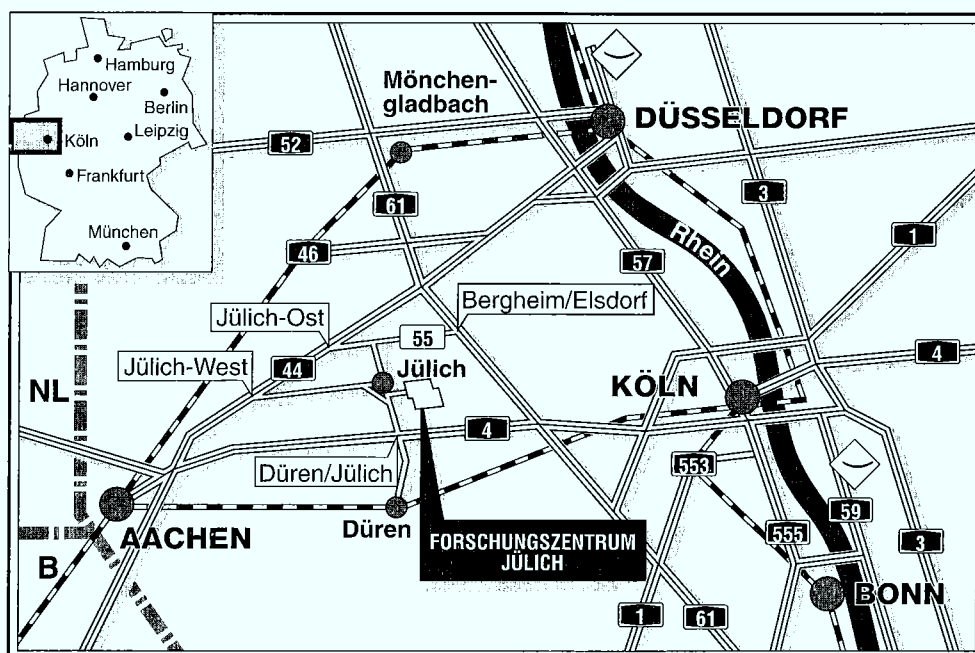


Institut für Schicht- und Ionentechnik

Quantentransport in Halbleiter-Heterostrukturen

Jens Lange



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3291

ISSN 0944-2952

Institut für Schicht- und Ionentechnik Jül-3291

D82 (Diss. RWTH Aachen)

Zu beziehen durch : Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon : 02461/61-61 02 · Telefax : 02461/61-61 03 · Telex : 833 556-70 kfa d

Quantentransport in Halbleiter-Heterostrukturen

Jens Lange

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theorie	3
2.1	Envelope Function Approximation für Heterostrukturen	3
2.1.1	EFA für flache Bänder	3
2.1.2	Elektrische und magnetische Felder	11
2.1.3	Reduzierung auf eine endliche Zahl von Bändern	12
2.1.4	Spin-Split in Heterostrukturen	13
2.1.5	Kopplung an Nebentäler	18
2.2	Grundlagen der Simulationen	20
2.2.1	Transmissionskoeffizient	25
2.3	Grenzflächenrauigkeit	28
2.4	Einfachbarrieren	31
2.5	Resonante Tunnelndioden	43
2.5.1	Quantentransport mit der Boltzmann-Gleichung?	46
2.6	Doppeltopfstrukturen	49
2.7	Die Kuboformel im Einteilchenbild	52
2.7.1	Die Kuboformel für zwei Dimensionen	55
2.7.2	Die Kuboformel in einer Dimension	57
2.8	Leitfähigkeit in zweidimensionalen Elektronengasen	59
2.8.1	Der Shubnikov-de Haas-Effekt bei größeren Magnetfeldern	67
2.8.2	Shubnikov-de Haas-Effekt bei kleinen Magnetfeldern	68
2.8.3	Der Quanten-Hall-Effekt	70
3	Experimente und Vergleich mit der Theorie	74
3.1	Einfachbarrieren	75
3.2	Grenzflächenrauigkeit und Γ -X-Transfer in RTDs	82
3.3	Magnetotransportmessungen an Quasidoppeltopfstrukturen	91
3.4	Spin-Split in zweidimensionalen Elektronengasen	96
3.5	Punktkontakte mit Spin-Split	101
3.6	Zusammenfassung	108

Kapitel 1

Einleitung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit einigen Aspekten des Quantentransports in Halbleiterheterostrukturen, eines Arbeitsbereichs, der aufgrund der zunehmenden Miniaturisierung der in der Computerindustrie Verwendung findenden Bauelemente in Zukunft vielleicht an (kommerzieller) Bedeutung gewinnen wird. Der Quantentransport ist heute bei weitem kein abgeschlossenes Arbeitsgebiet. Mit der Verbesserung von Wachstumsmethoden und der Entwicklung von Abscheideverfahren für unterschiedliche Halbleiter, die in sehr dünnen Schichten aufeinander gewachsen werden können (Heterostrukturen), haben sich einige quantenmechanische Effekte eingestellt, die zu erklären aufgrund der vorhandenen vielen Teilchen nur aufgrund von geschickten Näherungen gelingt. Eine dieser Näherungen ist das Einteilchenbild eines Elektrons, welches sich in einem statischen Gitter von Atomen bewegt, wobei die möglichen Gittervibrationen in Gestalt von Phononen Eingang in Streueffekte finden. Um die auftretenden quantenmechanischen Effekte vorherzusagen bzw. richtig zu interpretieren, sind Bauelementsimulationen unumgänglich. Um diese mit dem geringst möglichen Aufwand (oder überhaupt) durchführen zu können, muß man, genauso wie für Transportsimulationen in Volumenmaterialien, das Kristallpotential der Gitteratome versuchen zu eliminieren. Im ersten Abschnitt wird daher die in Volumenmaterialien sehr erfolgreiche Effektivmasstheorie, auch Envelope Function Approximation genannt, in der das Kristallpotential nur noch über effektive Parameter in das Problem eingeht, auf den Fall der Heterostrukturen verallgemeinert. Neben Formeln für ortsabhängige effektive Massen und effektive g -Faktoren erhalten wir auch eine Spin-Bahn-Kopplung, die Beiträge von den reinen Grenzflächen enthält, also in Volumenmaterialien in dieser Form nicht auftreten kann. Desweiteren erhält man eine elastische, den parallelen Impuls erhaltende Kopplung an den Grenzflächen zwischen den Zuständen im Zentrum der Brillouinzone und den in Wachstumsrichtung gelegenen Nebenminima in der Bandstruktur.

Im Anschluß hieran wird eine allgemeine Theorie zur Berechnung von Strömen dargestellt, die dann in späteren Abschnitten auf Einfachbarrieren, Resonante Tunnelioden, Dreifachbarrieren (Doppeltöpfe) und Punktkontakte angewandt werden wird. Insbesondere wird hier der Einfluß von Grenzflächenrauigkeit untersucht, deren Effekte sich als bisher im vertikalen Transport (parallel zur Wachstumsrichtung) als

unterschätzt darstellen werden. Als nächstes wird die Kuboformel ins Einteilchenbild „übersetzt“ und zur Beschreibung von diffusivem Transport in zweidimensionalen Elektronengasen mit Magnetfeld verwendet. Hier wird dann die im ersten Abschnitt hergeleitete Spin-Bahn-Wechselwirkung zusätzlich berücksichtigt und ihr Einfluß auf den Shubnikov-de Haas Effekt berechnet. Desweiteren ergibt sich hieraus eine mögliche Erklärung des Quanten-Hall-Effektes auch in Anwesenheit der Spin-Bahn-Wechselwirkung ohne die Notwendigkeit, auf ideal leitende Randkanäle zurückgreifen zu müssen. Um die experimentelle Verifikation einiger der in dieser Arbeit erhaltenen Formel geht es dann im letzten Teil dieser Arbeit.

Kapitel 2

Theorie

2.1 Envelope Function Approximation für Heterostrukturen

In diesem Abschnitt wird eine neue Herleitung der Envelope Function Approximation (EFA) für Heterostrukturen vorgestellt. Die EFA bildet die Grundlage für die meisten Transportsimulationen in Heterostrukturen und Volumenmaterialien, insbesondere solcher Simulationen, die Streuprozesse beinhalten, und bedarf daher einer soliden Begründung. Von einigen Autoren [1, 2, 3, 4] ist die Anwendbarkeit der EFA im Falle von Heterostrukturen angezweifelt worden, da das (atomare) Potential in einer Heterostruktur sich auf der Distanz einer Gitterkonstanten stark ändert und obige Autoren der Ansicht sind, daß die EFA generell nur bei langsam veränderlichen Potentialen anwendbar ist. Ein weiterer Punkt der Kritik [1, 2] ist, daß man in der bisher üblichen Herleitung der EFA die Bandkanten-Blochfunktionen in beiden Halbleitermaterialien als gleich hat ansetzen müssen. In der hier vorgestellten Herleitung erweisen sich beide Einwände als überwindbar. Um konkret zu sein beziehen sich die folgenden Überlegungen auf Halbleiter, die in der Zinkblendestruktur kristallisieren (III-V) mit AlAs/GaAs als Modellsystem. Eine Übertragung auf andere Kristallstrukturen ist einfach.

2.1.1 EFA für flache Bänder

In der folgenden Abbildung (2.1) ist ein Beispiel für eine Heterostruktur, für die die Theorie entwickelt werden soll, dargestellt. Ein Material erhält den Kennbuchstaben (A), das andere den Buchstaben (B). Alle Formeln kann man auch auf beliebig viele Halbleiter verallgemeinern. Wir entwickeln die Blochfunktionen von Material (B) in Blochfunktionen von Material (A) (der Exponentialfaktor sei unterdrückt)

$$u_{\vec{k}k_0}^{(B)}(\vec{r}) = \sum_m c_{lm} u_{m\vec{k}_0}^{(A)}(\vec{r}) \quad (2.1)$$

(die Summe geht über alle Bänder). Die Entwicklungskoeffizienten sind gegeben durch

$$c_{lm} = \frac{1}{\Omega} \langle u_{m\vec{k}_0}^{(A)} | u_{\vec{k}k_0}^{(B)} \rangle_{\Omega} \quad (2.2)$$

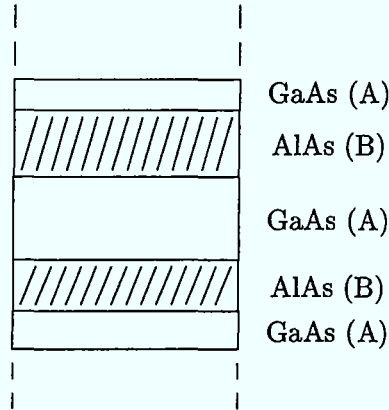


Abbildung 2.1: Beispiel für eine Heterostruktur

Ω bezeichnet das Volumen der Einheitszelle. Die c_{lm} bilden eine unitäre Matrix und sind offenbar nur dann von Null verschieden, wenn die Blochfunktionen von Material (A) und (B) zur selben Darstellung der Punkt-/Raumgruppe gehört. An einem Bandstrukturdiagramm (oder in den zugehörigen Tabellen) [5] können wir sehen, daß der typische kleinste Abstand zwischen Bändern gleicher Symmetrie an Punkten hoher Symmetrie in der Brillouinzone in der Größenordnung von 5-15eV liegt. Zum Abschätzen der Größenordnung der Entwicklungskoeffizienten c_{lm} schreiben wir den Hamiltonoperator von Material (B) als

$$H^{(B)} = H^{(A)} + (V_{\text{Lat}}^{(B)} - V_{\text{Lat}}^{(A)}) \quad (2.3)$$

und sehen den zweiten Term $\Delta V_{\text{Lat}} = V_{\text{Lat}}^{(B)} - V_{\text{Lat}}^{(A)}$ als Störung an. Erste Ordnung Störungstheorie führt zu ($l \neq m$)

$$\epsilon_l^{(B)} = \epsilon_l^{(A)} + \langle \psi_l^{(B)} | \Delta V_{\text{Lat}} | \psi_l^{(A)} \rangle \quad (2.4)$$

Eine nähere Betrachtung der atomaren Pseudopotentialdifferenzen von Ga und Al [6] zeigt, daß die nichtdiagonalen Matrixelemente von ΔV_{Lat} im Falle von GaAs/AlAs 2eV nicht übersteigen können. Die Skalarprodukte von einander entsprechenden Blochfunktionen gleicher Symmetrie werden daher kaum von Eins abweichen. Noch geringer wird diese Abweichung im Falle von GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ausfallen. Die Blochfunktionen korrespondierender Bänder stimmen daher fast überein. Einige Beträge von Skalarprodukten von Blochfunktionen des Systems GaAs/AlAs sind in den Tabellen dargestellt. Die Rechnungen sind mit ab initio Pseudopotentialen von P. Richard[7] durchgeführt worden. Die Spin-Bahn-Wechselwirkung ist hierbei vernachlässigt. Die Zwei ist hierbei im Falle von Blochfunktionen mit Γ_1 -Symmetrie (entspricht Γ_6 in Doppelgruppennotation) der üblichen Leitungsbandblochfunktion zugeordnet, die Eins dem nächsten Zustand mit dieser Symmetrie zu tieferen Energien, die Drei entsprechend zu höheren Energien.

2.1. ENVELOPE FUNCTION APPROXIMATION FÜR HETEROSTRUKTUREN 5

AlAs/ GaAs	1	2	3
1	0.9984	0.03631	0.03652
2	0.03631	0.9824	0.1726
3	0.03652	0.1726	0.9822
$\sum ^2$	0.9995	0.9962	0.9958

Tabelle 2.1: Skalarprodukte von verschiedenen Blochfunktionen mit Γ_1 -Symmetrie (entspricht Γ_6 in Doppelgruppennotation) von GaAs und AlAs. Das (2,2)-Element gehört zum Leitungsband am Γ -Punkt.

AlAs/ GaAs	1	2	3
1	0.9951	0.07602	0.01080
2	0.07602	0.9968	0.00335
3	0.01080	0.00335	0.9920
$\sum ^2$	0.9961	0.9994	0.9842

Tabelle 2.2: Skalarprodukte von verschiedenen Blochfunktionen mit Γ_{15} -Symmetrie (entspricht Γ_7 und Γ_8 in Doppelgruppennotation) von GaAs und AlAs. Das (2,2)-Element gehört zum Valenzband am Γ -Punkt.

Bei Blochfunktionen mit Γ_{15} -Symmetrie (entspricht Γ_7 und Γ_8 in Doppelgruppennotation) ist die Zwei dem Valenzband zugeordnet. Es sind nur die Skalarprodukte von je einer Funktion des Unterraums dargestellt, da die anderen Skalarprodukte aus Symmetriegründen entweder verschwinden oder gleich den entsprechenden Einträgen in der Tabelle sind. Ähnliche Schlußfolgerungen sollten auch für andere (nahezu) gitterangepaßte Materialsysteme gelten, zum Beispiel GaSb/AlSb oder InGaAs/InAlAs. Im weiteren werden wir nun Effektivmassengleichungen für die elektronischen Zustände der Heterostruktur herleiten. Den Ausgangspunkt der Analyse bildet der Hamiltonoperator

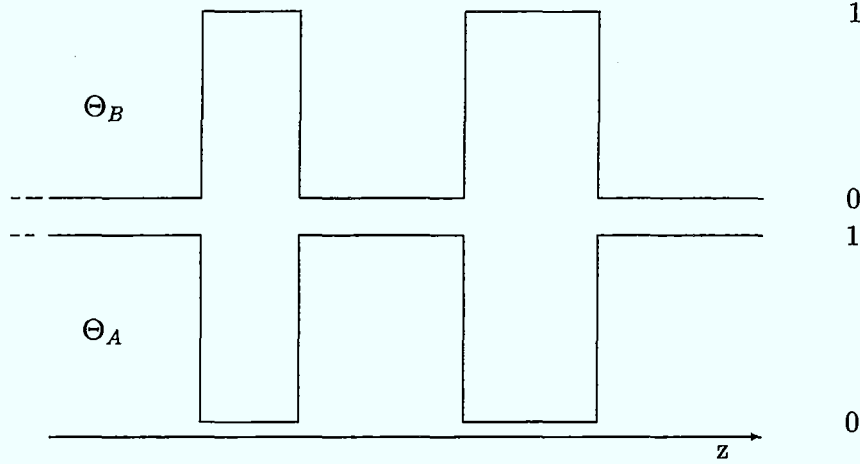
$$\Theta_{A,B}(z)$$

$\Theta_{A,B}(z)$ ist 1 in Material (A,B) und 0 sonst, $H^{(A,B)}$ ist der Bulk-Hamiltonoperator von Material (A,B)

$$H_{(A,B)} = \frac{-\hbar^2 \Delta}{2m_0} + V_{(A,B)} + \frac{\hbar^2}{i4m_0^2 c^2} \left(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V_{(A,B)} \right) \cdot \vec{\nabla} + H_{\text{rel}} \quad (2.6)$$

(H_{rel} steht für weitere relativistische Korrekturen wie den Darwinterm etc.).

