 0$$

$$[b, b] = [b^\dagger, b^\dagger] = 0$$

Mit diesen Operatoren vereinfachen sich der Hamiltonoperator und Drehimpulsoperator erheblich:

$$H = \hbar\omega_c \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2 \partial^2}{2m\partial z^2}$$

$$L_z = a^\dagger a - b^\dagger b$$

Während die Zustände durch die Quantenzahlen $n = a^\dagger a$, $m = b^\dagger b$ und k_z charakterisiert sind, hängt die Eigenenergie lediglich von n und k_z ab:

$$E_n(k_z) = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Der Drehimpuls in z -Richtung ist proportional zur Differenz von n und m :

$$\hbar L_z |n, m, k_z\rangle = \hbar(n - m) |n, m, k_z\rangle$$

Die Eigenfunktionen können wie beim harmonischen Oszillator durch wiederholtes Anwenden der Erzeugungs-Operatoren auf den Grundzustand $|0, 0, k_z\rangle$ erhalten werden:

$$|n, m, k_z\rangle = \frac{(a^\dagger)^n (b^\dagger)^m}{\sqrt{n!m!}} |0, 0, k_z\rangle$$

Der Grundzustand ist in radialer Richtung einfach eine Gaußverteilung und eine ebene Welle in z -Richtung:

$$\langle r|0, 0, k_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi l_c^2 L_3}} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{4l_c^2} + ik_z z\right)$$

Mit L_3 wurde die Ausdehnung des Systems in z -Richtung bezeichnet. Im Ortsraum lässt sich der allgemeine Zustand in radialsymmetrischer Landau Eichung schreiben:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}|n, m, k_z\rangle &= c e^{ik_z z} e^{im\phi} \left(\frac{\rho}{\sqrt{2}l_c}\right)^{|m|} e^{-\frac{\rho^2}{4l_c^2}} L_{n-(m+|m|)/2}^{|m|} \left(\frac{\rho^2}{2l_c^2}\right) \\ c &:= \sqrt{\frac{1}{4\pi l_c^2 L_3} \frac{[n - \frac{1}{2}(m + |m|)]!}{[n - \frac{1}{2}(m - |m|)]!}} \end{aligned}$$

In asymmetrischer Eichung vereinfacht sich das Resultat zu:

$$\langle \mathbf{r}|n, k_y, k_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} l_c L_2 L_3 2^n n!}} e^{ik_z z} e^{ik_y y} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{l_c}\right)^2} H_n\left(\frac{x-x_0}{l_c}\right)$$

Mit $L_b^a(x)$ bzw. $H_n(x)$ wurde dabei das zugeordnete Laguerre-Polynom bzw. das n -te Hermite-Polynom bezeichnet.

Vergleicht man die beiden Ergebnisse so fällt zunächst auf, dass die Lösung für die symmetrische Eichung sowohl in x - als auch in y -Richtung lokalisiert ist, während man bei asymmetrischer Eichung nur eine Lokalisierung in x -Richtung erhält. In y -Richtung verhält sich die Lösung wie eine ebene Welle. Dieser Unterschied hat jedoch physikalisch keine Bedeutung: Mit der Eichung legt man implizit die Lie-Algebra der Translations-Operatoren fest und wählt damit auch eine spezielle Darstellung. Die daraus resultierenden Wellenfunktionen sind nur verschiedene Linearkombinationen im entarteten Unterraum der m bzw. k_y . Beide Lösungen lassen sich durch Linearkombination im Unterraum sowie umeichen ineinander überführen. Obwohl die symmetrische Lösung intuitiver erscheinen mag, wurde in dieser Arbeit (fast) ausschließlich mit der asymmetrischen gearbeitet, da sie leichter handhabbar ist.

ANHANG B

BAHN-KOMPONENTE DES STROMRESPONSES

Die Berechnung der Bahnkomponente des Stromdichteresponses aus Abschnitt 10.2 ist Gegenstand dieses Anhangs. Ausgangspunkt ist hierbei die Ableitung der Hopping-Matrixelemente $t_{I\alpha,I'\alpha'}$ im externen Vektorpotenzial $\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}$ nach $\delta\mathbf{A}$ (vgl. Gl. (10.17)):

$$\begin{aligned} \frac{dt_{I\alpha,I'\alpha'}}{d\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})} = & t_{I\alpha,I'\alpha'}^0 \left(1 - \frac{ie}{\hbar} (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}) \cdot \sum_{\mathbf{q}'} \delta\mathbf{A}(\mathbf{q}') \frac{e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{R}_I} - e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{R}_{I'}}}{i\mathbf{q}' \cdot (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'})} \right) \\ & \times \frac{e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_I} - e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{I'}}}{\hbar \mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'})} (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}) + O(\delta\mathbf{A}^2). \end{aligned}$$

Hier bezeichnet $t_{I\alpha,I'\alpha'}^0$ das Tight-Binding Matrixelement *im Magnetfeld*. Dieser Ausdruck wird in die Bahnkomponente des Stromdichte-Operators substituiert

$$\langle n\mathbf{k} | \mathbf{j}^{(B)}(\mathbf{q}) | n'\mathbf{k}' \rangle = \frac{-1}{NV} \sum_{I\alpha I'\alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_I + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_{I'}} \frac{dt_{I\alpha,I'\alpha'}}{d\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})}.$$