Es liegt auf der Hand, daß die wirklichen/idealen Grenzflächen nicht so scharf sind wie hier angenommen, aber für uns reicht es, daß dies nur auf Längenskalen verletzt wird auf denen sich die Envelopen nur wenig ändern. Zur Modellierung der Grenzflächen können wir auch Fehlerfunktionen (mit kleinen Standardabweichungen) anstelle von Stufenfunktionen wählen. Dies könnte ein gutes Modell sein insbesondere für Heterostrukturen mit Interdiffusion an den Grenzflächen (virtual crystal approximation)



oder ein Modell für die gemittelte Grenzfläche in der Anwesenheit von Grenzflächenrauigkeit auf kurzen Skalen (siehe Abschnitt 2.3). Im letzten Fall beträgt die Standardabweichung typischerweise eine Monolage (die halbe Gitterkonstante) im AlAs/GaAs-System [8, 9, 10, 11]. In der Röntgenstreuung ist die Beschreibung der Schärfe einer Grenzfläche mittels Fehlerfunktionen eine Standardprozedur[11]. Desweiteren kann man mit $\Theta_{A,B}(z)$ einen kontinuierlichen Übergang („Grading“) zwischen zwei Halbleitern A und B beschreiben, der über eine Distanz stattfindet die groß ist im Vergleich zur Gitterkonstanten. Hierdurch modifiziert werden auf leicht nachvollziehbarem Weg lediglich die (endgültigen) Formeln für den Rashba-Kopplungskoeffizienten und den elastischen Intervalley-Kopplungskoeffizienten (letzterer verschwindet für diesen Fall). Alle Felder, die durch den Heteroübergang entstehen (Bandverbiegung, Ladungstransfer) stellen wir uns zu einem äußeren Potential gehörig vor, welches später berücksichtigt werden wird. In den allermeisten Fällen liegen die elektronischen Zustände für die man sich interessiert in der Nähe einer der Bandkanten eines der Materialien, aus denen die Heterostruktur aufgebaut ist. Für dieses Material wählen wir den Buchstaben (A). In unserem Modellsystem entspricht dies dem GaAs. Anstelle von Blochfunktionen wählen wir als Basis Luttinger-Kohn Basisfunktionen [15]

$$\phi_{j\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}} e^{i\vec{k}_0\vec{r}} u_{j\vec{k}_0}^{(A)}(\vec{r}) \quad (2.7)$$

die ebenfalls orthonormal und vollständig sind ($\vec{k}_0$ ist der feste k -Vektor des uns interessierenden Punktes in der Brillouinzone, j und $\vec{k}$ sind variabel). Die $\vec{k}$ -Werte beschränken sich auf die erste Brillouinzone. Das ganze Problem kann prinzipiell innerhalb dieses Basissystems gelöst werden. Die Orthogonalität ist eine einfache Folge des Transformationsverhaltens unter Translationen und der Orthogonalität der $u_{j\vec{k}_0}^{(A)}(\vec{r})$. Die Vollständigkeit resultiert aus dem Umstand, daß jede gitterperiodische Funktion nach den u 's entwickelt werden kann. Falls Material (B) ein indirekter Halbleiter ist und die Nebentäler wichtig sind in der Bestimmung der elektronischen Eigenschaften der Heterostruktur, ist es besser die erste Brillouinzone in eine innere und 6 (X-valleys) oder 8 (L-valleys)

2.1. ENVELOPE FUNCTION APPROXIMATION FÜR HETEROSTRUKTUREN 7

äußere Bereiche zu unterteilen und Luttinger-Kohn Basisfunktionen von Material (A) im inneren Bereich zu verwenden und (X-Punkt oder L-Punkt) Luttinger-Kohn Basisfunktionen von Material (B) in den äußeren Bereichen. Dieses Funktionensystem ist ebenfalls orthogonal und vollständig. Durch die Verwendung dieses Funktionensystems verringert sich der mathematische Aufwand beträchtlich während die Interpretierbarkeit der Daten steigt. Für den Rest dieses Abschnittes wird nur Transport am Γ -Punkt untersucht. Dies ist völlig ausreichend wenn beide Materialien direkte Halbleiter sind. Elastische Kopplung an die Nebentäler wird in Abschnitt(2.1.5) diskutiert werden. Für weitere Rechnungen brauchen wir ein Theorem, welches uns helfen wird Matrixelemente eines Produktes einer allgemeinen Funktion f und einer gitterperiodischen Funktion g_{lat} zwischen Luttinger-Kohn Funktionen ($\vec{k}_0 = 0$) zu bestimmen.

$$\langle \phi_{i\vec{k}}(\vec{r}) | f(\vec{r}) g_{\text{lat}}(\vec{r}) | \phi_{i\vec{k}'}(\vec{r}) \rangle = \sum_{\vec{G}} \frac{1}{\sqrt{V}} f(\vec{k} - \vec{k}' + \vec{G}) \frac{1}{\Omega} \langle u_{i0}^{(A)} | e^{i\vec{G}\vec{r}} g_{\text{lat}}(\vec{r}) | u_{i0}^{(A)} \rangle_{\Omega}$$

$\vec{G}$ durchläuft hier alle Vektoren des reziproken Gitters. Dieses Theorem kann man beweisen, indem man f in eine Fourierreihe entwickelt (wir verwenden ein endliches Volumen) und von der Tatsache Gebrauch macht, daß das Produkt zweier gitterperiodischer Funktionen wieder eine gitterperiodische Funktion ist, die man nach den u 's entwickeln kann. Wir machen den allgemeinen Ansatz ($\vec{k}_0 = 0$)

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_l \sum_{\vec{k}'}^{1,\text{BZ}} \Psi_l(\vec{k}') \phi_{i\vec{k}'}(\vec{r}) = \sum_l \Psi_l(\vec{r}) u_{i0}^{(A)}(\vec{r}) \quad (2.8)$$

Im zweiten Schritt haben wir die Envelope $\Psi_l(\vec{r})$ der l -ten Bandkante eingeführt. An dieser Stelle sollte betont werden, daß dies keine Näherung darstellt. Die Gesamtwellenfunktion und ihre Ableitung sollten stetig sein, ansonsten haben die Differentialoperatoren in der Schrödingergleichung nur einen sehr eingeschränkten Sinn. Die Stetigkeit der Gesamtwellenfunktion kann man offenbar durch die Forderung nach Stetigkeit aller Envelopen erreichen. Die passenden Anschlußbedingungen für die Ableitungen der Envelopen erhält man am besten durch eine nähere Untersuchung der Differentialgleichung, die wir herleiten werden. Wir multiplizieren die Schrödingergleichung mit $\phi_{i\vec{k}}^*(\vec{r})$, integrieren über $\vec{r}$, verwenden das obige Theorem und erhalten die Matrixelemente des Hamiltonoperators der im Raum der Envelopen wirkt in $\vec{k}$ -Darstellung:

(2.9)

Wir haben Gleichung (2.1) verwendet und

$$H^{(A,B)} \left| e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{j\vec{k}}^{(A,B)}(\vec{r}) \right\rangle = \mathcal{E}_j^{(A,B)}(\vec{k}) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{j\vec{k}}^{(A,B)}(\vec{r}) \right\rangle$$

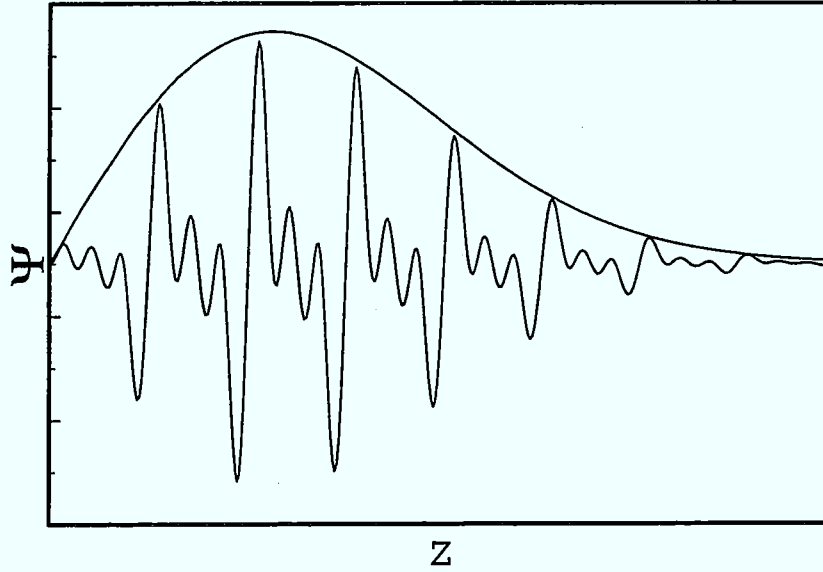


Abbildung 2.2: Gesamtwellenfunktion einer Bandkante und Einhüllende (Envelope)

$$H(\vec{\nabla})e^{i\vec{k}\vec{r}}f(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}H(\vec{\nabla} + i\vec{k})f(\vec{r})$$

sowie folgende Abkürzungen eingeführt

$$\begin{aligned}\vec{\pi}_{il}^{(A,B)} &= \frac{1}{\Omega} \langle u_{i\vec{0}}^{(A)} | \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V_{(A,B)}) | u_{i\vec{0}}^{(A)} \rangle_{\Omega} \\ U_{ij}(\vec{G}) &= \frac{1}{\Omega} \langle u_{i\vec{0}}^{(A)} | e^{i\vec{G}\vec{r}} | u_{j\vec{0}}^{(A)} \rangle_{\Omega}\end{aligned}\quad (2.10)$$

Der erste Term in Gleichung (2.9) stellt den Bulk- $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Hamiltonoperator von Material (A) dar. Wir führen eine Fourierrücktransformation mit $\vec{k}$ -Werten aus der ersten Brillouinzone durch und erhalten den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned}H_{il} = & \delta_{il} \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_0} + \mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{0}) \right) + \frac{\hbar \vec{\nabla}}{im_0} \vec{\pi}_{il}^{(A)} + \sum_{\vec{G}} \Theta_{\vec{B}}^{\vec{G}}(z) \left\{ \sum_{j,m} c_{jm} c_{jl}^* \mathcal{E}_j^{(B)}(\vec{0}) U_{im}(\vec{G}) \right. \\ & \left. - \mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{0}) U_{il}(\vec{G}) + \frac{\hbar \vec{\nabla}}{im_0} \sum_j U_{ij}(\vec{G}) (\vec{\pi}_{jl}^{(B)} - \vec{\pi}_{jl}^{(A)}) \right\}\end{aligned}\quad (2.11)$$

2.1. ENVELOPE FUNCTION APPROXIMATION FÜR HETEROSTRUKTUREN 9

mit den Abkürzungen

$$\Theta_B(\vec{k} + \vec{G}) = \delta_{k_x + G_x, 0} \delta_{k_y + G_y, 0} \Theta_B(k_z + G_z) = \delta_{k_x, 0} \delta_{k_y, 0} \delta_{G_x, 0} \delta_{G_y, 0} \Theta_B(k_z + G_z) \quad (2.12)$$

Bis hier haben wir keine Näherungen durchgeführt und das Differentialgleichungssystem ist äquivalent zur ursprünglichen Schrödingergleichung. Alle Differentialoperatoren sind nun beschränkte Operatoren. Der ($\vec{G} = 0$)-Term in Formel (2.11) lautet

$$\begin{aligned} H_{il}^{(\vec{G}=0)} &= \delta_{il} \left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_0} + \mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{0}) \right) + \frac{\hbar}{im_0} \vec{\nabla} \cdot \vec{\pi}_{il}^{(A)} \\ &+ \Theta_B^{\vec{0}}(z) \left\{ \sum_j c_{ji} c_{jl}^* \mathcal{E}_j^{(B)}(\vec{0}) - \delta_{il} \mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{0}) + \frac{\hbar}{im_0} \vec{\nabla} \cdot (\vec{\pi}_{il}^{(B)} - \vec{\pi}_{il}^{(A)}) \right\} \end{aligned} \quad (2.13)$$

$\Theta_B^{\vec{0}}(z)$ ist der langwellige Anteil von $\Theta_B(z)$, da es nur die Fourierkoeffizienten aus der ersten Brillouinzone enthält. Dieser Faktor wird für viele Modelle der Grenzflächen ähnliche Werte annehmen. Vernachlässigt man alle Terme mit $\vec{G} \neq 0$ und die Spin-Bahn-Kopplung in $\vec{\pi}_{(B)}$ und $\vec{\pi}_{(A)}$, ersetzt $\Theta_B^{\vec{0}}(z)$ durch $\Theta_B(z)$, setzt $c_{ij} = \delta_{ij}$ und berücksichtigt man nur eine endliche Anzahl von Bändern, so gelangt man zur üblichen EFA für Heterostrukturen wie sie von Bastard auf anderem Wege hergeleitet worden ist [1].

Zuerst diskutieren wir den Einfluß der $\vec{G} \neq 0$ -Terme. Wegen

$$\Theta_B(\vec{k} + \vec{G}) = \delta_{k_x + G_x, 0} \delta_{k_y + G_y, 0} \Theta_B(k_z + G_z) = \delta_{k_x, 0} \delta_{k_y, 0} \delta_{G_x, 0} \delta_{G_y, 0} \Theta_B(k_z + G_z)$$

(der Einfachheit halber wählen wir dieselbe Bezeichnung für den k_z -abhängigen Fourierkoeffizient) brauchen wir nur über Vektoren des reziproken Gitters summieren mit $G_z \neq 0$. Um konkret zu sein diskutieren wir den generischen Fall eines einzelnen Heteroübergangs innerhalb des Stufenfunktionsmodells der Grenzfläche. Der Übergang befinde sich bei $z = 0$. Die Fourierkoeffizienten $\Theta_B(k_z + G_z)$ sind

$$\Theta_B^{G_z}(z) \approx \frac{1}{iG_z} \delta(z) + \frac{1}{G_z^2} \left(\frac{d}{dz} \delta(z) \right) + \dots = \frac{1}{iG_z} \delta(z) - \frac{1}{G_z^2} \delta(z) \frac{d}{dz} + \dots \quad (2.14)$$

Wir lassen den Beitrag bei $L/2$ fort, da er zu einer künstlichen Grenzfläche gehört, die durch die periodischen Randbedingungen entsteht. Da $|k_z| < |G_z|$ können wir die Fourierkoeffizienten in geometrische Reihen entwickeln und nur die ersten Terme beibehalten. Eine Fourierrücktransformation mit k_z -Werten aus der ersten Brillouinzone liefert

Die δ -Funktionen entstehen aus der Vollständigkeitsrelation der Exponentialfunktionen innerhalb eines Raumes von Funktionen, die nur Fourierkoeffizienten aus der ersten

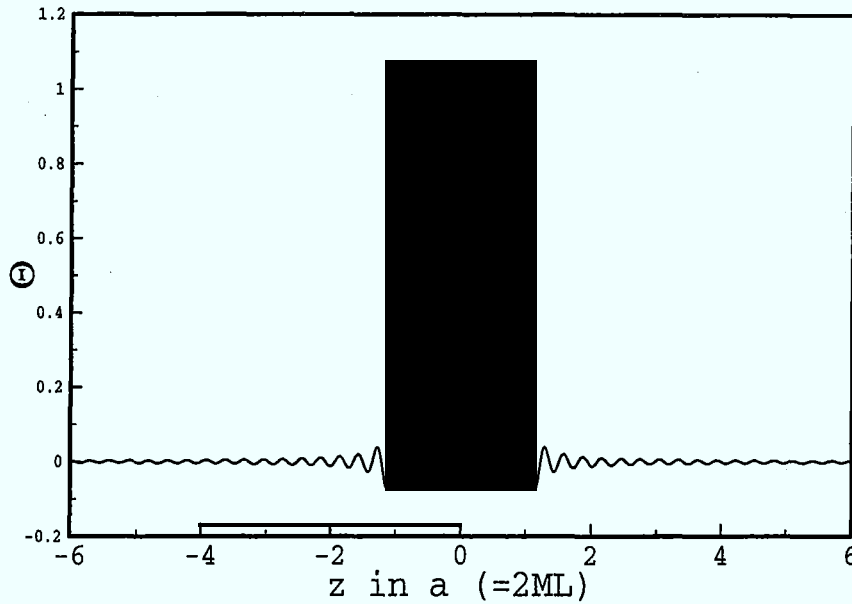


Abbildung 2.3: Θ_B^0 für eine 4 Monolagen dicke Barriere; in GaAs ist $1ML=0.283nm=a/2$

Brillouinzone enthalten. In Wirklichkeit ist ihr Träger nicht nur ein Punkt sondern im wesentlichen eine Raumregion mit der Ausdehnung einer Gitterkonstanten, aber ihre Wirkung auf Funktionen, die nur Fourierkoeffizienten aus der ersten Brillouinzone enthalten ist exakt die Gleiche wie die der δ -Distribution. Da es sich herausstellen wird, daß die ersten Ableitungen der Envelopen an den Grenzflächen unstetig sind, muß man eigentlich mit den obigen Umformungen sorgfältiger umgehen. Hier vollziehen wir aber nur heuristische Überlegungen. Wir schließen aus diesen Überlegungen, daß alle $G_z \neq 0$ -Terme zu Anschlußbedingungen zwischen den Envelopen und ihren Ableitungen (erster Ordnung) an den Grenzflächen führen. Man sollte jedoch im Kopf behalten, daß diese Fourierkoeffizienten nur deshalb von Null verschieden sind, weil wir eine (unrealistische) Änderung des Potentials auf einer Größenskala kleiner als die Gitterkonstante angenommen haben. Wählen wir ein Fehlerfunktionsmodell für den Heteroübergang, so erhält jeder Koeffizient in Gleichung (2.14) einen Faktor $e^{-\frac{1}{2}(G_z\sigma)^2}$ für kleine σ ($\sigma < \frac{a}{2\pi}$, σ ist die Standardabweichung) und kleine G_z . Für größerer σ (G_z) verschwindet die durch $\Theta_B(z)$ verursachte Kopplung. Um die Größenordnung der Kopplung abzuschätzen sollte man im Hinterkopf behalten, daß die Multiplikationsoperatoren $e^{i\vec{G}\vec{r}}$ unitär sind und deshalb die $U_{ij}^0(\vec{G})$ eine unitäre Matrix bilden mit $|U_{ij}^0(\vec{G})| \leq 1$ (Gleichung (2.10)). Da eine passende Wahl für σ in der Größenordnung einer Monolage

liegt (vgl. Abschnitt (3.1)) können wir die $\vec{G} \neq 0$ -Terme vernachlässigen. Im weiteren sei der Einfluß von $\Theta_B^0(z)$ diskutiert. Als Distribution gesehen ist die Wirkung von $\Theta_B^0(z)$ auf Funktionen mit Fourierkoeffizienten aus der ersten Brillouinzone gleich der Wirkung von $\Theta_B(z)$. Wir dürfen daher $\Theta_B^0(z)$ durch $\Theta_B(z)$ ersetzen solange wir garantieren können, daß die auf diese Art gewonnen Lösungen nur Fourierkoeffizienten aus der ersten Brillouinzone enthalten (mit der Ersetzung von $\Theta_B^0(z)$ durch $\Theta_B(z)$ haben wir eine Quelle für kleine Wellenlängen in der Differentialgleichung eingeführt). In der Praxis zeigt es sich immer, daß es sich rechtfertigen läßt $\Theta_B^0(z)$ durch $\Theta_B(z)$ zu ersetzen, weil der kinetische Energieterm ($|\frac{\hbar^2 \Delta}{2m^*}|$, m^* ist die effektive Masse) innerhalb einer gegebenen Schicht normalerweise beschränkt ist durch den Bandoffset, wohingegen er am Rand der ersten Brillouinzone weit größere Werte erreicht (bei festgehaltener effektiver Masse). Dies zeigt uns, daß nur Fourierkoeffizienten aus dem Inneren der ersten Brillouinzone wirklich wichtig sind.

2.1.2 Elektrische und magnetische Felder

Da der Hamiltonoperator (2.5) nichts anderes als der Hamiltonoperator der Pauligleichung ist mit der Spin-Bahnkopplung als weiterer (relativistischen) Korrektur höherer Ordnung, führen wir äußere (statische) magnetische und elektrische Felder auf die gleiche Art ein wie in der Pauligleichung (minimale Kopplung). Dies führt zu folgenden Zusatztermen (wir verwenden aus Platzgründen die Coulomb-Eichung, die Ladung ist in das Potential ϕ hereingezogen)

$$\begin{aligned} \Delta H = & -\frac{e\hbar}{2m_0c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}(\vec{r}) - \frac{\hbar e}{im_0c} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} - \frac{e\hbar^2}{i4m_0^2c^3} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V_{(A)}) \cdot \vec{A}(\vec{r}) + \frac{e^2}{2m_0c^2} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \vec{A}(\vec{r}) \\ & - \Theta_B(z) \frac{e\hbar^2}{i4m_0^2c^3} (\vec{\sigma} \times (\vec{\nabla} V_{(B)} - \vec{\nabla} V_{(A)})) \cdot \vec{A}(\vec{r}) + \phi(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{i4m_0^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla} \phi(\vec{r})) \end{aligned}$$

Wir erhalten den Hamiltonoperator, der im Raum der Envelopen wirkt, auf die gleiche Weise wie zuvor mit dem Zusatzterm

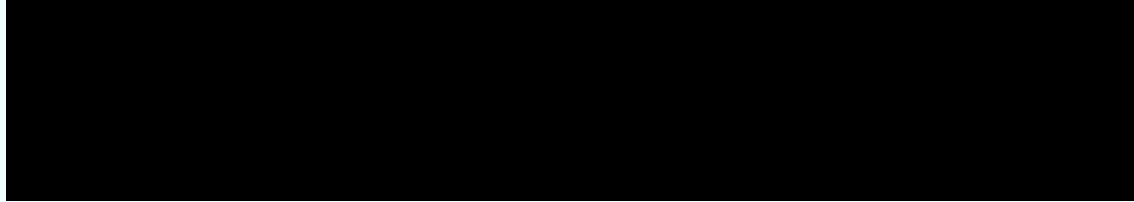
$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{G}} U_{il}(\vec{G}) \left\{ -\frac{\hbar e}{im_0c} \vec{A}^{\vec{G}}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} + \frac{e^2}{2m_0c^2} \vec{A}^{-\vec{G}}(\vec{r}) \cdot \vec{A}^{\vec{G}}(\vec{r}) + \phi^{\vec{G}}(\vec{r}) \right\} \\ & + \sum_{\vec{G}} \left\{ -\frac{e\hbar}{2m_0c} \vec{\sigma}_{il}(\vec{G}) \cdot \vec{B}^{\vec{G}}(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{i4m_0^2c^2} (\vec{\sigma}_{il}(\vec{G}) \times (\vec{\nabla} \phi)^{\vec{G}}(\vec{r})) \right\} \\ & - \frac{e}{m_0c} \sum_{j, \vec{G}} U_{ij}(\vec{G}) \vec{A}^{\vec{G}}(\vec{r}) \cdot \vec{\pi}_{jl}^{(A)} - \frac{e}{m_0c} \sum_{j, \vec{G}} U_{ij}(\vec{G}) \Theta_B^{-\vec{G}}(z) \vec{A}^{\vec{G}}(\vec{r}) \cdot (\vec{\pi}_{jl}^{(B)} - \vec{\pi}_{jl}^{(A)}) \end{aligned}$$

Wir haben zur Abkürzung eingeführt

$$\vec{\sigma}_{ij}(\vec{G}) = \frac{1}{\Omega} \langle u_{i0}^{(A)} | e^{i\vec{G}\vec{r}} \vec{\sigma} | u_{j0}^{(A)} \rangle_{\Omega}$$

und haben ähnliche Definitionen wie Gleichung (2.12) für die Definition von $\vec{B}^{\vec{G}}$ und $\vec{A}^{\vec{G}}$ etc. verwendet. In der Praxis ändern sich magnetische Felder nur über Längenbereiche,

die groß sind im Vergleich zur Gitterkonstanten. Deshalb ist nur der $\vec{G} = 0$ -Term wichtig. Dies ist nicht unbedingt richtig für elektrische Potentiale, aber in der Praxis sind die Fourierkoeffizienten, die nicht zur ersten Brillouinzone gehören, äußerst klein, deswegen ist auch der Spin-Bahn-Kopplungsterm der von dem äußeren Potential herrührt verschwindend klein im Vergleich zu demjenigen durch die atomaren Potentiale. Wir vernachlässigen alle Terme in ΔH_{il} mit $\vec{G} \neq 0$, führen die Abkürzung $\vec{D} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}^0(\vec{r})$ ein und erhalten den Hamiltonoperator



Dieser läßt sich schreiben als

$$H = H_0 + W \quad (2.15)$$

wobei H_0 alle Diagonalelemente enthält.

2.1.3 Reduzierung auf eine endliche Zahl von Bändern

Im folgenden beschreiben wir, wie man einen effektiven Hamiltonoperator konstruieren kann, der uns erlaubt, mit einer endlichen Zahl von Bändern weiterzurechnen. Wir führen einen Projektor P ein, der auf den Unterraum projiziert für den wir uns interessieren, und den Projektor Q , der auf das orthogonale Komplement projiziert ($Q = 1 - P$), daß heißt auf die Remote-Bands. Wir wirken mit diesen Projektoren auf die Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator (2.15)

$$\begin{aligned} PH_0P\Psi + PWP\Psi + PWQ\Psi &= EP\Psi \\ QH_0Q\Psi + QWQ\Psi + QWP\Psi &= EQ\Psi \end{aligned}$$

und erhalten die exakte und geschlossene Gleichung für die Komponenten von Ψ in unserem Unterraum

$$PH_0(P\Psi) + PW(P\Psi) + PWQ \frac{1}{E - Q(H_0 + W)Q} QW(P\Psi) = E(P\Psi)$$

Dieser effektive Hamiltonoperator wirkt nur in unserem Unterraum. Wir haben angenommen, daß die Resolvente, die in obiger Gleichung auftaucht, existiert (wenn die Abstände der Energie E zu den Bandkantenenergien groß genug sind, dann existiert diese Resolvente definitiv). Bis zur zweiten Ordnung in W erhalten wir

$$PH_0(P\Psi) + PW(P\Psi) + PWQ \frac{1}{E - QH_0Q} QW(P\Psi) = E(P\Psi) \quad (2.16)$$

daß heißt

$$W \rightarrow PWP + PWQ \frac{1}{E - QH_0Q} QWP$$

Innerhalb dieser Näherung wird die Wechselwirkung in unserem Unterraum exakt behandelt, während die Kopplung zwischen den Remote-Bands vernachlässigt wird. Diese ist eine gute Näherung solange die Matrixelemente QWQ klein sind im Vergleich zu den (diagonalen) Elementen von $Q(E - H_0)Q$ (dies sind im wesentlichen die Abstände zu den Bandkantenenergien der Remote-Bands). Manchmal wird man gezwungen sein, den Unterraum, in dem die Wechselwirkung exakt behandelt wird, um die Remote-Bands zu erweitern, die energetisch am nächsten liegen, um eine größere Genauigkeit zu erreichen. Es sei betont, daß wir nicht die Kopplung an die Remote-Bands auf die zweite Ordnung in W beschränkt haben (eine störungstheoretische Behandlung von Gleichung (2.16) würde die Kopplung an die Remote-Bands in allen Ordnungen liefern). Die größten Elemente von QWQ stammen von der $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Wechselwirkung die am Rand der ersten Brillouinzone in der Größenordnung von 10eV liegt. Um die elektronischen Zustände korrekt zu beschreiben, wenn Blochwellen des Zonenrandes eine entscheidende Bedeutung spielen (Γ -X-mixing), müßten wir mit allen Bändern rechnen, die innerhalb einer energetischen Distanz von einigen 100eV liegen. In Abschnitt (2.1.5) werden wir eine Möglichkeit vorstellen, die uns erlaubt, mit weniger Bandkanten zu rechnen, als wir in der obigen Basis brauchen würden, wenn die Kopplung an Nebentäler wichtig ist. Eine weitere Verbesserung der obigen Formel kann man erreichen, wenn man die Remote-Bands in nahe (Q_n) und ferne (Q_f , $Q = Q_n + Q_f$) unterteilt und die nächste Ordnung in W im Unterraum der nahen Remote-Bands beibehält

$$\begin{aligned} W \rightarrow & PWP + PWQ \frac{1}{E - QH_0Q} QWP \\ & + PWQ_n \frac{1}{E - Q_n H_0 Q_n} Q_n W Q_n \frac{1}{E - Q_n H_0 Q_n} Q_n WP \end{aligned} \quad (2.17)$$

2.1.4 Spin-Split in Heterostrukturen

Wir beschränken uns auf die zwei Γ_6 -Leitungsbänder zur Beschreibung der elektronischen Zustände der Heterostruktur, vernachlässigen die Spin-Bahn-Wechselwirkung in $\vec{\pi}_{il}^{(A,B)}$ (i.e. $\vec{\pi}_{il}^{(A,B)} \rightarrow \vec{p}_{il}$) als einen kleinen Effekt und verwenden die Methode aus Abschnitt (2.1.3). Der Zeemanterm und die Kopplung an die Remote-Bands via c_{il} werden nur in erster Ordnung behandelt (PWP). Die vernachlässigten Terme sind viel kleiner als die Kopplung über die $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Wechselwirkung. Ein Berücksichtigen der Kopplung via c_{il} bis zur zweiten Ordnung würde nur die effektiven Bandoffsets maximal um einige wenige meV ändern. In dieser Näherung gäbe es keinen Interferenzterm zwischen c_{il} und der $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Wechselwirkung, da die c_{il} nur an Γ_6 -Bänder koppeln. Der folgende effektive Hamiltonoperator resultiert (i,l=Spin up/down, wir teilen die Remote-Bands in nah (n) und fern ein (f))

$$H_{il} = \frac{1}{2} \vec{D} \underline{M}_{il}^{-1} \vec{D} + \delta_{il} \left\{ \mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{0}) + \Theta_B^{\vec{0}}(z) \Delta \mathcal{E}_l(\vec{0}) + \phi^{\vec{0}}(\vec{r}) \right\} - \frac{e\hbar}{2m_0 c} \vec{\sigma}_{il}(\vec{0}) \cdot \vec{B}^{\vec{0}}(\vec{r})$$

mit

$$\underline{M}_{il}^{-1}$$



und

$$\Delta\mathcal{E}_l(\vec{0}) = \sum_j |c_{jl}|^2 \mathcal{E}_j^{(B)}(\vec{0}) - \mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{0}) \quad (2.18)$$

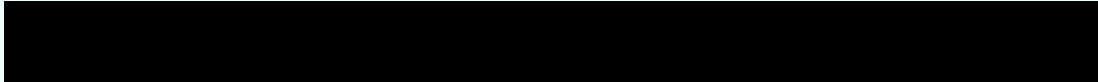
$\Delta\mathcal{E}_l(\vec{0})$ definiert die effektiven elektrischen Bandoffsets. Eine unmittelbare Konsequenz ist, daß die elektrischen Bandoffsets, die in der EFA verwendet werden müssen, von den experimentell (mit Methoden, die direkt die Differenz $\mathcal{E}_l^{(B)}(\vec{0}) - \mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{0})$ messen wie z.B. Photoemission) bestimmten Bandoffsets abweichen können. Im schlimmsten Fall kann diese Differenz mehr als 0.1eV betragen, im allgemeinen wird sie jedoch deutlich kleiner sein. Anschaulich kann man sich vorstellen, daß ein Elektron mit der Bandkanten-Blochfunktion von Halbleiter (A) nach (B) wechselt, dort feststellt, daß seine (atomare) Wellenfunktion sich zusammensetzt aus verschiedenen Wellenfunktionen von Material (B), die unterschiedliche Energien haben und zu einem Erwartungswert der Energie führen, der gerade um den effektiven Bandoffset höher liegt als im Material (A). Genau dieser Anteil der Energie fehlt dann dem langwelligen Anteil der Wellenfunktion, der Envelope. Dies ist der Ursprung der Potentialbarrieren für die Envelopen. Der kinetische Energieterm und der Zeemanterm im Nenner in $\underline{M}_{il}^{-1}$ sind sehr klein (ersterer ist höchstens von der Größenordnung $|m_l^*/m_0\Delta\mathcal{E}_l(\vec{0})|$) und sind deshalb vernachlässigt worden. Die fernen Remote-Bands sind diejenigen, für die gilt $|E - \mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{0})|, |\Delta\mathcal{E}_j(\vec{0})|, |\phi^{\vec{0}}(\vec{r})| \ll |\mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{0}) - \mathcal{E}_j^{(A)}(\vec{0})|$. Für Γ_6 -Bänder kann man beweisen

$$\sum_j^{\text{deg.}} (p_{ij}^\alpha p_{jl}^\beta + p_{ij}^\beta p_{jl}^\alpha) \propto \delta_{\alpha\beta} \delta_{il}$$

Die Summe geht über einen Unterraum bestimmter Symmetrie, z.B. 4 Bänder mit Γ_8 Symmetrie. Desweiteren kann man beweisen (wenn man den kleinen Beitrag der Spin-Bahn-Wechselwirkung in $\vec{\pi}$ vernachlässigt)

$$\delta_{il} \frac{1}{m_0} \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{m_0^2} \sum_j^{n,f} \frac{p_{ij}^\alpha p_{jl}^\beta + p_{ij}^\beta p_{jl}^\alpha}{\mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{0}) - \mathcal{E}_j^{(A)}(\vec{0})} = \delta_{il} \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}_l^{(A)}(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \Big|_{\vec{k}=\vec{0}} = \delta_{il} \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{m_{(A)}^*} \quad (2.19)$$

Es ist



$[\cdot]/\{\cdot\}$ steht für den antisymmetrischen/symmetrischen Anteil des Tensors. Der erste Term ist ein verallgemeinerter Rashba-Spin-Bahn-Kopplungsterm [20], der zweite stellt

eine Modifizierung des g-Faktors des Elektrons dar ($[D_\alpha, D_\beta]_- = \frac{\hbar e}{ic} \sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma$) und der letzte ist der kinetische Energieterm mit einer veränderlichen effektiven Masse. Wir nehmen an, daß es ausreicht, die nächsten Γ_7 - und Γ_8 -Bänder in Richtung steigender und fallender Energie als nahe Remote-Bands zu deklarieren. Wir erhalten den Hamiltonoperator

$$H = \left(\vec{D} \frac{1}{2m^*(\vec{r})} \vec{D} + \Theta_B^0(z) \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_6} + \phi^0(\vec{r}) \right) \cdot 1 + \frac{1}{2} g^*(\vec{r}) \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \frac{1}{\hbar} \vec{\alpha}(\vec{r}) \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{D}) \quad (2.20)$$

Viele Veröffentlichungen haben sich mit der korrekten Form des kinetischen Energieterms in Effektivmassengleichungen beschäftigt (z.B. [16, 17, 4]). Dies ist die richtige Form, die man in Effektivmassengleichungen verwenden muß. Die Masse ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \frac{m_0}{m^*(\vec{r})} &= \frac{m_0}{m_{\Gamma_6}^{*(A)}} + \sum_j^{v,c} \left(\frac{2E_{pj}}{3(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}^{(A)} - \Theta_B^0(z) \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}} - \phi^0(\vec{r}))} - \frac{2E_{pj}}{3(\mathcal{E}_{\Gamma_6} - \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}^{(A)})} \right. \\ &\quad \left. + \frac{E_{pj}}{3(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}^{(A)} - \Theta_B^0(z) \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}} - \phi^0(\vec{r}))} - \frac{E_{pj}}{3(\mathcal{E}_{\Gamma_6} - \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}^{(A)})} \right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Ein großer Anteil nichtparabolischer Korrekturen versteckt sich im Auftauchen der Energie E in den Nennern. Die E_{pj} sind die üblichen Parameter, die die Stärke der Wechselwirkung zwischen den Γ_6 -Bändern auf der einen und den zusammengehörigen Γ_7 - und Γ_8 -Bändern auf der anderen Seite beschreiben. Die Wechselwirkungsparameter für zusammengehörige Γ_7 - und Γ_8 -Bänder sind gleich, da wir eine kleine Spin-Bahn-Wechselwirkung angenommen haben. Der g-Faktor ist

$$\begin{aligned} g^*(\vec{r}) &= g_{\Gamma_6}^{*(A)} - \sum_j^{v,c} \left(\frac{2E_{pj}}{3(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}^{(A)} - \Theta_B^0(z) \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}} - \phi^0(\vec{r}))} - \frac{2E_{pj}}{3(\mathcal{E}_{\Gamma_6} - \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}^{(A)})} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2E_{pj}}{3(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}^{(A)} - \Theta_B^0(z) \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}} - \phi^0(\vec{r}))} + \frac{2E_{pj}}{3(\mathcal{E}_{\Gamma_6} - \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}^{(A)})} \right) \end{aligned} \quad (2.22)$$

Der Rashba-Kopplungskoeffizient ist

$$\vec{\alpha} = \frac{\hbar^2}{6m_0} \vec{\nabla} \sum_j^{v,c} \left(\frac{E_{pj}}{(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}^{(A)} - \Theta_B^0(z) \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}} - \phi^0(\vec{r}))} - \frac{E_{pj}}{(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}^{(A)} - \Theta_B^0(z) \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}} - \phi^0(\vec{r}))} \right)$$

Für GaAs hat man etwa die Werte $E_{pv} = 26-28.9 \text{ eV}$ und $E_{pc} = 5-6 \text{ eV}$ [18, 5], die aus Fits an experimentelle Daten unter Vernachlässigung aller anderen Remote-Bands entstanden sind. Entnimmt man die energetischen Lagen einiger Bänder der Literatur [5], so erhält man die folgenden Werte für die AlAs Elektronenmasse/g-Faktor an der Bandkante von GaAs

$$m_{\text{AlAs}} \approx (0.09 \pm 0.02) m_0 \quad g_{\text{AlAs}}^* \approx -1.5 \pm 0.3$$

Die großen Fehlerschranken resultieren auch aus den nur ungenau bekannten Energien der Bandkanten. Die Masse weicht von der Leitungsbandmasse des AlAs am Γ -Punkt ab, liegt aber bei dem in dieser Arbeit experimentell ermittelten Wert von $0.09 m_0$. Der experimentelle Wert selbst ist mit einem Fehler von ungefähr $0.01 m_0$ behaftet, der zum einen aus der Messgenauigkeit stammt, zum anderen aus dem nur ungenau bekannten Γ_6 -Bandoffset. Falls man nicht in der Lage ist, die Kopplungsparameter unabhängig zu bestimmen, kann man versuchen sie aus Fits der Formel (2.19) und der analogen Formel für g^* an die Bandkantenwerte von Material (A) zu extrahieren, wobei man die Summe auf die nahen Remote-Bands beschränkt. Innerhalb dieser Näherung ist dann

$$\frac{m_0}{m^*(\vec{r})}$$

und

$$g^*(\vec{r})$$

wobei E_{pv} und E_{pc} so angepaßt sind, daß obige Formeln die Bandkantenwerte von Material (A) reproduzieren (für $\Theta_B^0(z) \equiv \phi^0(\vec{r}) \equiv 0$ und $E = E_{\Gamma_6}$).