Da die hierbei auftretenden Gleichungen etwas länglich werden, soll der von $\delta\mathbf{A}$ unabhängige Term ($\mathbf{j}_{n,n'}^{(B,1)}$) und der zu $\delta\mathbf{A}$ proportionale ($\mathbf{j}_{n,n'}^{(B,2)}$) separat betrachtet werden. Für den ersten Term erhält man den Ausdruck:

$$\mathbf{j}_{n,n'}^{(B,1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) = \frac{-e}{\hbar NV} \sum_{\alpha', \alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') \quad (\text{B.1})$$

$$\times \sum_{I, I'} t_{I\alpha, I'\alpha'} \frac{\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}}{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'})} \left(e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_I + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_{I'}} - e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_I + i(\mathbf{k}'-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_{I'}} \right) \quad (\text{B.2})$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-e}{\hbar NV} \sum_{L\alpha,\alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') t_{L,\alpha\alpha'} \frac{\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}}{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \\
&\quad \times \left(e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}'+\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})/2} - e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}'-\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})/2} \right) \\
&\quad \times e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\lambda} + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})/2} \sum_{L'} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_{L'}/2} \tag{B.3}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-e}{\hbar V} \sum_{\mathbf{K},L,\alpha,\alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') t_{L,\alpha\alpha'} \frac{\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}}{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{q},2\mathbf{K}} \\
&\quad \times e^{i\mathbf{K} \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\lambda} + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \left(e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{K}) \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} - e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{K}) \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \right). \tag{B.4}
\end{aligned}$$

Im zweiten Schritt wurden die beiden Gittersummen zu den Summen- bzw. Differenzwerten der vorherigen kombiniert. Wie Gl. (10.12) ist auch obiger Term kristallimpulserhaltend. Die herkömmliche Definition des Tight-Binding Impuls-Matrixelements wird auf nichtsenkrechte Übergänge erweitert und man definiert:

$$\begin{aligned}
\mathbf{p}_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &:= \frac{m}{\hbar} \sum_{\mathbf{K},L,\alpha,\alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') t_{L\alpha\alpha'} \delta_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{q},2\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\lambda} + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \tag{B.5} \\
&\quad \times (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}) \cdot (\boldsymbol{\tau}_{\lambda'} - \mathbf{R}_I)} \frac{1 - e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})}}{\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})}
\end{aligned}$$

Mit analogen Umformungen kann der zu $\delta\mathbf{A}$ proportionale Term der Stromdichte vereinfacht werden. Um die Länge der Gleichungen in Grenzen zu halten wird angenommen, dass *monochromatisches* Licht einfällt, d.h. beide Photonen des Zweiphotonprozesses die gleiche Wellenzahl besitzen. Da das elektrische Feld eine reelle Größe ist, muss neben $\delta\mathbf{A}(-\mathbf{q})$ aber auch der entgegengesetzte Wellenvektor $\delta\mathbf{A}(\mathbf{q})$ mit gleicher Amplitude vorkommen. Die Summe wird also auf zwei Summanden eingeschränkt

$$\begin{aligned}
&\mathbf{j}_{n,n'}^{(B,2)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) \\
&= \frac{e^2}{\hbar^2 NV} \sum_{I\alpha,I'\alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') t_{I\alpha,I'\alpha'}(\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'}) \\
&\quad \times \frac{\delta\mathbf{A}(\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'})}{[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'})]^2} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_I + i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_{I'}} \\
&\quad \times \left(2 - e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'})} - e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \mathbf{R}_{I'})} - e^{-i2\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_I} - e^{-i2\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{I'}} + 2e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I + \mathbf{R}_{I'})} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{e^2}{\hbar^2 NV} \sum_{L,\alpha,\alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') t_{L,\alpha\alpha'} \frac{\delta \mathbf{A}(-\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})}{[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})]^2} \\
&\quad \times (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_L/2} e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda + i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}} \\
&\quad \times \sum_{L'} \left[e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_{L'}/2} \left(2 - e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} - e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \right) \right. \\
&\quad - e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+2\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_{L'}/2} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_L - i\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda} - e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+2\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_{L'}/2} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_L - i2\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}} \\
&\quad \left. + 2e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+2\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_{L'}/2} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\boldsymbol{\tau}_\lambda + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \right] \\
&= \frac{e^2}{\hbar^2 V} \sum_{L,\alpha,\alpha'} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') t_{L,\alpha\alpha'} \frac{\delta \mathbf{A}(-\mathbf{q}) \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})}{[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})]^2} (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) \\
&\quad \times \left[\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} 2 \sin^2 [\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) / 2] e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} - \sum_{\mathbf{K}} \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+2\mathbf{q},2\mathbf{K}} \right. \\
&\quad \times \left(e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_L/2} e^{-i(\mathbf{k}+2\mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda + i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_L/2} e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda + i(\mathbf{k}'-2\mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}} \right. \\
&\quad \left. \left. - 2e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_L} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda + i(\mathbf{k}'-\mathbf{q}) \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}} \right) \right]
\end{aligned}$$