Zweidimensionale Elektrongase In vielen Fällen, die von praktischem Interesse sind, handelt es sich bei dem untersuchten System um ein zweidimensionales Elektronengas. Im weiteren wollen wir hierfür die Rechnung vereinfachen, falls nur ein Subband besetzt ist (die Formeln lassen sich leicht auf den Fall mehrerer besetzter Subbänder verallgemeinern). Normalerweise ist der Abstand zweier Subbänder des ungestörten Problems (ohne Rashbaterm etc.) wesentlich größer als die Störung. Deshalb können wir wieder das Konzept des effektiven Hamiltonoperators verwenden. Wir identifizieren nun P mit dem Projektor auf das erste Subband des ungestörten Problems und behalten die Störung nur bis zur ersten Ordnung bei (PWP in Gleichung (2.16)). In den allermeisten Fällen verändert sich das elektrische Potential nur wesentlich in Wachstumsrichtung. Das magnetische Feld nehmen wir als konstant an und in Wachstumsrichtung orientiert (ansonsten muß es ebenfalls klein sein, zumindestens die Komponente parallel zur Schicht). In dieser Näherung erhalten wir den Hamiltonoperator

$$H = \left(E_z^{\text{sub}} + \frac{1}{2m^*} \vec{D}_{\parallel}^2 + \phi(\vec{r}_{\parallel}) \right) \cdot \mathbf{1} + \frac{1}{2} g^* \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \frac{1}{\hbar} \vec{\alpha} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{D}) \quad (2.23)$$

Die Masse ist nun

$|\Psi_z\rangle$ ist der z -abhängige Teil der Wellenfunktion des ersten Subbands des ungestörten Problems. Die effektive Masse im zweidimensionalen Elektronengas ist deshalb nicht einfach die Bandkantenmasse des Topfmaterials sondern enthält auch Beiträge von

dem Barrierenmaterial (abgesehen von Korrekturen aufgrund der Nichtparabolizität). Der g-Faktor ist gegeben durch

$$g^* = \langle \Psi_z | g^*(z) | \Psi_z \rangle$$

Auch g weicht in der Regel vom Bandkantenwert des Topfmaterials ab, wie dies auch in Experimenten gefunden wird[19]. Der Rashba-Kopplungskoeffizient ist

$$\begin{aligned} \vec{\alpha} = & \frac{\hbar^2}{6m_0} \vec{e}_z \sum_j^{v,c} \langle \Psi_z | \left(\left(\frac{E_{pj}}{(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}^{(A)} - \phi^{\bar{0}}(z))^2} - \frac{E_{pj}}{(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}^{(A)} - \phi^{\bar{0}}(z))^2} \right) \Theta_A(z) \phi'^{\bar{0}}(z) \right. \right. \\ & + \left. \left(\frac{E_{pj}}{(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}^{(A)} - \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}} - \phi^{\bar{0}}(z))^2} - \frac{E_{pj}}{(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}^{(A)} - \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}} - \phi^{\bar{0}}(z))^2} \right) \Theta_B(z) \phi'^{\bar{0}}(z) \right) | \Psi_z \rangle \\ & + \frac{\hbar^2}{6m_0} \vec{e}_z \sum_j^{v,c} \sum_n \left(\frac{E_{pj} \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}}{2(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}^{(A)} - \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}} - \phi^{\bar{0}}(z))^2} + \frac{E_{pj} \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}}{2(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{7j}}^{(A)} - \phi^{\bar{0}}(z))^2} \right. \\ & \left. \left. - \frac{E_{pj} \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}}{2(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}^{(A)} - \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}} - \phi^{\bar{0}}(z))^2} - \frac{E_{pj} \Delta \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}}{2(E - \mathcal{E}_{\Gamma_{8j}}^{(A)} - \phi^{\bar{0}}(z))^2} \right) s_n |\Psi_z(z_n)|^2 \right) \end{aligned} \quad (2.24)$$

z_n bezeichnet die Lage der n-ten Grenzfläche, $s_n = +1$ falls Material (B) auf der Seite mit dem größeren z liegt, andernfalls ist $s_n = -1$. $\vec{e}_z$ ist ein Einheitsvektor in z -Richtung. Nach der Differentiation haben wir $\Theta_B^{\bar{0}}(z)$ durch $\Theta_B(z)$ ersetzt. Die ersten zwei Terme sind proportional zu den Erwartungswerten des elektrischen Feldes in Material (A)/(B), falls wir das Potential in den Nennern vernachlässigen dürfen. Der δ -Funktionsanteil der Kopplung existiert nur in Heterostrukturen. Wenn die Energieabstände groß genug sind, können wir das elektrische Potential in den Nennern vernachlässigen und die Energie E durch $\mathcal{E}_{\Gamma_6}$ ersetzen. Vergleicht man dieses Ergebnis mit demjenigen von de Andrada e Silva et al. [23], so stellt man große Abweichungen zu einer Theorie fest, die nur Bulkbeiträge von Material (A) berücksichtigt. Das endgültige Resultat für α von de Andrada e Silva et al. [23] kann man erhalten, indem man die Summe auf die Valenzbänder beschränkt, das elektrische Potential in den Nennern vernachlässigt, E durch $\mathcal{E}_{\Gamma_6}$ ersetzt, nur den ersten Term in der obigen Formel beibehält und diesen im Spin-Split-Parameter $\Delta = \mathcal{E}_{\Gamma_{8v}} - \mathcal{E}_{\Gamma_{7v}}$ bis zur niedrigsten Ordnung entwickelt. Wiederholt stellt sich heraus, daß der größte Beitrag zu α von dem δ -Funktionsanteil herrührt, der an den Grenzflächen lokalisiert ist[22]. De Andrada e Silva et al.[23] haben in ihrem Variationsansatz Fang-Howard Testfunktionen verwendet, die an der Grenzfläche verschwinden. Dies ist nur dann eine gute Näherung, wenn der Γ_6 -Bandoffset weit mehr als 1eV beträgt.

α verschwindet in einer vollständig symmetrischen Struktur. Die Formeln lassen sich leicht verallgemeinern auf den Fall, daß die Heterostruktur aus mehreren Materialien besteht. Der Rashba-Spin-Bahn-Kopplungsterm ohne Magnetfeld in einem typischen zweidimensionalen Elektronengas

$$\begin{aligned} H_{Rashba} &= -i\vec{\alpha} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}) \\ &= -i|\alpha| \vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{e}_z) \end{aligned} \quad (2.25)$$

kommutiert mit dem Impulsoperator

$$\left[\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}, H_{Rashba} \right] = 0 \quad (2.26)$$

und dem Operator der Spinkomponente, die senkrecht zur Bewegungsrichtung des Elektrons und senkrecht zur Wachstumsrichtung der Heterostruktur (zu $\vec{\alpha}$) steht (H_{Rashba} ist in diesem Fall selbst proportional zu diesem Operator)

$$\quad \quad \quad (2.27)$$

so daß der Wellenvektor und die Spinkomponente senkrecht zur Bewegungsrichtung in diesem Fall gute Quantenzahlen sind.

2.1.5 Kopplung an Nebentäler

Wenn das Topfmaterial direkt ist und das Barrierenmaterial indirekt, so kann es passieren, daß der Transport (die elektronische Struktur) stark durch die anderen Minima in der Bandstruktur beeinflusst wird [24, 25]. Aufgrund der Sprünge im Potential in Wachstumsrichtung an den Grenzflächen ist es für die Elektronen möglich, ihren Kristallimpuls auf jeden Wert zu ändern, der im Einklang steht mit Energieerhaltung (abgesehen von virtuellen Übergängen) und lateraler Impulserhaltung. Für GaAs/AlAs Heterostrukturen, die in [100]-Richtung (Δ -Achse) gewachsen sind, sind die relevanten Minima die beiden X-Minima die bei $+k_x$ und $-k_x$ auf dieser Achse liegen (für [111] wären dies die L-Minima). Für uns ist hier nur die elastische Kopplung an diese beiden Minima interessant und wir brauchen nur einen weiteren Basispunkt an einem der X-Punkte (L-Punkte) auf dieser Achse, den wir mit $\vec{k}_0$ bezeichnen. Da k -Werte außerhalb der ersten Brillouinzone mit k -Werten innerhalb der Zone korrespondieren, berücksichtigen wir auf diese Art automatisch das bei $-k_x$ gelegene Minimum. Wir unterteilen die Brillouinzone in drei Teile, in dem wir die Verbindungslinien vom Γ -Punkt nach $\vec{k}_0$ und $-\vec{k}_0$ bei $\pm \frac{1}{2} \vec{k}_0$ halbieren. Die Herleitung des Hamiltonoperators ist analog zu Abschnitt (2.1.1). Wir vernachlässigen die Differenz im $\vec{k}$ -abhängigen Anteil der Spin-Bahn-Wechselwirkung und erhalten die Kopplung

$$H_{il}^{X\Gamma} = \sum_{\vec{G}} \Theta_{\vec{B}}^{\vec{k}_0 + \vec{G}}(z) \left\{ \mathcal{E}_i^{(B)}(\vec{k}_0) - \mathcal{E}_i^{(A)}(\vec{0}) \right\} \frac{1}{\Omega} \langle u_{i\vec{k}_0}^{(B)} | e^{i\vec{G}\vec{r}} | u_{i\vec{0}}^{(A)} \rangle_{\Omega}$$

Wir schließen uns eng an an die Argumentation am Ende des Abschnitts (2.1.1) und behalten nur die niedrigste Ordnung in der Entwicklung von $\Theta_B(k_z)$ in eine geometrische Reihe und nur die Terme mit $\vec{G} = 0$ und $\vec{G} = -2\vec{k}_0$. Auf diese Weise werden nur Fourierkoeffizienten von $\Theta_B(z)$ aus der ersten Brillouinzone berücksichtigt. Wir erhalten

$$\quad \quad \quad (2.28)$$

z_j bezeichnet die Lage der Grenzflächen, $s_j = +1$ wenn Material (B) auf der Seite mit den größeren z -Werten liegt, andernfalls $s_j = -1$. Führt man elektrische und magnetische Felder ein, so kann allerhöchstens das elektrische Feld eine Γ -X(L)-Kopplung verursachen. Diese mögliche Kopplung vernachlässigen wir hier. Wir könnten mit einer unterschiedlichen Anzahl von Bändern am X- und am Γ -Punkt rechnen, hier aber verwenden wir an beiden Punkten ein Einbandmodell ($P \rightarrow P_\Gamma + P_X$ in Abschnitt (2.1.3)) und schließen die Γ -X-Kopplung nur bis zur ersten Ordnung ein, d.h. wir vernachlässigen die Kopplung an die Remote-Bands über $H_{il}^{X\Gamma}$. Die Hamiltonoperatoren am X- und am Γ -Punkt sind gegeben durch

$$H^{\Gamma\Gamma} = -\vec{\nabla} \frac{\hbar^2}{2m_\Gamma^*(\vec{r})} \vec{\nabla} + \Theta_B^{\tilde{0}}(z) \Delta \mathcal{E}_\Gamma + \phi^{\tilde{0}}(\vec{r})$$

Die effektiven Bandoffsets und die Massen am X-Punkt sind durch ähnliche Formeln gegeben wie Gleichung (2.18,2.21). $\tilde{\Theta}_{A,B}^{\tilde{0}}(z)$ enthält nur Fourierkoeffizienten aus $[-\frac{k_0}{2}, +\frac{k_0}{2}]$. Wiederum können wir $\tilde{\Theta}_{A,B}^{\tilde{0}}(z)$ durch $\Theta_{A,B}(z)$ ersetzen. Innerhalb dieser Näherung ist die Γ -X-Wechselwirkung

$$H^{X\Gamma} = H^{\Gamma X*} = \sum_j s_j \delta(z - z_j) \alpha$$

$$\alpha = \frac{1}{ik_0 \Omega} \left(\langle u_X^{(B)} | u_\Gamma^{(A)} \rangle_\Omega - \langle u_X^{(B)} | e^{-2i\vec{k}_0 \vec{r}} | u_\Gamma^{(A)} \rangle_\Omega \right) \{ \mathcal{E}_X^{(B)} - \mathcal{E}_\Gamma^{(A)} \}$$

Diese Kopplung ist exakt von der Gestalt, wie sie von Liu [26] und Ando und Akera [29] vorgeschlagen worden ist. Im Fall von GaAs/AlAs hat $|\alpha|$ den numerischen Wert $0.13 \text{ eV}\text{\AA}$ [7] (die Energiedifferenz wurde zu 0.16 eV angenommen). Dies muß man mit den geschätzten Werten $0.1 \text{ eV}\text{\AA}$ von Liu [26], $0.12 \text{ eV}\text{\AA}$ ($t=0.5$) von Xia [27] und $0.15 \text{ eV}\text{\AA}$ von Sun et al. [28] vergleichen, die durch Anpassung an z.B. Pseudopotentialrechnungen bestimmt worden sind. Eine ausgezeichnete Übereinstimmung.

2.2 Grundlagen der Simulationen

Einige der in dieser Arbeit vorgestellten Rechnungen und Simulationen fußen auf der folgenden (exakten) Formel[30] für die Übergangsrate von einem Anfangszustand i , der Eigenzustand eines Hamiltonoperators H_i (hier: Emitter) ist, in den Endzustand f , der Eigenzustand des Hamiltonoperators H_f (hier: Kollektor) ist. Beide Operatoren können sich prinzipiell unterscheiden (müssen es aber nicht notwendigerweise).

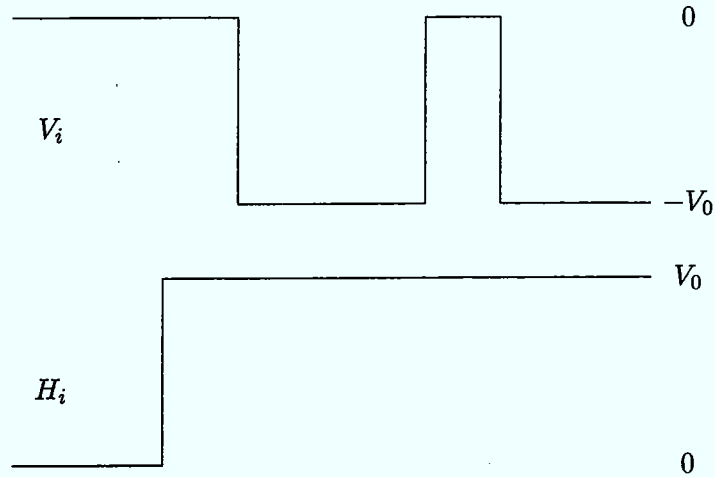
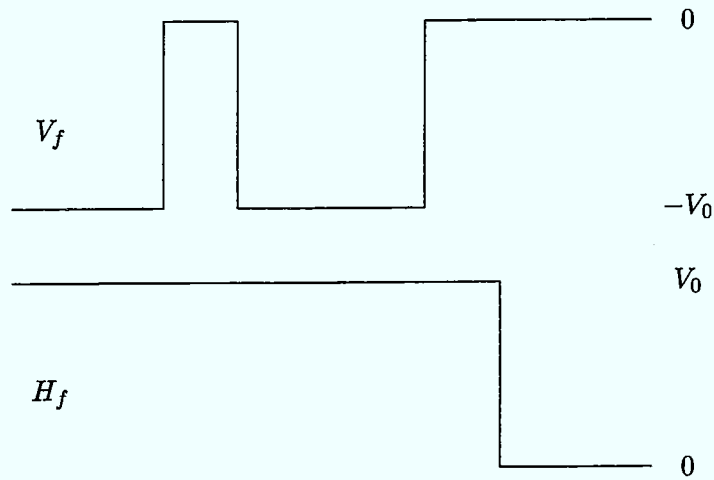
$$\text{[Redacted Equation (2.29)]} \quad (2.29)$$

Die Formel läßt sich mittels adiabatischem Ein- und Umschalten von Potentialkorrekturen und Wechselwirkungen herleiten. Zum Zeitpunkt $t = -\infty$ hat man dann den Hamiltonoperator H_i vorliegen, dann schaltet man adiabatisch die Wechselwirkungen ein, so daß bei $t = 0$ der volle Hamiltonoperator H wirkt und schaltet anschließend die Wechselwirkungen und eventuell anderen Korrekturen adiabatisch wieder aus bis bei $t = \infty$ der Hamiltonoperator H_f vorliegt. Dieser Formalismus wurde ursprünglich in den 40er-Jahren zur Beschreibung von Kernreaktionen entwickelt. Anschaulich kann man sich vorstellen, daß ein im Emitter einlaufendes Wellenpaket noch nicht die ganze Heterostruktur wahrnimmt (Aufenthaltswahrscheinlichkeit 0 außerhalb des Emitters), dann in den interessanten Teil der Struktur einläuft und anschließend wieder in Emitter- und Kollektorzustände zerfällt, wobei der Rest der Struktur wieder unwichtig wird. Für den Strom interessiert hierbei dann nur noch der Anteil, der in Kollektorzustände zerfällt. Die Theorie ist nicht auf kleine Feldstärken beschränkt (wie dies z.B. bei der Kuboformel der Fall wäre) und eignet sich deshalb gerade für Heterostrukturen, in denen häufig große Feldstärken vorliegen. Der Strom ist gegeben durch (Ein-Elektronennäherung)

$$\text{[Redacted Equation (2.30)]} \quad (2.30)$$

Die letzte Beziehung gilt aufgrund der Mikroreversibilität. $f_{L,R}$ bezeichnet hier die Verteilungsfunktion der Elektronen im Emitter (L) bzw. Kollektor (R), die man aufgrund der niedrigen Ströme/schwachen Kopplung in der Regel als Fermiverteilungen ansetzen kann (dies setzt unter anderem auch die Existenz eines schnellen Streumechanismus in Emitter und Kollektor voraus, der die Elektronen wieder schnell genug gemäß der Fermiverteilung umgruppiert; normalerweise ist hierzu die Elektron-Elektron Wechselwirkung ausreichend [31]).

Als Beispiel ist in den Bildern (2.4), (2.5) und (2.6) die Zerlegung eines Hamiltonoperators einer RTD gezeigt. Neben H_i und H_f haben wir $H_{T_{off}}$ eingeführt, mit dessen Hilfe sich Resonanzphänomene leicht beschreiben lassen. Es sind nur die Potentialverläufe dargestellt. Den kinetischen Term denke man sich noch zu H gehörig.

Abbildung 2.4: Zerlegung des Hamiltonoperators einer RTD, H_i und V_i^{pot} Abbildung 2.5: Zerlegung des Hamiltonoperators einer RTD, H_f und V_f^{pot}

Stimmen H_i und H_f überein, so kann man durch Entwickeln der Resolventen in eine von Neumann-Reihe[32, 33] die ganze Reihenentwicklung der Störungstheorie erhalten. Dies stellt im allgemeinen allerdings keine besonders geschickte Vorgehensweise dar. Stattdessen ist es oft besser, gewisse Näherungen in der Selbstenergie durchzuführen. Hierdurch hat man dann automatisch einen Teil der Diagramme der Störungsreihe bis zur Ordnung unendlich aufsummiert. Die Reihenentwicklung basiert auf der zweiten

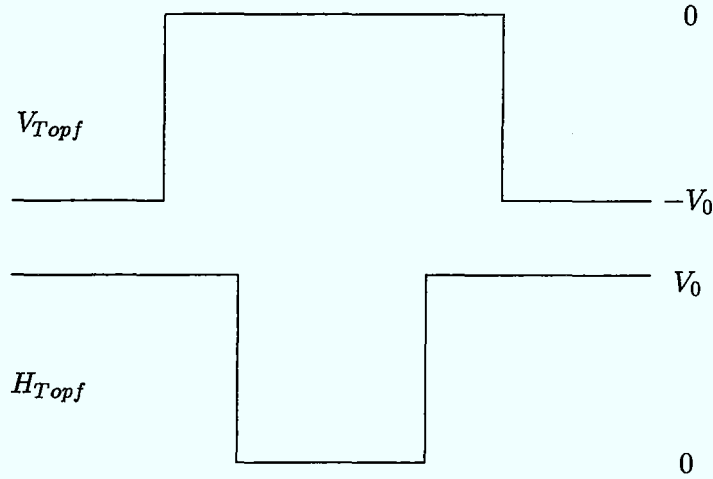


Abbildung 2.6: Zerlegung des Hamiltonoperators einer RTD, H_{Topf} und V_{Topf}^{pot}

Resolventenidentität (nach einer geeigneten Zerlegung $H = H_0 + V$):

$$\frac{1}{z - H} = \frac{1}{z - H_0} + \frac{1}{z - H_0} V \frac{1}{z - H} \quad (2.31)$$

Iteration führt auf die (zweite) von Neumann-Reihe

$$\frac{1}{z - H} = \frac{1}{z - H_0} \sum_{n=0}^{\infty} \left(V \frac{1}{z - H_0} \right)^n \quad (2.32)$$

Anstelle dieser Reihenentwicklung führt man besser Projektoren auf Zustände (λ, μ) geeigneter ungestörter Hamiltonoperatoren ein (im Falle einer RTD sind dies die Eigenzustände von H_{Topf} , generell gibt es für jeden Topf in einem Übergitter einen geeigneten ungestörten Hamiltonoperator), mit deren Hilfe man insbesondere Resonanzphänomene sinnvoll beschreiben kann. Einschieben zweier Vollständigkeitsrelationen dieser Eigenzustände liefert (in einem Doppeltopf gehört die erste Vollständigkeitsrelation zu dem 1.Topf, wohingegen die zweite zum 2.Topf gehört, in einem Übergitter gehört die zweite entsprechend zum letzten Topf)

$$\text{[Redacted Equation]} \quad (2.33)$$

Hat man es mit Streuprozessen zu tun, die Unordnungsphänomenen entspringen wie Legierungsstreuung (tatsächliche lokale Komposition), Störstellenstreuung (Lage der Störstellen), Grenzflächenrauhigkeit (tatsächliche lokale Lage der Grenzfläche), Versetzungsstreuung (Lage der Versetzung), so enthalten alle nichtdiagonalen Matrixelemente der Resolventen Phasenfaktoren, deren Wert von der jeweiligen Realisierung der ungeordneten Systeme abhängt. Hat man es mit einem makroskopischen Bauelement zu tun, so

wird der Strom nicht von der tatsächlichen mikroskopischen Realisierung abhängen, da man sich z.B. eine großflächige Diode in viele unabhängige Dioden mit kleinerer Fläche zerlegt vorstellen kann, in denen dann jeweils eine andere Realisierung der ungeordneten Systeme vorliegt. Die Summe über diese kleinflächigen Dioden ist dann äquivalent zu einer Mittelung über verschiedene Realisierungen. Ein einfaches Kriterium für die minimale Längenausdehnung der kleinflächigen Dioden ist

$$\boxed{\text{[Redacted Equation]}} \quad (2.34)$$

$v_{||}$ ist die Geschwindigkeit im Emitter parallel zu den Grenzflächen in den für den Transport relevanten besetzten Zuständen und τ ist die zugehörige Lebensdauer der Emitterzustände, die aufgrund von Störstellenstreuung, Elektron-Elektron-Streuung und, bei höheren Temperaturen, aufgrund von Phononstreuung als gering anzusehen ist. l_c entspricht in etwa der Länge, die ein Wellenpaket in der Struktur in lateraler Richtung während des Transportes zurücklegen kann, bevor es durch Streuprozesse zerfließt (Kohärenzlänge). Eine typische Größenordnung für τ ist 10^{-12} s, $E_f \approx 20 - 80 \text{ meV}$ und $m^* \approx 0.03 - 0.07 m_e$. Dies ergibt für $l_c \approx 0.1 - 1 \mu\text{m}$.