Dieser Ausdruck kann durch die Definition eines mit der kinetischen Energie zusammenhängenden Tensors

$$\begin{aligned}
T_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &:= \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{\alpha\alpha',L} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') t_{L,\alpha\alpha'} \frac{(\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) \otimes (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})}{[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})]^2} \\
&\quad \times \left[\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} 2 \sin^2 [\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) / 2] e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \right. \\
&\quad - \sum_{\mathbf{K}} \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+2\mathbf{q},2\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda + i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}} \left(e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_L/2 - i2\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\tau}_\lambda} \right. \\
&\quad \left. \left. + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_L/2 - i2\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}} - 2e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_L - i\mathbf{q} \cdot (\boldsymbol{\tau}_\lambda + \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \right) \right] \quad (\text{B.6})
\end{aligned}$$

übersichtlicher dargestellt werden. Im Limes $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$ geht dieser in die Form

$$\begin{aligned}
\lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}} T_{n,n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &:= \lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}} \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{\alpha\alpha',L} C_{n\alpha}^\dagger(\mathbf{k}) C_{n'\alpha'}(\mathbf{k}') t_{L,\alpha\alpha'} \frac{(\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) \otimes (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})}{[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})]^2} \\
&\quad \times \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} 2 \sin^2 [\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'}) / 2] e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_I - \boldsymbol{\tau}_{\lambda'})} \\
&= \frac{m}{\hbar^2} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \nabla_{\mathbf{k}''} \nabla_{\mathbf{k}'''} \langle n\mathbf{k}'' | H | n\mathbf{k}''' \rangle |_{\mathbf{k}''=\mathbf{k}}
\end{aligned}$$

über, die sich mit der entsprechenden Definition in Ref. [87] deckt.

ANHANG C

STROMDICHTER UND LADUNGSERHALTUNG

Für den allgemeinen Hamiltonoperator im Magnetfeld mit Spin-Bahn Koppelung

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{\Pi^2}{2m} + e\phi + \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \mathbf{A} - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \phi \times \Pi \\
 &= \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} + e\phi + \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \mathbf{A} - \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \phi \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A})
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

soll gezeigt werden, dass der Stromdichte-Operator definiert werden kann als:

$$\mathbf{j} := \frac{-e}{2m} \left(\Pi |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| + \Pi |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| + i[\boldsymbol{\sigma} \times \Pi, |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|] - \frac{\mu_B}{c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla \phi \right) \tag{C.2}$$

Da der Operator per Konstruktion hermitesch ist, bleibt zu zeigen, dass er die Kontinuitätsgleichung erfüllt, d.h. dass $\nabla \cdot \langle \mathbf{j} \rangle + \langle \dot{\rho} \rangle = 0$. Der Erwartungswert der Stromdichte $\langle \psi | \mathbf{j} | \psi \rangle = \langle \mathbf{j} \rangle$ ergibt sich mit der abkürzenden Schreibweise $\psi := \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$, $\psi^\dagger := \langle \mathbf{r} | \psi \rangle^*$ zu:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{j} \rangle &= \frac{-e}{2m} \left(\langle \psi | \Pi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle + \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \Pi | \psi \rangle \right. \\
 &\quad \left. + i \langle \psi | \boldsymbol{\sigma} \times \Pi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle - i \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \boldsymbol{\sigma} \times \Pi | \psi \rangle - \frac{\mu_B}{c^2} \langle \psi | \boldsymbol{\sigma} \times \nabla \phi | \psi \rangle \right) \\
 &= \frac{-e}{2m} \left(\psi (-\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \psi^* + \psi^* (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \psi \right. \\
 &\quad \left. + i\psi \boldsymbol{\sigma}^* \times (-\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \psi^* - i\psi^* \boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \psi - \frac{\mu_B}{c^2} \psi^* \boldsymbol{\sigma} \times \nabla \phi \psi \right)
 \end{aligned}$$

Die Divergenz der Stromdichte lautet damit:

$$\begin{aligned}
\nabla \langle \mathbf{j} \rangle &= \frac{e}{i\hbar 2m} [(\mathbf{p}\psi) \cdot (-\mathbf{p}+e\mathbf{A})\psi^* + \psi\mathbf{p} \cdot (-\mathbf{p}+e\mathbf{A})\psi^* \\
&\quad + (\mathbf{p}\psi^*) \cdot (\mathbf{p}+e\mathbf{A})\psi + \psi^*\mathbf{p} \cdot (\mathbf{p}+e\mathbf{A})\psi \\
&\quad + i(\mathbf{p}\psi) \cdot \boldsymbol{\sigma}^* \times (-\mathbf{p}+e\mathbf{A})\psi^* + i\psi\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}^* \times e\mathbf{A}\psi^* \\
&\quad - i(\mathbf{p}\psi^*) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{p}+e\mathbf{A})\psi - i\psi^*\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times e\mathbf{A}\psi \\
&\quad - \frac{\mu_B}{c^2} (\mathbf{p}\psi^*) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla\phi\psi - \frac{\mu_B}{c^2} \psi^*\boldsymbol{\sigma} \times \nabla\phi \cdot \mathbf{p}\psi] \\
&= \frac{e}{i\hbar 2m} [\psi\mathbf{p} \cdot (-\mathbf{p}+e\mathbf{A})\psi^* + \psi^*\mathbf{p} \cdot (\mathbf{p}+e\mathbf{A})\psi + e\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}\psi\psi^* \\
&\quad - i(\mathbf{p}\psi) \cdot \boldsymbol{\sigma}^* \times \mathbf{p}\psi^* + ie(\mathbf{p}\psi) \cdot \boldsymbol{\sigma}^* \times \mathbf{A}\psi^* - ie\psi\boldsymbol{\sigma}^* \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{A})\psi^* \\
&\quad + ie\psi\boldsymbol{\sigma}^* \times \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}\psi^* - i(\mathbf{p}\psi^*) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}\psi - ie(\mathbf{p}\psi^*) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{A}\psi \\
&\quad + ie\psi^*\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{A})\psi - ie\psi^*\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}\psi \\
&\quad - \frac{\mu_B}{c^2} (\mathbf{p}\psi^*) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla\phi\psi - \frac{\mu_B}{c^2} \psi^*\boldsymbol{\sigma} \times \nabla\phi \cdot \mathbf{p}\psi] \\
&= \frac{e}{i\hbar 2m} [-\psi(-\mathbf{p}+e\mathbf{A})^2\psi^* + \psi e\mathbf{A} \cdot (-\mathbf{p}+e\mathbf{A})\psi^* + \psi^*(\mathbf{p}+e\mathbf{A})^2\psi \\
&\quad - \psi^*e\mathbf{A} \cdot (\mathbf{p}+e\mathbf{A})\psi + e\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}\psi\psi^* \\
&\quad - \frac{\mu_B}{c^2} (\mathbf{p}\psi^*) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla\phi\psi - \frac{\mu_B}{c^2} \psi^*\boldsymbol{\sigma} \times \nabla\phi \cdot \mathbf{p}\psi] \\
&= \frac{e}{i\hbar 2m} \left(-\psi\Pi^{*2}\psi^* + \psi^*\Pi^2\psi - \frac{\mu_B}{c^2} (\mathbf{p}\psi^*) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla\phi\psi - \frac{\mu_B}{c^2} \psi^*\boldsymbol{\sigma} \times \nabla\phi \cdot \mathbf{p}\psi \right)
\end{aligned}$$

Die Spin-Komponente (zweiter Summand) des Stromdichte-Operators in Gl. (C.2) ist im vorletzten Schritt herausgefallen. Um diesen Ausdruck weiter zu vereinfachen soll die Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{\Pi^2}{2m} + e\phi + \mu_B\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \mathbf{A} - \frac{\mu_B}{2mc^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\phi \times \Pi \right) \psi = i\hbar\partial_t\psi \\
&\left(\frac{\Pi^{*2}}{2m} + e\phi + \mu_B\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \nabla \times \mathbf{A} - \frac{\mu_B}{2mc^2}\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \nabla\phi \times \Pi^* \right) \psi^* = -i\hbar\partial_t\psi^*
\end{aligned}$$

in obigen Ausdruck in der Form $\frac{\Pi^2}{2m}\psi = \dots$ substituiert werden:

$$\begin{aligned}
\nabla \langle \mathbf{j} \rangle &= \frac{e}{i\hbar} \left[-\psi \left(-i\hbar\partial_t - e\phi - \mu_B \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \nabla \times \mathbf{A} + \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \nabla \phi \times \Pi^* \right) \psi^* \right. \\
&\quad \left. + \psi^* \left(i\hbar\partial_t - e\phi - \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \mathbf{A} + \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \phi \times \Pi \right) \psi \right. \\
&\quad \left. - \frac{\mu_B}{2mc^2} (\mathbf{p}\psi^*) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla \phi \psi - \frac{\mu_B}{2mc^2} \psi^* \boldsymbol{\sigma} \times \nabla \phi \cdot \mathbf{p}\psi \right] \\
&= \frac{e}{i\hbar} \left[i\hbar\partial_t \psi \psi^* - \psi \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \nabla \phi \times \Pi^* \psi^* + \psi^* \frac{\mu_B}{2mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \phi \times \Pi \psi \right. \\
&\quad \left. - \frac{\mu_B}{2mc^2} (\mathbf{p}\psi^*) \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla \phi \psi - \frac{\mu_B}{2mc^2} \psi^* \boldsymbol{\sigma} \times \nabla \phi \cdot \mathbf{p}\psi \right] \\
&= e\partial_t \psi \psi^*.
\end{aligned}$$

Zusammen mit der Definition des Ladungsdichte-Operators

$$\rho := -e |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|$$

folgt die aus der Elektrodynamik bekannte Ladungs-Erhaltung:

$$\nabla \langle \mathbf{j} \rangle + \partial_t \langle \rho \rangle = 0$$

Damit kann Gleichung (C.2) als die korrekt erweiterte Definition des Stromdichte-Operators von einem System mit Spin-Bahn-Koppelung und externem Magnetfeld angesehen werden.