In großflächigen Dioden darf man daher über verschiedene Realisierungen mitteln, nicht jedoch in Dioden mit Flächen kleiner als l_c^2 , die man z.B. in Ein-Elektronen Tunnelstrukturen verwendet. In diesen Strukturen kommt es sehr wohl auf die genaue Konfiguration der Streuzentren etc. an, wie sich dies auch im Experiment zeigt [34] (Fingerprint). An dieser Stelle wollen wir uns mit dem Problem der Mittelung beschäftigen. Man muß sehr genau darauf achten, an welcher Größe man die Mittelung durchführt. Den Einfluß der ungeordneten Systeme werden wir immer nur an *Beobachtungsgrößen* wie den Strom feststellen. Wenn wir eine Mittelung über die Realisierungen der ungeordneten Systeme durchführen, so müssen wir diese in den Formeln für die *Beobachtungsgrößen* durchführen. Da der Strom linear mit der Übergangsrate verknüpft ist, können wir die Mittelung an der Übergangsrate durchführen, *nicht* jedoch unmittelbar an der Resolventen, welche quadratisch eingeht.

In Einfachbarrieren kann man nur den Term erster Ordnung beibehalten (da die Kopplung exponentiell von der Barrierendicke abhängt) und die Mittelung an diesem durchführen (siehe Abschnitt 2.4). In resonanten Tunneldioden, Doppeltöpfen und Übergittern ist der Beitrag erster Ordnung verschwindend klein aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit der Kopplung von der Distanz. Hier liefert nur der Term mit der Resolventen einen Beitrag:

$$\boxed{\text{[Redacted Equation]}} \quad (2.35)$$

Alle Matrixelemente enthalten Phasenfaktoren, die von der Realisierung der ungeordneten Systeme abhängen. Diese Phasenfaktoren heben sich bei der Betragsquadratbildung nur heraus, wenn ein Term auf sein entsprechendes konjugiertkomplexes Gegenstück

trifft, d.h.

$$w_{i \rightarrow f} \approx \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_f) \sum_{\lambda, \mu} | \langle i | V_f | \lambda \rangle |^2 \left| \langle \lambda | \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} | \mu \rangle \right|^2 | \langle \mu | V_i | f \rangle |^2 \quad (2.36)$$

Diese Näherung ist an sich nur gerechtfertigt, wenn der Übergang hauptsächlich durch Unordnungsphänomene verursacht wird, also vor allen Dingen im sogenannten Valleybereich des Stromes in resonanten Tunneldioden. Sie ist aber auch eine hervorragende Näherung für den Potentialkorrekturterm im Peakbereich (kohärenter Transport), da dann (da der laterale Impuls durch diesen Streuterm erhalten bleibt) offenbar die Summe innerhalb des Betragsquadrates nur von einem einzigen Summanden dominiert wird und somit ebenfalls durch die Summe der Betragsquadrate ersetzt werden kann. Falls auch im Peakbereich der Kennlinie die obigen Streuphänomene dominant sind, bleibt die Näherung trivialerweise gut. Gleichung (2.36) stellt deshalb eine gute Basis für die Beschreibung von Transportprozessen in Resonanten Tunneldioden dar, in denen z.B. Grenzflächenrauhigkeit eine wichtige Rolle spielt.

Führt man die Mittelung über die Realisierungen der ungeordneten Systeme unmittelbar an der Resolventen durch, so mitteln sich die nichtdiagonalen Matrixelemente der Resolventen weg, da sie Phasenfaktoren enthalten, d.h.

$$\sum_{\lambda, \mu} | \lambda \rangle \langle \lambda | \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} | \mu \rangle \langle \mu | \approx \sum_{\lambda} | \lambda \rangle \langle \lambda | \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} | \lambda \rangle \langle \lambda | \quad (2.37)$$

Eine andere Begründung, nur die Diagonalelemente der Resolventen beizubehalten, die auch für kleinflächige Dioden (mesoskopische Bauelemente) zutreffen kann, beruht auf einer schwachen-Streustärke-Näherung. Die nichtdiagonalen Elemente der Resolventen werden offenbar nur dann groß, wenn die Störung hinreichend große Matrixelemente besitzt. Sind alle wesentlichen Matrixelemente klein, so kann man ebenfalls nur die diagonalen Elemente der Resolventen behalten. Mit Hilfe von Projektoren ($P_\lambda = | \lambda \rangle \langle \lambda |$, $Q_\lambda = 1 - P_\lambda$) kann man herleiten [35]

$$\langle \lambda | \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} | \lambda \rangle = \frac{1}{E_i - E_\lambda - \Sigma_\lambda + i\epsilon} \quad (2.38)$$

mit der Selbstenergie ($H = H_0 + V$)

$$\begin{aligned} \Sigma_\lambda &= \langle \lambda | V | \lambda \rangle + \langle \lambda | V Q_\lambda \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} Q_\lambda V | \lambda \rangle \\ &= \langle \lambda | V | \lambda \rangle + \langle \lambda | V Q_\lambda P P \frac{1}{E_i - H} Q_\lambda V | \lambda \rangle \\ &\quad - i\pi \langle \lambda | V Q_\lambda \delta(E_i - H) Q_\lambda V | \lambda \rangle \end{aligned} \quad (2.39)$$

PP bezeichnet den Hauptwert. Die ersten beiden Terme entsprechen hier einer Energieverschiebung, während der letzte zu einer endlichen Lebensdauer führt.

In der Selbstenergie kann man wieder verschiedene Näherungen durchführen, indem man z.B. nur die niedrigsten Ordnungen in der Störung berücksichtigt (dies bedeutet für die gewöhnliche Störungsreihe immer noch eine Aufsummation von Diagrammen bis zu unendlicher Ordnung in der Störung) oder man bestimmt sie selbstkonsistent wie z.B. in der Coherent Potential Approximation, indem man die gleiche Mittelung noch einmal im Nenner an der Selbstenergie durchführt (CPA, dies ist in RTDs mit extrem dicken Barrieren eine sinnvolle Vorgehensweise, wenn die Selbstenergie von Streuprozessen im Topf dominiert wird und die Kopplung an die Zuleitungen aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit von der Barrierendicke im Vergleich hierzu klein geworden ist):

$$\begin{aligned}\Sigma_{\lambda}^{CPA} &= \langle \lambda|V|\lambda \rangle + \sum_{\mu \neq \lambda} |\langle \lambda|V|\mu \rangle|^2 \langle \mu | \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} | \mu \rangle \\ &= \langle \lambda|V|\lambda \rangle + \sum_{\mu \neq \lambda} |\langle \lambda|V|\mu \rangle|^2 \frac{1}{E_i - E_{\mu} - \Sigma_{\mu}^{CPA} + i\epsilon}\end{aligned}$$

Setzt man stattdessen $H = H_0$ in der Selbstenergie (d.h. man macht Störungstheorie 2. Ordnung in der Selbstenergie), so spricht man auch von der Average T-Matrix-Approximation (ATA):

$$\begin{aligned}\Sigma_{\lambda}^{ATA} &= \langle \lambda|V|\lambda \rangle + \sum_{\mu \neq \lambda} |\langle \lambda|V|\mu \rangle|^2 \langle \mu | \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} | \mu \rangle \\ &= \langle \lambda|V|\lambda \rangle + \sum_{\mu \neq \lambda} |\langle \lambda|V|\mu \rangle|^2 \frac{1}{E_i - E_{\mu} + i\epsilon}\end{aligned}$$

Oben nicht explizit angedeutet ist in beiden Näherungen die Mittelung der Selbstenergie über die verschiedenen Realisierungen der ungeordneten Systeme.

2.2.1 Transmissionskoeffizient

Sind Emitter und Kollektor (quasi-)dreidimensional, so läßt sich aus der Stromformel leicht der folgende Transmissionskoeffizient herleiten

$$T(E_z, k_{||}) = \frac{L m_z^*}{\hbar k_z} \sum_{k_f} w_{i \rightarrow f} \quad (2.40)$$

L steht für die Ausdehnung des gesamten Bauelementes, wobei Emitter und Kollektor jeweils die Hälfte einnehmen (die Größe der Heterostruktur spielt keine Rolle im Grenzfall $L \rightarrow \infty$). $\frac{L m_z^*}{\hbar k_z}$ ist anschaulich die Zeit, die ein Wellenpaket im Emitter bleibt (wenn das Wellenpaket an der Heterostruktur vollständig reflektiert wird und man sich eine weitere, reflexionsfreie Zu- und Ableitung an der gegenüber der Heterostruktur gelegenen Seite angebracht denkt). Umgekehrt ist dann die Stromdichte

$$J = \frac{2e}{(2\pi)^3} \int d^3 k_i \frac{\hbar k_z}{m_z^*} T(E_z, k_{||}) (f_L(E_i) - f_R(E_i)) \quad (2.41)$$

$$= \frac{2e}{\hbar (2\pi)^3} \int dE_z \int d^2 k_{||} T(E_z, k_{||}) (f_L(E_i) - f_R(E_i)) \quad (2.42)$$

Wir haben an dieser Stelle Spinentartung vorausgesetzt (Faktor 2). Hängt der Transmissionskoeffizient nicht von $k_{||}$ ab, so folgt (dreidimensional)[35]

$$J = \frac{4\pi em^* k_b T}{h^3} \int_0^\infty dE_z T(E_z) \ln \left| \frac{1 + \exp \frac{E_f - E_z}{k_b T}}{1 + \exp \frac{E_f - E_z - V}{k_b T}} \right| \quad (2.43)$$

E_f ist die Fermienergie in Emitter und Kollektor im Gleichgewicht, V die angelegte Potentialdifferenz (der Transmissionskoeffizient ist ebenfalls eine Funktion von V). Die Funktion, die neben dem Transmissionskoeffizienten unter dem Integral steht, wird häufig die Supplyfunktion genannt (inklusive des Vorfaktors). Der Faktor $4\pi em^*/h^3$ hat für GaAs ($m^* = 0.067m_e$) den Wert $1.084 \cdot 10^9 A/(cm eV)^2$. Für $T=0$ führt dies zu einem Leitwert pro Flächeneinheit bei $V=0$ von

$$g_{zz}^{T=0} \quad \text{[Redacted Box]} \quad (2.44)$$

D^{2d} steht für die zweidimensionale Zustandsdichte. Die Rolle der fundamentalen Einheit des Leitwerts hat auch hier der Faktor e^2/h (der Faktor zwei für den Spin steckt in der Zustandsdichte). $D^{2d} \int_0^{E_f} dE_z T(E_z)$ zählt in diesem Fall die effektive Zahl der Leitkanäle.

In Abbildung (2.7) ist der Transmissionskoeffizient einer RTD gezeigt, der einmal mit einer Transfermatrixmethode berechnet wurde, zum anderen mittels Formel (2.40) unter Verwendung von (2.37) und unter Berücksichtigung nur zweier Zustände im Topf. In der Selbstenergie wurde nur die niedrigste Ordnung berücksichtigt (ATA). Die in der Selbstenergie gemachte Näherung ist im Abschnitt über RTD's näher beschrieben. Bereits in dieser Näherung ist die Übereinstimmung hervorragend. Die Abweichungen sind nur in einer logarithmischen Auftragung zu erkennen. Weiter oberhalb der zweiten Resonanz fehlen die höher gelegenen Zustände (bzw. das Kontinuum) in der störungstheoretischen Berechnung, so daß man hier keine genaue Beschreibung des Transmissionskoeffizienten erhält.

Zum Schluß geben wir noch eine andere Darstellung der Formel für den Strom:

$$\begin{aligned} & \text{[Redacted Box]} \\ & = e \sum_{i,f} (f_L(E_i) - f_R(E_i)) \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_f) | \langle i | V_f + V_f \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} V_i | f \rangle |^2 \\ & =: e \sum_{i,f} (f_L(E_i) - f_R(E_i)) \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_f) \langle i | T | f \rangle \langle f | T^+ | i \rangle \\ & = \frac{2\pi e}{\hbar} \int dE (f_L(E) - f_R(E)) TR (\delta(E - h_i) T \delta(E - h_f) T^+) \end{aligned} \quad (2.45)$$

Dividieren wir durch V und bilden den Grenzwert $V \rightarrow 0$, so erhalten wir die folgende

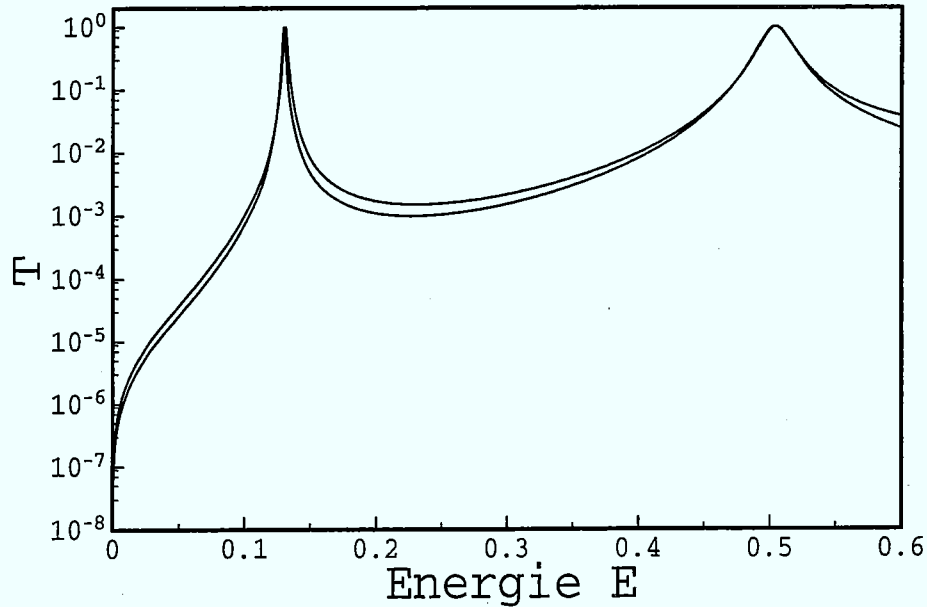


Abbildung 2.7: Transmissionskoeffizient einer 6ML/5nm/6ML AlAs/GaAs RTD

Formel für den Leitwert G bei $V=0$

$$G = \frac{2\pi e}{\hbar} \int dE \left(-\frac{df}{dE} \right) TR (\delta(E - h_i) T \delta(E - h_f) T^+) \quad (2.46)$$

Dies sollte man mit der Kuboformel für die longitudinale Leitfähigkeit im Einteilchenbild vergleichen (Formel (2.148))! Eine unmittelbare Übereinstimmung mit der Kuboformel für Bulkmaterial kann man nicht erreichen, da die obige Formel, im Gegensatz zur Kuboformel auch noch die Kontaktwiderstände enthält und auch für größere Felder sinnvoll bleibt (zur Diskussion dieses Punkts siehe Abschnitt (2.7.2))!

2.3 Grenzflächenrauhigkeit

In diesem Abschnitt soll ein Modell zur Beschreibung von Grenzflächenrauhigkeit vorgestellt werden. Wir führen eine mittlere Lage der Grenzfläche in der x-y-Ebene ein und messen von ihr die lokale Abweichung $z(x, y)$ der tatsächlichen Lage in z-Richtung (Abbildung 2.8). Zur statistischen Beschreibung der Rauigkeit verwenden wir ein

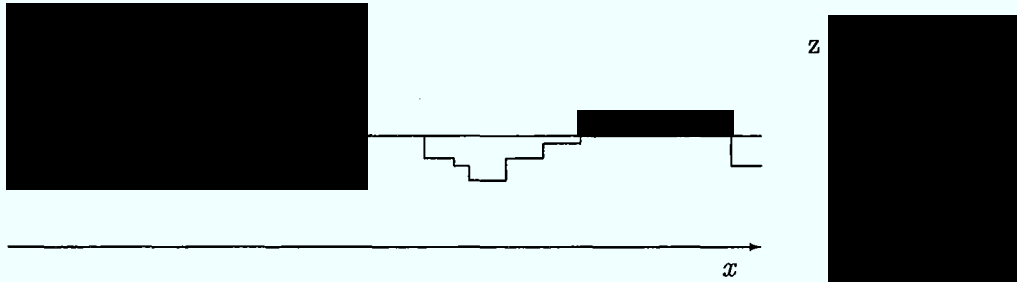


Abbildung 2.8: Modell zur Beschreibung von Grenzflächenrauhigkeit

Gaußsches Modell für die lokale Abweichung von der mittleren Grenzfläche mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{z^2}{2\sigma^2}} \quad (2.47)$$

Als Wahrscheinlichkeitsdichte für das gekoppelte Ereignis, die Abweichung z_1 an der Stelle $\vec{r}_{||1}$ und die Abweichung z_2 an der Stelle $\vec{r}_{||2}$ vorliegen zu haben[39], verwenden wir

$$\frac{1}{2\pi\sqrt{\sigma_1^2\sigma_2^2 - C_{12}^2}} e^{-\frac{1}{2} \begin{pmatrix} z_1 & z_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & C_{12} \\ C_{12} & \sigma_2^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}} \quad (2.48)$$

C_{12} ist die Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion ($\vec{r}_{||2} = \vec{r}_{||1} + \vec{r}_{||}$)

$$\begin{aligned} C_{12}(\vec{r}_{||}) &= \langle z_1(\vec{r}_{||1}) z_2(\vec{r}_{||2}) \rangle \\ &= \frac{1}{A} \int_{\vec{r}_{||1}} d^2 r_{||1} z_1(\vec{r}_{||1}) z_2(\vec{r}_{||1} + \vec{r}_{||}) \end{aligned}$$

(A ist die Fläche). Sie beschreibt die Korrelation der Rauigkeiten und kann im Prinzip mittels Röntgenstreuung bestimmt werden. $\frac{C_{12}}{\sigma_1\sigma_2}$ kann Werte zwischen -1 und +1 annehmen. Ein Wert von 0 bedeutet, daß die beiden Ereignisse statistisch unabhängig sind. Die Schreibweise oben deutet schon an, daß sich σ_2 von σ_1 unterscheiden kann. Dies ist natürlich nur der Fall, wenn z_1 und z_2 zu unterschiedlichen Grenzflächen gehören. C_{12} ist dann die Kreuz-Korrelationsfunktion. Gehören z_1 und z_2 zu ein und derselben Grenzfläche, so gilt

$$C_{12}(\vec{r}_{||}) = C_{11}(\vec{r}_{||}) \quad (2.49)$$

d.h. für $\vec{r}_{||1} = \vec{r}_{||2}$ erhält man in diesem Fall die Varianz. Strebt C_{12} gegen $\sigma_1 \cdot \sigma_2$, so bedeutet dies für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\begin{aligned} p(z_1, z_2) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} e^{-\frac{z_1^2}{2\sigma_1^2}} \delta\left(\frac{\sigma_2}{\sigma_1} z_1 - z_2\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} e^{-\frac{z_2^2}{2\sigma_2^2}} \delta\left(\frac{\sigma_1}{\sigma_2} z_2 - z_1\right) \end{aligned} \quad (2.50)$$

Wie man es anschaulich erwartet, sind z_1 und z_2 für ein und dieselbe Grenzfläche ($\sigma_1 = \sigma_2$) am selben Ort gleich und mit der Wahrscheinlichkeitsdichte von z_1 verteilt. Weiterhin gilt

$$\text{[Redacted]} \quad (2.51)$$

Dies drückt die statistische Unabhängigkeit von Rauigkeiten an weit entfernten Orten aus. In diesem Fall gilt

$$\text{[Redacted]} \quad (2.52)$$

Oftmals Verwendung in der Beschreibung von Röntgenstreuung an einer rauen Grenzfläche (z_1 und z_2 gehören zur selben Grenzfläche) findet die Sinha-Funktion mit

$$C_{12}(\vec{r}_{||}) = \sigma^2 e^{-\left(\frac{r_{||}}{\lambda_{||}}\right)^{2h}}$$

die mit Modellen der kinetischen Aufrauung beim Wachstum (Selbstähnlichkeit) in Einklang steht ($0 < h \leq 1$) [11, 12, 13]. $\lambda_{||}$ ist die Korrelationslänge der Grenzflächenrauigkeit.