ANHANG D

NOMENKLATUR

Symbol	Bedeutung
$e = e $	Betrag der Elektronenladung
m	Freie Elektronenmasse
c	Lichtgeschwindigkeit
Φ	Magnetischer Fluss durch Plaquette
$\Phi_0 := \frac{h}{e}$	Elementares Flussquant
\mathbf{k}, \mathbf{q}	Vektoren im reziproken Raum
\mathbf{j}	Stromdichte
\mathbf{A}	Vektorpotenzial
\mathbb{J}	Strom-Strom-Korrelationsfunktion
$T_{M,\mathbf{R}}$	Magnetischer Translations-Operator um \mathbf{R}
$T_{\mathbf{R}}$	Feldfreier Translations-Operator
$\Pi := \mathbf{p} + e\mathbf{A}$	Kanonischer Impuls im Magnetfeld
$\Pi_c := \Pi + e\mathbf{r} \times \mathbf{B}$	Erhaltungsgröße für freie Elektronen im Magnetfeld
$l_c := \sqrt{\frac{h}{eB}}$	Magnetische Länge
$\boldsymbol{\tau}_\lambda$	Basisvektor des Basisatoms λ
$f(\mathbf{K}) = \int_{V_0} \frac{d^3r}{V_0} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r})$	Fourier Transformation einer gitterperiodischen Funktion
$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{K})$	entsprechende Rücktransformation
$f(\mathbf{q}) = \int \frac{d^3r}{V} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r})$	Fourier Transformation einer nichtperiodischen Funktion. (Normiert auf den Kristall $V = NV_0$)
$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{q})$	entsprechende Rücktransformation
$\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = V\delta(\mathbf{r})$	zugehörige δ -Funktion
$\int_V d^3r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = V\delta_{\mathbf{q},0}$	zugehörige δ -Funktion
$\sum_{L,m} e^{i\mathbf{R}_{L,m}\cdot\mathbf{k}} = N\delta_{\mathbf{k},0}$	Gittersumme
K_0	Operator der komplexen Konjugation
$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$	Dyadisches Produkt, d.h. $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})_{ij} := (\mathbf{a})_i (\mathbf{b})_j$

EIGENE VERÖFFENTLICHUNGEN

- C. Strahberger und P. Vogl, *Magnetooptics in the megagauss regime*, Phys. Rev. Lett., *in preparation* (2001).
- D. Rakoczy, G. Strasser, J. Smoliner und C. Strahberger, *L-valley electron transport in GaAs-AlAs Double Barrier Resonant Tunneling Structures Studied by Ballistic Electron Emission Microscopy*, Phys. Rev. Lett., *submitted* (2001).
- C. Strahberger und P. Vogl, *Resonant Si/CaF₂ tunneling diodes*, Phys. Stat. Sol., *submitted* (2001).
- J. Smoliner, R. Heer, G. Strasser und C. Strahberger, *Magnetic field effects and k_{\parallel} -filtering in BEEM on GaAs-AlGaAs resonant tunneling structures*, Appl. Phys. A **72**, 233 (2001).
- F. Sacconi, M. Povolotskyi, A. Di Carlo, P. Lugli, M. Staedele, C. G. Strahberger, and P. Vogl, *Full-band approaches for the quantum treatment of nanometer-scale MOS structures*, Physica B, *in print* (2001).
- C. Strahberger, J. Smoliner, R. Heer und G. Strasser, *Enhanced k_{\parallel} -filtering effects in ballistic electron emission experiments*, Phys. Rev. B, **63** 205306 (2001).
- C. Strahberger, und P. Vogl, *Model of room temperature resonant tunneling current in metal/insulator and insulator/insulator heterostructures*, Phys. Rev. B **62**, 7289 (2000).
- C. Strahberger, und P. Vogl, *Theoretical insights into CoSi₂/CaF₂ tunneling diodes*, Physica B, Condensed Matter **272**, 160 (1999).
- C. Strahberger, *Theorie der resonanten Metall/Isolator/Halbleiter-Tunneldioden*, Diplomarbeit, TU-München / Univ. Regensburg (1998).

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] J. A. Majewski und P. Vogl, *Quantum Theory of structure: Tight-binding systems, in Cohesion and structure Vol. 2: The structure of binary compounds*, Herausgeber F. R. de Boer und D. G. Pettifor (Elsevier Science Publishers B. V., 1989).
- [2] P. O. Löwdin, *J. Chem. Phys.* **18**, 365 (1950).
- [3] J. C. Slater und G. F. Koster, *Phys. Rev.* **94**, 1498 (1954).
- [4] J. A. Majewski und P. Vogl, *Phys. Rev. B* **35**, 9666 (1987).
- [5] J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State* (Academic, New York, 1991), S. 513
- [6] D. J. Chadi, *Phys. Rev. B* **16**, 790 (1977).
- [7] J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, und F. Bassani, *Phys. Rev. B* **57**, 6493 (1998).
- [8] D. A. Papaconstantopoulos, *Handbook of the Band Structure of Elemental Solids* (Plenum Press, New York, 1986).
- [9] S. Sanguinetti, C. Calegari, V. R. Velasco, G. Benedek, F. Tavazza und Leo Miglio, *Phys. Rev. B* **54**, 9196 (1996).
- [10] C. Strahberger, *Theorie von Resonanten Metall/Isolator/Halbleiter Tunnel-dioden* (Diplomarbeit, Techn. Univ. München, 1999).
- [11] S. Froyen und W. A. Harrison, *Phys. Rev. B* **20**, 2420 (1979).
- [12] P. Vogl, H. P. Hjalmarson und J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solids* **44**, 365 (1983).
- [13] J. A. Majewski und P. Vogl, *Phys. Rev. B*, **35**, 9679 (1987).
- [14] W. A. Harrison, *Phys. Rev. B* **28**, 550 (1983).

-
- [15] R. Peierls, Z. Phys. **80**, 763 (1933).
- [16] D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976).
- [17] R. Brunetti, C. Jacoboni, und F. Rossi, Phys. Rev. B **39**, 10781 (1989).
- [18] F. A. Buot und K. L. Jensen, Phys. Rev. B **42**, 9429 (1990).
- [19] M. V. Fischetti, J. Appl. Phys. **83**, 270 (1998).
- [20] R. Lake und S. Datta, Phys. Rev. B **45**, 6670 (1992).
- [21] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **32**, 306 (1988).
- [22] M. Büttiker, IBM J. Res. Dev. **32**, 317 (1988).
- [23] C. Strahberger und P. Vogl, Phys. Rev. B **62**, 7289 (2000).
- [24] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [25] Aldo Di Carlo, P. Vogl und W. Pötz, Phys. Rev. B **50**, 8358 (1994).
- [26] D. Z.-Y. Ting, E. T. Yu und T. C. McGill, Phys. Rev. B **45**, 3583 (1992).
- [27] T. Boykin, Phys. Rev. B **54**, 7670 (1996).
- [28] L. J. Schowalter und R. W. Fathauer, *Growth and Characterization of Single Crystal Insulators on Silicon* CRC Critical Reviews in Solid State and Materials Science **15**, 367, 1989.
- [29] S. Ossicini, A. Fasolino und F. Bernardini, Phys. Rev. Lett. **72**, 1044 (1993).
- [30] J. Zegenhagen und J. R. Patel, Phys. Rev. B **41**, 5315 (1990).
- [31] R. M. Tromp und M. C. Reuter, Phys. Rev. Lett. **61**, 1756 (1988).
- [32] R. W. Fathauer, N. Lewis, L. J. Schowalter und E. L. Hall, J. Vac. Sci. Technol. B **3**, 736 (1985).
- [33] A. Izumi, Y. Hirai, K. Tsutsui und N. S. Sokolov, Appl. Phys. Lett. **67**, 2792 (1995).

-
- [34] D. Rieger, F. J. Himpsel, U. O. Karlsson, F. R. McFelly, J. F. Morar und J. A. Yarmoff, *Phys. Rev. B* **34**, 7295 (1986).
- [35] C. A. Lucas und D. Loretto, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2071 (1992).
- [36] F. Xu, M. Vos und J. H. Weaver, *Phys. Rev. B* **39**, 8008 (1989).
- [37] A. Klust, R. Kayser, und J. Wollschläger, *Phys. Rev. B* **62**, 2158 (2000).
- [38] A. Klust, H. Pietsch und J. Wollschläger, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 1967 (1998).
- [39] J. Wollschläger, H. Pietsch, R. Kayer, A. Klust, *Thin Solid Films* **336**, 120 (1998).
- [40] J. Wollschläger, A. Klust, H. Pietsch, *Appl. Surf. Sci.* **123**, 496 (1998).
- [41] S. Satpathy und R. M. Martin, *Phys. Rev. B* **39**, 8494 (1989).
- [42] K. Nath und A. B. Anderson, *Phys. Rev. B* **38**, 8264 (1988).
- [43] K. Akai und M. Matsuura, *Phys. Rev. B* **60**, 5561 (1999).
- [44] M. Asada, M. Watanabe, T. Suemasu, Y. Kohono und W. Saitoh, *J. Vac. Sci. Technol. A* **13(3)**, 623 (1995).
- [45] P. Avouris und R. Wolkow, *Appl. Phys. Lett.* **55**, 1074 (1989).
- [46] J. M. Phillips und W. M. Augustyniak, *Appl. Phys. Lett.* **48**, 463 (1986).
- [47] M. Städele, M. Moukara, J. A. Majewski, P. Vogl und A. Görling, *Phys. Rev. B* **59**, 10031 (1999).
- [48] Y. Hatsugai und T. Fujiwara, *Phys. Rev. B* **37**, 1280 (1988).
- [49] A. Svane und O. Gunnarsson, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1148 (1990).
- [50] C. Strahberger und P. Vogl, *Physica B* **272**, 160 (1999).
- [51] T. Suemasu, M. Watanabe, J. Suzuki, Y. Kohono, M. Asada und N. Suzuki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 57 (1994).
- [52] M. Watanabe, T. Suemasu, S. Muratake und M. Asada, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 300 (1993).