Ganz allgemein kann man für das gekoppelte Ereignis, die Abweichung z_1 an der Stelle $\vec{r}_{||1}, \dots$, die Abweichung z_n an der Stelle $\vec{r}_{||n}$ vorzufinden (bei beliebig vielen Grenzflächen), die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p(z_1, \dots, z_n) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \det(C)}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^n (C^{-1})_{ik} z_i z_k} \quad (2.53)$$

verwenden. C ist die Kovarianzmatrix, deren Einträge sich aus den entsprechenden Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen ergeben.

$$\text{[Redacted]} \quad (2.54)$$

Die Diagonalelemente sind mit Gleichung (2.49) durch die Quadrate der Standardabweichungen gegeben. Hat man N Grenzflächen, so ist das Modell durch Bestimmung von $N + \binom{N}{2} = \binom{N+1}{2} = \frac{1}{2}N(N+1)$ Korrelationsfunktionen determiniert. In der Praxis wird man vermutlich nur Kreuz-Korrelationsfunktionen benachbarter Grenzflächen brauchen und kann die anderen in guter Näherung zu Null ansetzen, d.h. man muß $2N - 1$ Korrelationsfunktionen bestimmen. Integriert man die Wahrscheinlichkeitsdichte aus Gleichung (2.53) über die $n-1$ Variablen $z_2, \dots, z_n$, so erhält man wieder die Gaußverteilung von Gleichung (2.47).

Die Verwendung eines Gaußschen Modells hat den Vorteil, nur von einigen wenigen Parametern bzw. Funktionen abzuhängen, die somit einer Bestimmung eher zugänglich sind, da alle Höhen-Höhen-Korrelationsfunktionen vom Prinzip her messbar sind mittels Röntgenstreuung (zumindest kann man vorgegebene Modelle an Röntgenstreuexperimente anfitzen). Zudem läßt sich ein Gaußsches Modell auch halbwegs über den Grenzwertsatz von Moivre-Laplace rechtfertigen, solange man großflächige Bauelemente untersucht (indem man diese großflächigen Bauelemente sich in eine sehr große Anzahl kleinflächiger Bauelemente unterteilt denkt).

2.4 Einfachbarrieren

In diesem Abschnitt wollen wir uns mit dem Transport am Γ -Punkt (Emitter und Kollektor sind direkte Halbleiter) in Einfachbarrieren bei kleinen Spannungen beschäftigen. Für kleine Spannungen (und kleinere Temperaturen) gibt es hier nur zwei wesentliche stromtragende Prozesse: Grenzflächenrauhigkeit und Tunneln durch resonante Zustände, die sich in der Barriere befinden. Je nach Materialsystem können dies Zustände im X- oder L-Band sein, die durch elastische Γ -X- oder Γ -L-Kopplung (für ein indirektes Barrierenmaterial; X für Wachstum in (100)-Richtung, L für (111)) populiert werden, aber auch Stößellen kommen in Frage. Ein störungstheoretischer Ansatz ist diesem Problem angemessen. Wir teilen den Hamiltonoperator in zwei Teile auf, den Emitter und den Kollektor (Abbildung 2.9). Die Wellenfunktionen der Lösungen der

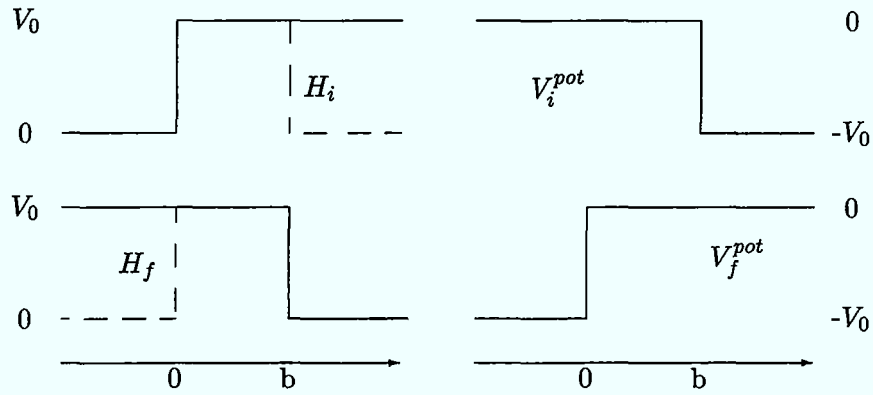


Abbildung 2.9: Zerlegung des Hamiltonoperators einer Einfachbarriere

Schrödinger-Gleichung mit den Hamiltonoperatoren H_i und H_f sind gegeben durch

$$\begin{aligned} & \text{[Blauer Balken]} & \text{[Blauer Balken]} & (2.55) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{[Blauer Balken]} & \text{[Blauer Balken]} & : z < b \\ & \text{[Blauer Balken]} & \text{[Blauer Balken]} & : z > b \end{aligned} \quad (2.56)$$

$k_z = \sqrt{\frac{2m^*E_z}{\hbar^2}}$, $\kappa = \sqrt{\frac{2m_b^*(V_0 - E_z)}{\hbar^2}}$, m^* ist die effektive Masse in Emitter und Kollektor, m_b^* die effektive Masse in der Barriere, b ist die Barrierendicke, V_0 ist die effektive Barrierenhöhe (effektiver Bandoffset im Γ -Band), V das Volumen und

$$e^{i\alpha} = \frac{m_b^*ik + m^*\kappa}{m_b^*ik - m^*\kappa} \quad (2.57)$$

Mit dieser Wahl von $e^{i\alpha}$ sind die Wellenfunktion und $\frac{1}{m^*(z)} \frac{d\psi}{dz}$ an der Grenzfläche stetig, wie dies unmittelbar aus dem effektiven Hamiltonoperator (2.20) (ohne Magnetfeld

bzw. mit Magnetfeld in z -Richtung) durch Integration über die infinitesimale Umgebung einer Grenzfläche folgt. Die Normierung der Wellenfunktionen ergibt sich aus dem Umstand, daß Emitter und Kollektor jeweils die Hälfte des Volumens einnehmen, da der Größe der Heterostruktur im Limes $L \rightarrow \infty$ (Ausdehnung in z -Richtung) keine Bedeutung zukommt. In praktischen Rechnungen sind die folgenden trigonometrischen Beziehungen hilfreich

$$e^{i\frac{\alpha}{2}} = \frac{im^* \kappa - m_b^* k}{\sqrt{m_b^{*2} k^2 + m^{*2} \kappa^2}} \quad (2.58)$$

$$\cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \frac{m_b^{*2} k^2}{m_b^{*2} k^2 + m^{*2} \kappa^2} \quad (2.59)$$

$$\cos(\alpha) = \frac{m_b^{*2} k^2 - m^{*2} \kappa^2}{m_b^{*2} k^2 + m^{*2} \kappa^2} \quad (2.60)$$

$$\sin(\alpha) = \frac{-2m_b^* m^* k \kappa}{m_b^{*2} k^2 + m^{*2} \kappa^2} \quad (2.61)$$

Die Übergangsrate vom Zustand i im Emitter zum Zustand f im Kollektor ist dann gegeben durch [30]

$$R_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_f) | \langle i | V_f + V_f \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} V_i | f \rangle |^2 \quad (2.62)$$

Die $V_{i,f}$ bestehen aus zwei Teilen, dem Korrekturterm für das Potentialprofil $V_{i,f}^{pot}$ und dem Grenzflächenrauhigkeitsterm V_{int} .

$$\begin{aligned} V_i^{pot}(z) &= -V_0 \Theta(z - b) \\ V_f^{pot}(z) &= -V_0 \Theta(-z) \\ V_{int}(z, \vec{r}_{||}) &= -V_0 [\Theta(z_1(\vec{r}_{||}) - z) - \Theta(-z) + \Theta(z - z_2(\vec{r}_{||}) - b) - \Theta(z - b)] \\ V_i(z, \vec{r}_{||}) &= V_i^{pot}(z) + V_{int}(z, \vec{r}_{||}) \\ V_f(z, \vec{r}_{||}) &= V_f^{pot}(z) + V_{int}(z, \vec{r}_{||}) \end{aligned} \quad (2.63)$$

Die Mittelung über die Grenzflächenrauhigkeit kann man vereinfachen, indem man $V_{int}(z, \vec{r}_{||})$ mit Hilfe von Verschiebungsoperatoren darstellt (die Potenzreihenentwicklung dieser Operatoren führt gerade auf eine Taylor-Reihenentwicklung des Streupotentials in z_1 und z_2):

$$\begin{aligned} V_{int}(z, \vec{r}_{||}) &= -V_0 [\delta(z) z_1(\vec{r}_{||}) - \delta'(z) z_1(\vec{r}_{||})^2/2! + \dots \\ &\quad - \delta(z - b) z_2(\vec{r}_{||}) + \delta'(z - b) z_2(\vec{r}_{||})^2/2! - \dots] \\ &= -V_0 \left[\left(e^{-z_1(\vec{r}_{||}) \frac{d}{dz}} - 1 \right) \Theta(-z) + \left(e^{-z_2(\vec{r}_{||}) \frac{d}{dz}} - 1 \right) \Theta(z - b) \right] \end{aligned} \quad (2.64)$$

Die Ableitungen sind im Distributionssinn zu verstehen. $e^{-z_1(\vec{r}_{||}) \frac{d}{dz}}$ ist der Operator für eine Verschiebung um $-z_1(\vec{r}_{||})$ am Ort $\vec{r}_{||}$, wenn die nachfolgende Funktion als Funktion

von $+z$ geschrieben ist. Eine notwendige Voraussetzung, nur den Term erster Ordnung behalten zu können, ist $\sigma_1, \sigma_2 < 1/\kappa$, so daß sich die Wellenfunktionen über die Breite der Grenzfläche kaum ändern. In GaAs/AlAs Heterostrukturen ist $\kappa \leq 0.4/\text{ML}$ und $\sigma \approx 1 - 2 \text{ ML}$ (1 ML=1 Monolage=1/2 Gitterkonstante sind 0.28nm), so daß die Bedingung nicht immer gut erfüllt ist. Auf der anderen Seite bedeutet dies, daß in diesen Heterostrukturen bereits eine 5 ML AlAs Barriere als eine dicke Barriere anzusehen ist, für die Störungstheorie 1.Ordnung sinnvolle Ergebnisse liefert.

$$R_{if} = \int \int d^3r d^3r' \psi_f^*(\vec{r}') \psi_f(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}') \psi_i^*(\vec{r}) \left(V_f^{pot}(\vec{r}) + V_{int}(\vec{r}) \right) \left(V_f^{pot}(\vec{r}') + V_{int}(\vec{r}') \right) \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_f) \quad (2.65)$$

Viele theoretische Berechnungen bezüglich Grenzflächenrauhigkeit verwenden zum Teil höhere Ordnungen Störungstheorie (bzw. Greensche Funktionen), benutzen aber implizit nur die niedrigste Ordnung aus der Mittelung über die Grenzflächenrauhigkeit ([84, 80, 82]), indem ein Streupotential proportional zu $\delta(z)$ angenommen wird. Andersherum ist es sinnvoller.

Innerhalb eines Matrixelementes von $V_{int}(z, \vec{r}_{||})$ verwenden wir die adjungierten Operatoren, die auf die Wellenfunktionen wirken („partielle Integration“)

$$\begin{aligned} & \int d^3r \psi_{\vec{k}_f}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) V_{int}(\vec{r}) \\ &= -V_0 \int d^3r \left[\Theta(-z) \left(e^{z_1(\vec{r}_{||}) \frac{d}{dz}} - 1 \right) + \Theta(z-b) \left(e^{z_2(\vec{r}_{||}) \frac{d}{dz}} - 1 \right) \right] \psi_{\vec{k}_f}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) \\ &= -V_0 \int d^2r_{||} \int_{-\infty}^0 dz \left(e^{z_1(\vec{r}_{||}) \frac{d}{dz}} - 1 \right) \psi_{\vec{k}_f}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) \\ & \quad - V_0 \int d^2r_{||} \int_b^{\infty} dz \left(e^{z_2(\vec{r}_{||}) \frac{d}{dz}} - 1 \right) \psi_{\vec{k}_f}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (2.66)$$

In der Übergangsrate (2.65) treten Produkte der Form $V_f^{pot}(\vec{r}) V_f^{pot}(\vec{r}')$ (Term 1), $V_f^{pot}(\vec{r}) V_{int}(\vec{r}')$ (Term 2), $V_f^{pot}(\vec{r}') V_{int}(\vec{r})$ (Term 3) und $V_{int}(\vec{r}) V_{int}(\vec{r}')$ (Term 4) auf. Term 1 alleine liefert unmittelbar mit Gleichung (2.40) den Transmissionskoeffizienten des ungestörten Problems. Das Matrixelement des Potentialkorrekturterms ist gegeben durch

$$\text{[Redacted Equation]} \quad (2.67)$$

Dies führt zu einem Transmissionskoeffizienten ohne Grenzflächenrauhigkeit von

$$\text{[Redacted Equation]} = \text{[Redacted Equation]} \quad (2.68)$$

($V_0 = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_b^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$). Hier wurde noch die Summe in ein Integral überführt $\sum_{k_{zf} > 0} \rightarrow L/2\pi \int_0^\infty dk_z$ (die Ausdehnung des Emitters/Kollektors ist $L/2$!) und $\delta(E_{zi} - E_{zf}) = \frac{m^*}{\hbar^2 k_{zi}} \delta(k_{zi} - k_{zf})$ benutzt ($k_{zi} \geq 0$!). Für $m_b^* = m^*$ erkennt man leicht die Übereinstimmung mit der Formel (6.45) für den Transmissionskoeffizienten dicker Barrieren in Merzbacher[38] (wobei $b = 2a$ zu berücksichtigen ist). Wir fahren nun fort für den Fall nicht verschwindender Rauigkeit. Wir setzen V_{int} und V_f^{pot} in Gleichung (2.65) ein und erhalten für die Produkte

$$\begin{aligned}
 V_{int}(\vec{r})V_{int}(\vec{r}') &= V_0^2 \left[\Theta(-z)\Theta(-z') \left(e^{z_1(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz} + z_1(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} - e^{z_1(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz}} - e^{z_1(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} + 1 \right) \right. \\
 &\quad + \Theta(-z)\Theta(z' - b) \left(e^{z_1(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz} + z_2(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} - e^{z_1(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz}} - e^{z_2(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} + 1 \right) \\
 &\quad + \Theta(z - b)\Theta(-z') \left(e^{z_2(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz} + z_1(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} - e^{z_2(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz}} - e^{z_1(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} + 1 \right) \\
 &\quad \left. + \Theta(z - b)\Theta(z' - b) \left(e^{z_2(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz} + z_2(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} - e^{z_2(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz}} - e^{z_2(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} + 1 \right) \right] \quad (2.69)
 \end{aligned}$$

und

$$V_f^{pot}(\vec{r})V_f^{pot}(\vec{r}') = V_0^2 \Theta(-z)\Theta(-z') \quad (2.70)$$

sowie

$$\begin{aligned}
 V_f^{pot}(\vec{r})V_{int}(\vec{r}') + V_{int}(\vec{r})V_f^{pot}(\vec{r}') &= \\
 &= V_0^2 \left[\Theta(-z)\Theta(-z') \left(e^{z_1(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} - 1 \right) \right. \\
 &\quad + \Theta(-z)\Theta(z' - b) \left(e^{z_2(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} - 1 \right) \\
 &\quad + \Theta(-z)\Theta(-z') \left(e^{z_1(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz}} - 1 \right) \\
 &\quad \left. + \Theta(z - b)\Theta(-z') \left(e^{z_2(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz}} - 1 \right) \right] \quad (2.71)
 \end{aligned}$$

Alles zusammengefaßt ergibt einen kombinierten Übergangsoperator

$$\begin{aligned}
 (V_f^{pot}(\vec{r}) + V_{int}(\vec{r})) (V_f^{pot}(\vec{r}') + V_{int}(\vec{r}')) &= \\
 &= V_0^2 \left[\Theta(-z)\Theta(-z') e^{z_1(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz} + z_1(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} \right. \\
 &\quad + \Theta(-z)\Theta(z' - b) \left(e^{z_1(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz} + z_2(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} - e^{z_1(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz}} \right) \\
 &\quad + \Theta(z - b)\Theta(-z') \left(e^{z_2(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz} + z_1(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} - e^{z_1(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} \right) \\
 &\quad \left. + \Theta(z - b)\Theta(z' - b) \left(e^{z_2(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz} + z_2(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} - e^{z_2(\vec{r}_{\parallel})\frac{d}{dz}} - e^{z_2(\vec{r}'_{\parallel})\frac{d}{dz'}} + 1 \right) \right] \quad (2.72)
 \end{aligned}$$

Wir mitteln diesen Operator mit der Wahrscheinlichkeitsdichte (2.47) bzw. (2.48) unter Verwendung von

$$\begin{aligned} & \left(\prod_{i=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} dz_i \right) e^{\left(\sum_{j=1}^n z_j \beta_j \right)} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \det(C)}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{i,k} (C^{-1})_{ik} z_i z_k} \\ & = e^{\frac{1}{2} \sum_{i,k} (C)_{ik} \beta_i \beta_k} \end{aligned} \quad (2.73)$$

(mit beliebigen, komplexen β_i ; für uns interessant ist in dieser Ordnung der Störungstheorie nur der Fall $n=1$ bzw. $n=2$) über verschiedene Grenzflächenkonfigurationen und erhalten

$$\begin{aligned} & \left\langle \left(V_f^{pot}(\vec{r}) + V_{int}(\vec{r}) \right) \left(V_f^{pot}(\vec{r}') + V_{int}(\vec{r}') \right) \right\rangle = \\ & V_0^2 \left[\Theta(-z) \Theta(-z') e^{\left(\frac{\sigma_1^2}{2} \frac{d^2}{dz^2} + C_{11}(\vec{r}_{||} - \vec{r}'_{||}) \frac{d}{dz} \frac{d}{dz'} + \frac{\sigma_2^2}{2} \frac{d^2}{dz'^2} \right)} \right. \\ & + \Theta(-z) \Theta(z' - b) \left(e^{\left(\frac{\sigma_1^2}{2} \frac{d^2}{dz^2} + C_{12}(\vec{r}_{||} - \vec{r}'_{||}) \frac{d}{dz} \frac{d}{dz'} + \frac{\sigma_2^2}{2} \frac{d^2}{dz'^2} \right)} - e^{\frac{\sigma_1^2}{2} \frac{d^2}{dz^2}} \right) \\ & + \Theta(z - b) \Theta(-z') \left(e^{\left(\frac{\sigma_2^2}{2} \frac{d^2}{dz^2} + C_{21}(\vec{r}_{||} - \vec{r}'_{||}) \frac{d}{dz} \frac{d}{dz'} + \frac{\sigma_1^2}{2} \frac{d^2}{dz'^2} \right)} - e^{\frac{\sigma_2^2}{2} \frac{d^2}{dz'^2}} \right) \\ & \left. + \Theta(z - b) \Theta(z' - b) \left(e^{\left(\frac{\sigma_2^2}{2} \frac{d^2}{dz^2} + C_{22}(\vec{r}_{||} - \vec{r}'_{||}) \frac{d}{dz} \frac{d}{dz'} + \frac{\sigma_2^2}{2} \frac{d^2}{dz'^2} \right)} - e^{\frac{\sigma_2^2}{2} \frac{d^2}{dz^2}} - e^{\frac{\sigma_2^2}{2} \frac{d^2}{dz'^2}} + 1 \right) \right] \end{aligned} \quad (2.74)$$

Hier wurde noch $C_{12}(\vec{r}_{||}) = C_{21}(\vec{r}_{||})$ verwendet. .