-
- [53] T. Suemasu, M. Watanabe, M. Asada und N. Suzuki, *Electronic Lett.* **28**, 1432 (1992).
- [54] W. J. Kaiser und L. D. Bell, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1408 (1988).
- [55] L. D. Bell und W. J. Kaiser, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2368 (1988).
- [56] W. J. Kaiser, M. H. Hecht, L. D. Bell, F. J. Grunthaler, J. J. Liu und L. C. Davis, *Phys. Rev. B* **48**, 18324 (1993).
- [57] H. Sirringhaus, E. Y. Lee und H. von Känel, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 577 (1994).
- [58] R. Ludeke, M. Prietsch und A. Samsavar, *J. Vac. Sci. Technol. B* **9**, 2342 (1991).
- [59] M. Prietsch, R. Ludeke, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2511 (1991).
- [60] X. C. Cheng, D. A. Collins, T. C. McGill, *J. Vac. Sci. Technol. A* **15**, 2063 (1997).
- [61] J. Smoliner, R. Heer, und G. Strasser, *Phys. Rev. B* **60**, 5137 (1999).
- [62] J. Smoliner, R. Heer, G. Strasser und C. Strahberger, *Appl. Phys. A* **72**, 233 (2001).
- [63] C. Strahberger, J. Smoliner, R. Heer, und G. Strasser, *Phys. Rev. B* **63**, 205306 (2001).
- [64] M.-L. Ke, D. I. Westwood, C. C. Matthai, B. E. Richardson, und R. H. Williams, *Phys. Rev. B* **53**, 4845 (1996).
- [65] J. J. O'Shea, E. G. Brazel, M. E. Rubin, S. Bhargava, M. A. Chin, und V. Narayanamurti, *Phys. Rev. B* **56**, 2026 (1997).
- [66] W. J. Kaiser, L. D. Bell, M. H. Hecht, und F. J. Grunthaler, *J. Vac. Sci. Technol. B* **7**, 945 (1989).
- [67] A. A. Talin, D. A. A. Ohlberg, R. S. Williams, P. Sullivan, I. Koutselas, B. Williams, und K. L. Kavanagh, *Appl. Phys. Lett.* **62**, 2965 (1993).
- [68] R. M. Charatan und R. S. Williams, *J. Appl. Phys.* **72**, 5226 (1992).

-
- [69] E. Brown, *Solid State Physics*, Herausgeber H. Ehrenreich, F. Seitz und D. Turnbull (Academic, New York, 1968), Vol. **22**, S. 313.
- [70] F. A. Butler und E. Brown, Phys. Rev. **166**, 630 (1968).
- [71] H. J. Schellnhuber und G. M. Obermair, Phys. Rev. Lett. **45**, 276 (1980).
- [72] P. Pfeffer und W. Zawadzki, Phys. Rev. B **41**, 1561 (1990).
- [73] A. I. Bykov, M. I. Dolotenko, N. P. Kolokolchikov, V. D. Selemir und O. M. Tatsenko, Physica B **294/295**, 572 (2001).
- [74] S. P. Najda, S. Takeyama, N. Miura, P. Pfeffer und W. Zawadzki, Phys. Rev. B **40**, 6189 (1989).
- [75] N. Miura, N. Nojiri, P. Pfeffer und W. Zawadzki, Phys. Rev. B **55**, 13598 (1997).
- [76] C. Priester, G. Allan, und M. Lannoo, Phys. Rev. B **37**, 8519 (1988).
- [77] R. Saito, G. Dresselhaus und M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. **50**, 14698 (1994).
- [78] K. Wakabayashi, M. Fujita, H. Ajiki und M. Sigrist, Phys. Rev. B **59**, 8271 (1999).
- [79] M. Graf und P. Vogl, Phys. Rev. B **51**, 4940 (1995).
- [80] M. E. Peskin, D. V. Schroeder, *Introduction into Quantum Field Theory* (Addison-Wesley, Reading, 1996), S. 482.
- [81] P. Strange, *Relativistic Quantum Mechanics with Applications in Condensed Matter and Atomic Physics* (Cambridge University Press, Cambridge 1998), S. 216
- [82] M. Kohmoto, B. I. Halperin und Y.-S. Wu, Physica B **184**, 30 (1993).
- [83] J. M. Luttinger und W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [84] G. H. Wannier und D. R. Fredkin, Phys. Rev. **125**, 1910 (1962).
- [85] T. B. Boykin, R. C. Bowen und G. Klimeck, Phys. Rev. B **63**, 245314 (2001).
- [86] M. Governale und C. Ungarelli, Phys. Rev. B **58**, 7816 (2001).

-
- [87] M. Graf, *Elektrische und magnetische Fleder in Halbleiterstrukturen* (Dissertation, Techn. Univ. München 1996).
- [88] M. Lax, *Symmetry Principles in Solid State and Molecular Physics* (Wiley-Interscience, New York 1974), S. 275.
- [89] G. Burns, *Introduction to Group Theory with Applications* (Academic Press, Orlando/Florida 1977), S. 274.
- [90] M. Tinkham, *Group Theory and Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York 1964).
- [91] G. Burns, *Solid State Physics* (Academic Press, San Diego 1985).
- [92] M. Abramowitz und I. A. Stegun, *Pocketbook of mathematical functions* (Harry Deutsch, Frankfurt a. Main, 1984).
- [93] P. J. Lin-Chung und B. W. Henvis, Phys. Rev. B **12**, 630 (1975).
- [94] B. E. Kane, A. S. Dzurak, G. R. Facer, R. G. Clark, R. P. Starrett, A. Skougarevsky, N. E. Lumpkin, J. S. Brooks, L. W. Engel, N. Miura, H. Yokoi, T. Takamasu, H. Nakagawa, J. D. Goettee und D. G. Rickel, Rev. Sci. Instrum. **68**, 3843 (1997).
- [95] P. Vogl, M. Graf und A. Görling, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **491**, 241 (1998).
- [96] G. D. Mahan, *Many Particle Physics* (Plenum Press, New York 1991).
- [97] R. F. Wallis und M. Balkanski, *Many-Body Aspects of Solid State Spectroscopy* (Elsevier Science, Amsterdam, 1986).
- [98] G. E. Golub und C. F. van Loan, *Matrix Computations* (The Johns Hopkins University Press, London, 1996).
- [99] B. Lax und L. Roth, Phys. Rev. **98**, 548 (1955).
- [100] E. D. Palik und G. B. Wright, *Semiconductors and Semimetals*, Herausgeber: R. K. Willardson, A. C. Beer (Academic Press, New York, 1967).
- [101] R. O. Jones und O. Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. **61**, 689 (1989).
- [102] J. G. Mavroides, *Optical Properties of Solids*, Herausgeber F. Abelès (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972), S. 351.

-
- [103] E. Burstein, G. S. Picus, R. F. Wallis und F. Blatt, *Phys. Rev.* **113**, 15 (1959).
- [104] Y. Yafet, *Solid State Physics*, Vol. **14**, Herausgeber: F. Seitz und D. Turnbull (Academic Press, New York, 1963).
- [105] A. P. Heberle, W. W. Rühle, K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3887 (1994).
- [106] W. Hofmann, G. Denninger, H. Pascher, *Phys. Rev. B* **48**, 17035 (1993).
- [107] W.-C. Tan, J. C. Inkson und G. P. Srivastava, *Phys. Rev. B* **54**, 14623 (1996).
- [108] N. Puhlmann, A. Kirste, I. Stolpe, M. von Ortenberg, O. Tatsenko, A. Bykov, V. D. Selemir, I. M. Markevtsev und V. V. Platonov, *Physica B, im Druck* (2001).
- [109] W. S. Perlouch und L. A. Schlie, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 82 (1995).
- [110] H. Arimoto, N. Miura, R. J. Nicholas, N. J. Mason und P. J. Walker, *Phys. Rev. B* **5**, 45601 (1998).
- [111] C. Albrecht, J. H. Smet, K. von Klitzing, D. Weiss, V. Umansky und H. Schweitzer, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 147 (2001).
- [112] V. Holý, G. Springholz, M. Pinczolits, und G. Bauer, *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 356 (1999).
- [113] A. A. Darhuber, V. Holý, J. Stangl, und G. Bauer, *Appl. Phys. Lett.*, **70**, 955 (1997).
- [114] A. A. Darhuber, P. Schittenhelm, V. Holý, J. Stangl, G. Bauer, und G. Abstreiter, *Phys. Rev. B* **55**, 15652 (1997).
- [115] A. H. McDonald und D.S. Ritchie, *Phys. Rev. B* **33**, 8336 (1987).
- [116] H. Haug, S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (World Scientific, Singapore, 1990).

DANKSAGUNG

Prof. Dr. P. Vogl gilt besonders herzlichen Dank für die Möglichkeit auch an einem ungewöhnlichen Thema zu Arbeiten, für die Betreuung, Anleitung und Förderung die er mir in den zurückliegenden Jahren zukommen ließ und die Freiheiten in der Wahl der Arbeitsgebiete.

Meinen Eltern Rosina und Gottfried Strahberger die mich in jeder Weise unterstützten und förderten und dadurch einen wesentlichen Beitrag zum Gelingen dieser Arbeit leisteten.

Jutta Stapfer für die Geduld an all den Abenden/Wochenenden die ich im Büro verbrachte.

Dr. habil. Jacek Majewski für die zahllosen Diskussionen die nie Trocken waren, das Korrekturlesen, sowie für seine freundschaftliche Hilfe.

Dr. Günther Zandler der mir Freund und Ratgeber zugleich war und der durch seinen ungetrübten Blick und Humor immer für interessante Diskussionen sorgte.

Prof. Dr. J. Smoliner für die langjährige, enge und immer unkomplizierte Zusammenarbeit und seinen Humor.

Dr. Sabine Strahberger-Wagner, Dr. H.W. Wagner für all die Korrekturvorschläge.

Veronika Enter und Liane Lindner die guten Seelen des Schottky Instituts für die uneingeschränkte Hilfsbereitschaft und Unterstützung.

Dennis, Matthias, Stefan und Stefan die dafür sorgten, dass ich mich im Team wohl fühlte.