Im folgenden interessieren uns insbesondere zwei Fälle: Einmal der Fall, in dem alle lateralen Korrelationslängen sehr klein ($\lambda_{||} \rightarrow 0$) sind, d.h. $k_f \cdot \lambda_{||} \ll 1$ (k_f ist der Fermiwellenvektor) zum anderen der Fall, in dem die Korrelationslängen sehr groß ($\lambda_{||} \rightarrow \infty$) sind. Eine unendlich große Korrelationslänge bedeutet physikalisch eine Korrelationslänge, die so groß wie die Längenausdehnung des getesteten Bauelements ist, da ein weiterer Anstieg der Korrelationslänge offenbar bedeutungslos ist. Die physikalisch relevante Längenausdehnung ist die in Gleichung (2.34) eingeführte minimale Größe der Dioden, über deren Fläche gemittelt werden kann. $\lambda_{||} \rightarrow \infty$ hat daher den anschaulichen Sinn

$$\begin{aligned} \lambda_{||} & > \lambda_{||\infty} = l_{min} \\ & = v_f \cdot \tau = \sqrt{\frac{2E_f}{m^*}} \frac{\hbar}{\Gamma} \end{aligned} \quad (2.75)$$

d.h. $\lambda_{||} > 0.1 \mu m$, wenn man für die Lebensdauer der Emitter- und Kollektorzustände Streuzeiten τ von typisch 10^{-12} s ansetzt, eine Masse von $0.07 m_e$ (GaAs) und $E_f \approx 20 - 30$ meV. In realen, mit MBE gewachsenen Strukturen aus GaAs/AlGaAs ist gegenwärtig $\lambda_{||} \approx 10 - 500$ nm [11, 12] und $k_f \approx 0.1 - 0.3/\text{nm}$, so daß in einigen Fällen

bereits heute dieser Fall der physikalisch relevante ist. Sollte sich die Qualität der Grenzflächen ([37]) in der weiteren Entwicklung von Wachstumsmethoden noch verbessern, so wird dies auch mit einem Anwachsen der lateralen Korrelationslängen verbunden sein (die Gebiete mit gleicher Grenzflächenlage werden größer werden), womit nur noch der Fall $\lambda_{||} \rightarrow \infty$ beim Transport zum Tragen kommt.

Kleine Korrelationslängen/Rauhigkeiten Im Fall sehr kleiner Korrelationslängen können wir in der Berechnung alle Korrelationsfunktionen C_{ik} durch 0 ersetzen, da die Bereiche, in denen sich die Korrelationsfunktionen von Null wesentlich unterscheiden ($\propto \lambda_{||}^2$), ebenfalls verschwindend klein sind (der Träger der Funktionen reduziert sich auf einen Punkt im Grenzfall $\lambda_{||} \rightarrow 0$, gleichzeitig bleibt der maximale Funktionswert konstant, so daß man in den Integralen C_{ik} durch 0 ersetzen darf). Sämtliche Integrale zerfallen hierdurch in einfache Produkte von Integralen. Man erhält hiermit den Transmissionskoeffizienten

$$\begin{aligned}
 & \left[\text{Equation content obscured by black box} \right] \\
 & = \\
 & \approx \\
 & \approx
 \end{aligned}$$

Die vorletzte Näherung ist sinnvoll, solange $\kappa k_z \cdot \sigma_i^2 \ll 1$ gilt und beruht auf einer Entwicklung der trigonometrischen Funktionen bis zu linearen Gliedern in $\kappa k_z \cdot \sigma_i^2$. Die Bedingung ist in typischen GaAs/AlAs Strukturen noch bei Rauhigkeiten bis 3ML gut erfüllt. Die letzte Näherung ist sinnvoll, falls $k_z^2 \ll \kappa^2$ und die Masse in den Barrieren nicht um ein Vielfaches größer ist als in den Zuleitungen, was ebenfalls in typischen GaAs/AlAs Strukturen erfüllt ist. Dies bedeutet für eine AlAs Barriere in GaAs mit $\sigma_1 = \sigma_2 = 1\text{ML}$ eine Transmissionserhöhung um einen Faktor 1.7, für $\sigma_1 = \sigma_2 = 2\text{ML}$

entsprechend ein Faktor 5.5, für $\sigma_1 = \sigma_2 = 3\text{ML}$ ein Faktor 25. Die Grenzflächenrauigkeit übt auch in diesem Grenzfall keinen kleinen Effekt auf die Leitfähigkeit aus, wie fälschlicherweise z.B. von Johansson [82] behauptet. Für $\sigma_i \rightarrow 0$ erkennt man leicht den Übergang zu dem Spezialfall ohne Grenzflächenrauigkeit.

Eine etwas bessere Näherung erhält man, in dem man um den Fall $C_{ik} = 0$ eine Reihenentwicklung macht. Dies sollte auch für etwas größere Korrelationslängen noch akzeptable Ergebnisse liefern ($k_{\parallel} \lambda_{\parallel} < 1$). In nächster Ordnung erhält man die folgenden Zusatzterme im Übergangsoperator

$$\begin{aligned} & \langle (V_f^{\text{pot}}(\vec{r}) + V_{\text{int}}(\vec{r})) (V_f^{\text{pot}}(\vec{r}') + V_{\text{int}}(\vec{r}')) \rangle = \\ & V_0^2 \left[\Theta(-z)\Theta(-z')e^{\left(\frac{\sigma_1^2}{2}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\sigma_2^2}{2}\frac{d^2}{dz'^2}\right)} C_{11}(\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}'_{\parallel}) \frac{d}{dz} \frac{d}{dz'} \right. \\ & + \Theta(-z)\Theta(z' - b)e^{\left(\frac{\sigma_1^2}{2}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\sigma_2^2}{2}\frac{d^2}{dz'^2}\right)} C_{12}(\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}'_{\parallel}) \frac{d}{dz} \frac{d}{dz'} \\ & + \Theta(z - b)\Theta(-z')e^{\left(\frac{\sigma_2^2}{2}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\sigma_1^2}{2}\frac{d^2}{dz'^2}\right)} C_{12}(\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}'_{\parallel}) \frac{d}{dz} \frac{d}{dz'} \\ & \left. + \Theta(z - b)\Theta(z' - b)e^{\left(\frac{\sigma_2^2}{2}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{\sigma_2^2}{2}\frac{d^2}{dz'^2}\right)} C_{22}(\vec{r}_{\parallel} - \vec{r}'_{\parallel}) \frac{d}{dz} \frac{d}{dz'} \right] \quad (2.79) \end{aligned}$$

Um die Größe dieses Terms abzuschätzen, berechnen wir ihn für den Fall verschwindender Kreuzkorrelation, d.h. $C_{12} = 0$. Der erste Term in obiger Gleichung liefert einen Beitrag zum Transmissionskoeffizienten von

$$\begin{aligned} T_{C_{11}}(E_z, k_{\parallel}) = & \frac{m^* V_0^2}{2\pi \hbar^4} \int_0^{\sqrt{k_z^2 + k_{\parallel}^2}} dk_{\parallel f} \int_0^{2\pi} d\phi_{k_{\parallel f}} \frac{k_{\parallel f} \cos^2\left(\frac{\alpha_f}{2}\right)}{k_z k_{zf}} e^{-2\kappa_f b} C_{11}(\vec{q}_{\parallel}) \\ & \left(e^{-i\frac{\alpha_i}{2}} (\kappa_f + ik_z) e^{\left(\frac{\sigma_1^2}{2}(\kappa_f + ik_z)^2\right)} + e^{i\frac{\alpha_i}{2}} (\kappa_f - ik_z) e^{\left(\frac{\sigma_1^2}{2}(\kappa_f - ik_z)^2\right)} \right)^2 \quad (2.80) \end{aligned}$$

mit $\vec{q}_{\parallel} = \vec{k}_{\parallel f} - \vec{k}_{\parallel}$, $k_{zf} = \sqrt{k_z^2 + k_{\parallel}^2 - k_{\parallel f}^2}$ etc. und $C_{11}(\vec{q}_{\parallel}) = \frac{1}{2\pi} \int d^2 r_{\parallel} e^{i\vec{q}_{\parallel} \vec{r}_{\parallel}} C_{11}(\vec{r}_{\parallel})$. Einsetzen der trigonometrischen Beziehungen und verwenden gleicher Näherungen wie oben sowie $\kappa_f \approx \kappa_i$ (hohe Barrieren) liefert

$$\begin{aligned} T_{C_{11}}(E_z, k_{\parallel}) \approx & \left(\frac{m_b^*}{m^*} + \kappa^2 \sigma_1^2 \right)^2 e^{(\sigma_1^2 \kappa^2)} e^{-2\kappa b} \int_0^{\sqrt{k_z^2 + k_{\parallel}^2}} dk_{\parallel f} k_{\parallel f} k_z k_{zf} \cdot \\ & \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi_{k_{\parallel f}} C_{11}(\vec{q}_{\parallel}) \quad (2.81) \end{aligned}$$

Für $T_{C_{22}}(E_z, k_{\parallel})$ erhält man entsprechend

$$T_{C_{22}}(E_z, k_{\parallel}) \approx \left(\frac{m_b^*}{m^*} + \kappa^2 \sigma_2^2 \right)^2 e^{(\sigma_2^2 \kappa^2)} e^{-2\kappa b} \int_0^{\sqrt{k_z^2 + k_{\parallel}^2}} dk_{\parallel f} k_{\parallel f} k_z k_{zf} \cdot$$

$$\text{[REDACTED]} \quad (2.82)$$

Um hier weiterzukommen muß man konkrete Annahmen über die Korrelationsfunktionen machen. Oftmals Verwendung in der Beschreibung von Röntgenstreuung an rauen Grenzflächen findet die Sinha-Funktion[39] mit

$$C(\vec{r}_{\parallel}) = \sigma^2 e^{\left(-\frac{|\vec{r}_{\parallel}|}{\lambda_{\parallel}}\right)^{2h}} \quad (2.83)$$

die mit Modellen der kinetischen Aufrauhung beim Wachstum (Selbstähnlichkeit) in Einklang steht ($0 < h \leq 1$) [11, 13]. Für mit MBE gewachsene GaAs/AlAs Grenzflächen deuten sich h -Werte um 0.2 bis 0.5 als realistisch an [11, 12]. Solche Untersuchungen muß man Messungen gegenüberhalten, denen zu Folge die Fouriertransformierte der Höhen-Höhen-Korrelationsfunktion von *mit Wachstumsstops* in der MBE gewachsenen GaAs/AlAs mit wachsendem Wellenvektorübertrag q nicht monoton fällt [14, 9]. Die allgemeine Verwendbarkeit der Sinha-Funktion für mit MBE gewachsene GaAs/AlAs Grenzflächen ist daher fraglich. Um zumindest einen halbwegs quantitativen Einblick zu erlangen und die vermutliche Größenordnung des Stromes abzuschätzen, reicht es, ein Gaußsches Modell zu verwenden und anzunehmen (wie oben schon vorweggenommen), daß die Rauigkeit der beiden unterschiedlichen Grenzflächen unkorreliert ist, eine Annahme, die vermutlich ebenfalls nicht zutreffend ist[12]. In der folgenden Rechnung ist deshalb $h=1$ gewählt. Ein Vorteil liegt in der größtenteils analytischen Behandelbarkeit dieses Falles.

$$\text{[REDACTED]} \quad (2.84)$$

d.h.

$$\text{[REDACTED]} \quad (2.85)$$

I_0 ist die modifizierte Besselfunktion nullter Ordnung. Dies führt zu

$$\text{[REDACTED]} \quad (2.86)$$

und entsprechend

$$\text{[REDACTED]} \quad (2.87)$$

Das Endresultat für den Transmissionskoeffizienten bei kleinen Korrelationslängen lautet (wenn die Rauigkeiten der Grenzflächen untereinander unkorreliert sind)

$$T_{\lambda_{||}\text{klein}}(E_z, k_{||}) = T_{\lambda_{||}=0}(E_z) + T_{C_{11}}(E_z, k_{||}) + T_{C_{22}}(E_z, k_{||}) \quad (2.88)$$

Die Korrekturterme verschwinden, wie nicht anders zu erwarten, für $\lambda_{||} \rightarrow 0$. Sind die Rauigkeiten klein ($\kappa\sigma \leq \frac{1}{4}$, d.h. in AlAs/GaAs-Strukturen $\sigma \leq 0.6ML$), dann ist das obige Resultat (Gleichung (2.86)) auch sinnvoll für beliebige Korrelationslängen (die Korrekturterme höherer Ordnung sind klein, da sie einen Vorfaktor $(\kappa\sigma)^2/2!$ erhalten). Für $\lambda_{||} \rightarrow \infty$ erhält man nur einen Beitrag für $k_{||f} = k_{||}$, da für große z gilt

$$I_0(z) \approx \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}} \quad (2.89)$$

Somit ist

$$\begin{aligned} & \left[\frac{m_b^*}{m^*} + \kappa^2 \sigma_1^2 \right]^2 k_z^2 \cdot \sigma_1^2 e^{(\sigma_1^2 \kappa^2)} e^{-2\kappa b} \\ & \quad \cdot \left[\frac{m_b^*}{m^*} + \kappa^2 \sigma_1^2 \right]^2 k_z^2 \cdot \sigma_1^2 e^{(\sigma_1^2 \kappa^2)} e^{-2\kappa b} \end{aligned} \quad (2.90)$$

d.h.

$$T_{C_{11}}^{\lambda=\infty}(E_z, k_{||}) \approx \left(\frac{m_b^*}{m^*} + \kappa^2 \sigma_1^2 \right)^2 k_z^2 \cdot \sigma_1^2 e^{(\sigma_1^2 \kappa^2)} e^{-2\kappa b} \quad (2.91)$$

Wir wollen den Korrelationsterm weiter Abschätzen für $k_{||} \cdot \lambda_{||} < 1$. In diesem Fall kann man sowohl die Exponential- als auch die Besselfunktion durch ihren Wert an der Stelle Null nähern. Hiermit ist

$$\begin{aligned} & \left[\frac{m_b^*}{m^*} + \kappa^2 \sigma_1^2 \right]^2 k_z^2 \cdot \sigma_1^2 e^{(\sigma_1^2 \kappa^2)} e^{-2\kappa b} \\ & \quad \cdot \left[\frac{m_b^*}{m^*} + \kappa^2 \sigma_1^2 \right]^2 k_z^2 \cdot \sigma_1^2 e^{(\sigma_1^2 \kappa^2)} e^{-2\kappa b} \end{aligned} \quad (2.92)$$

Nimmt man an, daß nur eine Grenzfläche rau ist, setzt $m^* \approx m_b^*$ und setzt $T_{C_{11}}(E_z, k_{||})$ und $T_{\lambda_{||}=0}(E_z)$ ins Verhältnis, so erhält man hierfür die Abschätzung

$$\frac{T_{C_{11}}(E_z, k_{||})}{T_{\lambda_{||}=0}(E_z)} \quad (2.93)$$

$$\begin{aligned} & \left[\frac{m_b^*}{m^*} + \kappa^2 \sigma_1^2 \right]^2 k_z^2 \cdot \sigma_1^2 e^{(\sigma_1^2 \kappa^2)} e^{-2\kappa b} \\ & \quad \cdot \left[\frac{m_b^*}{m^*} + \kappa^2 \sigma_1^2 \right]^2 k_z^2 \cdot \sigma_1^2 e^{(\sigma_1^2 \kappa^2)} e^{-2\kappa b} \end{aligned} \quad (2.94)$$

(k_f ist der Fermiwellenvektor) Die letzte Abschätzung gilt in typischen GaAs/AlAs-Strukturen für Rauigkeiten mit σ bis 3ML und für Elektronen, die für den Transport bei kleinen Spannungen am wichtigsten sind (mit Fermienergie). Außerdem wurde $k_f \cdot \lambda_{||} < 1$ verwendet. Nur dort, wo $T_{\lambda_{||}=0}(E_z)$ selbst verschwindet ($k_z \rightarrow 0$), ist $T_{C_{11}}(E_z, k_{||})$ von gleicher Größenordnung oder größer als $T_{\lambda_{||}=0}(E_z)$. $T_{C_{11}}(E_z, k_{||})$ stellt folglich in typischen GaAs/AlAs-Strukturen in diesem Fall nur eine kleine Korrektur zu $T_{\lambda_{||}=0}(E_z)$ bzw. in der Leitfähigkeit dar.

schreibt und eine Mittelung unmittelbar dieses Transmissionskoeffizienten mit der Wahrscheinlichkeitsdichte ($C_{ik} \rightarrow r_{ik} \sigma_i \sigma_k$)

$$\overline{C_{ik}} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} C_{ik} r_{ik} \sigma_i \sigma_k d\sigma_i d\sigma_k \quad (2.98)$$

vornimmt. Der für die obige Mittelung verantwortliche Term steckt in den Termen mit $\Theta(-z)\Theta(z' - b)$ und $\Theta(z - b)\Theta(-z')$ des Übergangsoperators. Anschaulich hat man es mit einer Parallelschaltung von Einfachbarrieren mit unterschiedlichen Barrierendicken und -lagen zu tun, deren Stufen soweit auseinander liegen, daß man Streuung an ihnen vernachlässigen kann. Mit derselben Methode kann man entsprechend für beliebige Bauelemente Grenzflächenrauhigkeit mit großen Korrelationslängen einschließen, in dem man den Transmissionskoeffizienten des ungestörten Problems wie oben über unterschiedliche Grenzflächenlagen mittelt. Dies ist in Abschnitt (3.2) auch für resonante Tunneldioden durchgeführt worden. Sind die Rauigkeiten der beiden Grenzflächen unkorreliert ($r_{12} = 0$), so erhält man in diesem Grenzfall für eine AlAs Barriere in GaAs mit $\sigma_1 = \sigma_2 = 1\text{ML}$ eine Transmissivitätserhöhung um einen Faktor 1.7, für $\sigma_1 = \sigma_2 = 2\text{ML}$ ein Faktor 8.9, für $\sigma_1 = \sigma_2 = 3\text{ML}$ ein Faktor 140. An dem raschen Anwachsen dieser Faktoren erkennt man, wie wichtig eine genaue Kontrolle (Verringerung) der Grenzflächenrauhigkeit in modernen Quantenbauelementen mit vertikalem Transport ist, um reproduzierbare Bauelemente zu erhalten. Wie man sieht, ist dies auf keinen Fall ein zu vernachlässigender Effekt!

Zur Berechnung des Stromes durch einen resonanten Zustand im X- oder L-Band kann man die allgemeine Formel für den Strom durch Resonanzen wie für resonante Tunneldioden verwenden, die im nächsten Abschnitt hergeleitet wird. Eine andere Möglichkeit besteht darin, z.B. die Γ -X-Kopplung exakt mithilfe einer Mehrbandtransfermatrixmethode zu berechnen, da die hier auftauchende Kopplung nur die einhüllenden Wellenfunktionen und ihre erste Ableitung in Wachstumsrichtung an den Grenzflächen miteinander koppelt (siehe Abschnitt(2.1.5)). Der ganze Transport über Γ - und X-Bänder wird dann vollständig kohärent beschrieben. Da die Lebensdauern der X-Zustände relativ groß sind, sollte man dies nur zur Größenordnungsabschätzung tun. Dies ist in Abschnitt (3.2) für resonante Tunneldioden durchgeführt worden.

Hier wollen wir den Strom durch die energetisch hochgelegenen X-Zustände einer Einfachbarriere für kleine Spannungen störungstheoretisch berechnen, um die Abhängigkeit von den wichtigsten Parametern explizit zu sehen. Die hier auftretenden Resonanzen im X-Topf sind extrem schmal (Größenordnung μeV). Deshalb kann man ihre Breite auf der Skala der interessierenden Temperaturen vernachlässigen, selbst noch im 1K-Bereich. Aus der Formel für den Strom durch einen resonanten Zustand, die im nächsten Abschnitt hergeleitet werden wird, kann man für schmale Partialbreiten des Zustandes die folgende Formel herleiten

$$J = \frac{q}{h} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{dE} \frac{dC_{ik}}{dE} \frac{d\sigma_i}{dE} \frac{d\sigma_k}{dE} \quad (2.99)$$

Den Realteil der Selbstenergie haben wir innerhalb dieser Näherung ebenfalls vernachlässigt. Die letzte Näherung beruht auf dem Umstand, daß die Partialbreiten $\Gamma^L(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E_{\lambda_z} + E_{X||})$ und $\Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E_{\lambda_z} + E_{X||})$ nur relativ schwache Funktionen von $\vec{k}_{||}$ sind, wenn die effektive, zweidimensionale Masse im resonanten Zustand parallel zur Schicht sich nicht zu extrem unterscheidet von derjenigen im Emitter bzw. die Energie der Subbandkante des Topfes hoch genug liegt, was für den uns interessierenden Fall richtig ist ($m_{X||}^*$ ist die effektive zweidimensionale Masse in dem Zustand). Dies führt für kleine Spannungen zu

$$j = \frac{2\pi e k_b T V}{h^3} m_{X||}^* \Gamma_{\lambda_z} e^{\frac{E_f - E_{\lambda_z}}{k_b T}} \quad (2.100)$$

Hier wurde noch die für den Gleichgewichtsfall richtige Beziehung

$$\Gamma_{\lambda_z} = \frac{2\pi e k_b T V}{h^3} m_{X||}^* \Gamma_{\lambda_z} e^{\frac{E_f - E_{\lambda_z}}{k_b T}} \quad (2.101)$$

benützt und $E_{\lambda_z} \gg k_b T$ verwendet. Die Partialbreite ist störungstheoretisch mit der Kopplung aus dem ersten Abschnitt gegeben durch (ψ_i und ψ_λ beschreiben nur den z-abhängigen Teil der Wellenfunktion. Der parallele Impuls bleibt erhalten)

$$\Gamma_{\lambda_z} = \frac{2\pi e k_b T V}{h^3} m_{X||}^* \Gamma_{\lambda_z} e^{\frac{E_f - E_{\lambda_z}}{k_b T}} \quad (2.102)$$

wobei man hier ein energienormiertes ψ_i verwenden muß

$$\frac{1}{\sqrt{L}} \rightarrow \left(\frac{m}{2h^2 E_z} \right)^{\frac{1}{4}}$$

Die Energie von ψ_i muß hier gleich E_{λ_z} sein (an dieser Stelle kommt an sich die Abhängigkeit Γ_{λ_z} 's von $\vec{k}_{||}$ zustande, da man hier $E_z = E_{\lambda_z} + \hbar^2 k_{||}^2 (1/2m_{X||}^* - 1/2m_\Gamma^*)$ verwenden muß, wenn man ganz korrekt rechnen will. Da aber E_λ groß ist im Vergleich zu thermischen Energien, ist die Abhängigkeit von $\vec{k}_{||}$ im wichtigen Bereich nur schwach). Bei resonanten Tunneldioden hängt Γ exponentiell von der Barrierendicke ab. Dies überträgt sich folglich auch auf den Strom.

2.5 Resonante Tunnelioden

Um den Transport in Resonanten Tunnelioden in Anwesenheit von Streuprozessen theoretisch zu beschreiben, verwenden wir Gleichung (2.36), in der wir noch eine schwache Streustärke-Näherung durchführen, das heißt wir verwenden nur die Diagonalelemente der Resolventen mit $\lambda = \mu$: Hiermit ergibt sich der Strom zu

$$\begin{aligned}
 I &= \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{i,f,\lambda_z,\vec{k}_{\parallel}} (f_L(E_i) - f_R(E_i)) \delta(E_i - E_f) | \langle i | V_f | \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} \rangle |^2 \\
 &= \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{i,f,\lambda_z,\vec{k}_{\parallel}} \int dE \delta(E - E_i) \delta(E - E_f) (f_L(E) - f_R(E)) \\
 &\quad | \langle i | V_f | \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} \rangle |^2 \left| \langle \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} | \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} | \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} \rangle \right|^2 | \langle \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} | V_i | f \rangle |^2
 \end{aligned}$$

d.h.

$$\begin{aligned}
 &= \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{i,f,\lambda_z,\vec{k}_{\parallel}} \int dE \delta(E - E_i) \delta(E - E_f) (f_L(E) - f_R(E)) \\
 &\quad | \langle i | V_f | \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} \rangle |^2 \left| \langle \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} | \frac{1}{E - H + i\epsilon} | \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} \rangle \right|^2 | \langle \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} | V_i | f \rangle |^2
 \end{aligned} \tag{2.103}$$

(der Faktor 2 kommt wieder aus der angenommenen Spinentartung) mit

$$\begin{aligned}
 &= \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{i,f,\lambda_z,\vec{k}_{\parallel}} \int dE \delta(E - E_i) \delta(E - E_f) (f_L(E) - f_R(E)) \\
 &\quad | \langle i | V_f | \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} \rangle |^2 \left| \langle \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} | \frac{1}{E - H + i\epsilon} | \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} \rangle \right|^2 | \langle \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} | V_i | f \rangle |^2
 \end{aligned} \tag{2.104}$$

und

$$\begin{aligned}
 &= \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{i,f,\lambda_z,\vec{k}_{\parallel}} \int dE \delta(E - E_i) \delta(E - E_f) (f_L(E) - f_R(E)) \\
 &\quad | \langle i | V_f | \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} \rangle |^2 \left| \langle \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} | \frac{1}{E - H + i\epsilon} | \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} \rangle \right|^2 | \langle \lambda_z, \vec{k}_{\parallel} | V_i | f \rangle |^2
 \end{aligned} \tag{2.105}$$

sowie

$$\rho(E, \vec{k}_{\parallel}, \lambda_z) = -\frac{1}{\pi} \frac{\text{Im}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_{\parallel}, E))}{(E - E(\lambda_z, \vec{k}_{\parallel}) - \text{Re}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_{\parallel}, E)))^2 + \text{Im}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_{\parallel}, E))^2} \tag{2.106}$$

$\rho(E, \vec{k}_{\parallel}, \lambda_z)$ ist die spektrale Dichte des Zustandes und hat bereits auch ohne andere Streuprozesse aufgrund der elastischen Kopplung an die Zuleitungen über den Potentialkorrekturterm näherungsweise die Gestalt einer Lorentzkurve. Um die Selbstenergie zu berechnen, könnte man versucht sein, die Eigenzustände des Topf-Hamiltonoperators zu verwenden. In RTDs muß man in der Regel allerdings im allgemeinen ein anderes Basissystem als die nur auf wenige Subbänder beschränkten Eigenzustände des Topf-Hamiltonoperators in der Selbstenergie verwenden, um eine realistische Beschreibung der Struktur mit geringem mathematischen Aufwand zu erreichen. Die Aufgabe besteht darin, eine Näherung für Q_λ zu finden, die auch die Kontinuumszustände sinnvoll erfaßt. Alle für uns in dieser Arbeit relevanten Zustände haben Energien weit

unterhalb der Barrierenhöhe. Deshalb sind z.B. Zustände von Emitter- und Kollektor-Hamiltonoperatoren einer RTD mit diesen Energien in exzellenter Näherung orthogonal ($\langle \vec{k}_i | \vec{k}_f \rangle \approx 0$) zueinander (für $L \rightarrow \infty$ wird dies exakt für Energien unterhalb der Barrierenhöhe) und es bietet sich folgende Näherung für Q_λ in der Selbstenergie (Gleichung 2.39) an (wir schreiben für λ jetzt $(\lambda_z, \vec{k}_\parallel)$ d.h. λ_z charakterisiert ein Subband, P_i und P_f sind Projektoren auf Emitter- bzw. Kollektorzustände mit Energien unterhalb der Barrierenhöhe):

$$\begin{aligned} Q_\lambda &\approx P_i + P_f + P_{\lambda_z}(1 - P_\lambda) \\ &= \left(\sum_{\vec{k}_i} |\vec{k}_i\rangle \langle \vec{k}_i| + \sum_{\vec{k}_f} |\vec{k}_f\rangle \langle \vec{k}_f| \right) \\ &\quad + \sum_{\vec{k}'_\parallel \neq \vec{k}_\parallel} |\lambda_z, \vec{k}'_\parallel\rangle \langle \lambda_z, \vec{k}'_\parallel| \end{aligned} \quad (2.107)$$

Der erste Term ist wichtig für Streuprozesse aus dem Topf heraus in die dort vorhandenen Emitter- und Kollektorzustände, während der letzte Intrasubbandstreuung umfaßt (innerhalb dieser Näherung ist Intersubbandstreuung vernachlässigt). Die Summation über $\vec{k}_f$, $\vec{k}_i$ und $\vec{k}_\parallel$ kann (muß) man hier auf Energien unter der Barrierenhöhe beschränken. Der Faktor $1 - P_\lambda$ ist nur wichtig für Streuprozesse, die den parallelen Impuls erhalten (d.h. nur für den kohärenten Transport), für alle anderen Streuprozesse ist er unwichtig, da dann $\vec{k}_\parallel$ in einer Integration das Maß null erhält (Kontinuum). Für alle echten Streuprozesse kann man deshalb

$$\begin{aligned} Q_\lambda &\approx P_i + P_f + P_{\lambda_z} \\ &= \sum_{\vec{k}_i} |\vec{k}_i\rangle \langle \vec{k}_i| + \sum_{\vec{k}_f} |\vec{k}_f\rangle \langle \vec{k}_f| + |\lambda_z\rangle \langle \lambda_z| \end{aligned} \quad (2.108)$$

verwenden. Läßt man den letzten Term weg, so kann man dies auch als Näherung zur Beschreibung des kohärenten Transportes verwenden. Das Resultat stimmt hervorragend überein mit einer exakten Rechnung (vgl. Abbildung 2.7). Sind zwei oder mehr Subbänder von Bedeutung (z.B. 1. und 2. Quasibindungszustand im Γ -Band oder jeweils 1. Quasibindungszustand im Γ - und im X-Band in der zweiten Barriere), so bietet sich die Näherung an

$$\begin{aligned} Q_\lambda &\approx \sum_{\vec{k}_i} |\vec{k}_i\rangle \langle \vec{k}_i| + \sum_{\vec{k}_f} |\vec{k}_f\rangle \langle \vec{k}_f| + \sum_i^{\mu_z^i \neq \lambda_z} |\mu_z^i\rangle \langle \mu_z^i| \\ &\quad + \sum_{\vec{k}'_\parallel \neq \vec{k}_\parallel} |\lambda_z, \vec{k}'_\parallel\rangle \langle \lambda_z, \vec{k}'_\parallel| \end{aligned} \quad (2.109)$$

die letzte Summe geht nur über die paar relevanten Subbänder ungleich λ_z . Für „echte“ Streuprozesse reduziert sich dies auf

$$Q_\lambda \approx \sum_{\vec{k}_i} |\vec{k}_i\rangle \langle \vec{k}_i| + \sum_{\vec{k}_f} |\vec{k}_f\rangle \langle \vec{k}_f| + |\lambda_z\rangle \langle \lambda_z| + \sum_i^{\mu_z^i \neq \lambda_z} |\mu_z^i\rangle \langle \mu_z^i| \quad (2.110)$$

Die ersten beiden Terme umfassen wieder die Herausstreue aus dem Topf in Emitter- und Kollektorzustände, der vorletzte umfaßt Intrasubbandstreuung und der letzte Intersubbandstreuung. Intrasubbandstreuung (und Intersubbandstreuung am Γ -Punkt allein) ist erst wichtig für größere Barrierendicken, wenn die Selbstenergie nicht mehr von der Kopplung an Emitter- und Kollektorzustände dominiert wird (aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit dieser Kopplung von der Barrierendicke). In typischen AlAs/GaAs-Resonanten Tunnelnioden findet dieser Übergang bei Barrierendicken von etwa 10-15 Monolagen statt. Für kleinere Barrierendicken kann man Intrasubbandstreuung in der Selbstenergie gänzlich vernachlässigen. Für sie sind nur Streuprozesse zwischen Topf und Emitter/Kollektor wesentlich (dies rechtfertigt auch gleichzeitig die schwache Streustärke-Näherung, die in unserem Fall lediglich verlangt, daß Streuung im Topf unwichtig ist!):

$$\begin{aligned} Q_\lambda &\approx P_i + P_f \\ &= \sum_{\vec{k}_i} |\vec{k}_i > \vec{k}_i| + \sum_{\vec{k}_f} |\vec{k}_f > \vec{k}_f| \end{aligned} \quad (2.111)$$

Strukturen, die von Intrasubbandstreuung (Selbstenergieeffekte im Topf) Gebrauch machen (z.B. Ein-Elektronen-Tunnelstrukturen), müssen deshalb große Barrierendicken aufweisen. Verwenden wir die obige Näherung für Q_λ in der Selbstenergie, und ersetzen in der Resolventen h durch h_i bzw. h_f , so erhalten wir

$$\text{Im}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_\parallel, E)) = -\frac{1}{2} \left(\sum_{\vec{k}_L} \Gamma_T^R(\lambda_z, \vec{k}_\parallel, \vec{k}_L, E) + \sum_{\vec{k}_R} \Gamma_T^L(\lambda_z, \vec{k}_\parallel, \vec{k}_R, E) \right) \quad (2.112)$$

Hier ist

$$\text{[Black box]} \quad (2.113)$$

etc. Eine andere Schreibweise für die Stromformel ist

$$I = \frac{2e}{h} \sum_{\vec{k}_L} \int dE (f_L(E) - f_R(E)) T(\vec{k}_L, E) \quad (2.114)$$

Mit

$$T(\vec{k}_L, E) = \sum_{\lambda_z, \vec{k}_\parallel} \frac{\Gamma_f^L(\lambda_z, \vec{k}_\parallel, \vec{k}_L, E) \sum_{\vec{k}_R} \Gamma_i^R(\lambda_z, \vec{k}_\parallel, \vec{k}_R, E)}{(\text{Im}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_\parallel, E)))^2} \frac{1}{\frac{(E - E(\lambda_z, \vec{k}_\parallel) - \text{Re}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_\parallel, E)))^2}{\text{Im}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_\parallel, E))^2} + 1} \quad (2.115)$$

als Transmissionskoeffizient eines einfallenden Kanals. Man kann sich überzeugen, daß $T(\vec{k}_L, E) \leq 1$ gilt. Das Gleichheitszeichen gilt, falls keine Spannung anliegt und nur kohärenter Transport vorliegt. Schnürt man die Tunneliode lateral so stark ein, daß man nur einen (spinentarteten) Kanal vorliegen hat (d.h. nur ein $\vec{k}_\parallel$), so ist die Leitfähigkeit begrenzt durch $2e^2/h$, ohne Spinentartung entsprechend durch e^2/h . Den Realteil

der Selbstenergie kann man erhalten über

(PP bezeichnet den Hauptwert des Integrals). Ist $\text{Im}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E))$ nur eine schwach veränderliche Funktion von E , so reduziert sich der Realteil von Σ in guter Näherung auf den ersten Term. Dies ist z.B. richtig, wenn rein kohärenter Transport vorliegt. Nur der Potentialkorrekturterm des Topf-Hamiltonoperators geht dann in Σ ein.

2.5.1 Quantentransport mit der Boltzmann-Gleichung?

In diesem Abschnitt werden wir einen weiteren Zugang zum Quantentransport in resonanten Tunneldioden darstellen und eine Formel für die Nichtgleichgewichtsverteilungsfunktion der Elektronen in einem Resonanten Zustand geben. Mithilfe dieser Funktion kann man dann z.B. den Strom, der durch diesen Resonanten Zustand fließt, berechnen.

Wir starten mit einer Bilanzgleichung für die Verteilungsfunktion. Zuerst nehmen wir an, daß der Resonante Zustand λ energetisch scharf definiert ist und daß es nur eine elastische Kopplung zwischen den Zuleitungen und dem Topf gibt. Später werden wir dann die Verschmierung des Zustandes aufgrund der Wechselwirkung auf einfache Art berücksichtigen.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int d\vec{k}_{||} f(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) &= \int d\vec{k}_{||} \left[\Gamma_{in}(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) - \Gamma_{out}(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) \right] \\ &= \int d\vec{k}_{||} \left[f_L(E) \Gamma^L(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_L, E) + \sum_{\vec{k}_R} f_R(E) \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E) \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\vec{k}_L} (1 - f_L(E)) \Gamma^L(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_L, E) - \sum_{\vec{k}_R} (1 - f_R(E)) \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E) \right] \end{aligned} \quad (2.117)$$

Diese Bilanzgleichung ist eine Boltzmann-Gleichung ohne explizites Erscheinen des elektrischen Feldes (dies steckt in der Gestalt der Wellenfunktionen und ist parallel zur Quantisierungsachse angenommen), nur der Streuterm ist beibehalten worden. Die Ein- und Ausstreuraten sind gegeben durch

$$\Gamma_{in}(E) = \sum_{\vec{k}_L} f_L(E) \Gamma^L(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_L, E) + \sum_{\vec{k}_R} f_R(E) \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E) \quad (2.118)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{out}(E) &= \sum_{\vec{k}_L} (1 - f_L(E)) \Gamma^L(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_L, E) \\ &\quad + \sum_{\vec{k}_R} (1 - f_R(E)) \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E) \end{aligned} \quad (2.119)$$

$$\Gamma_{in}^\lambda = \sum_{\vec{k}'_{||}} f(\lambda_z, \vec{k}'_{||}, t) \Gamma(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \lambda_z, \vec{k}'_{||}) \quad (2.120)$$

$$\Gamma_{out}^\lambda = \sum_{\vec{k}'_{||}} (1 - f(\lambda_z, \vec{k}'_{||}, t)) \Gamma(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \lambda_z, \vec{k}'_{||}) \quad (2.121)$$

f_L und f_R sind die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktionen der Zuleitungen und (in niedrigster Ordnung)

$$\Gamma^L(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_L, E) = 2\pi |< \lambda_z, \vec{k}_{||} | (\Delta H_{pot} + H_{scatt}) | \vec{k}_L >|^2 \delta(E(\vec{k}_L) - E) \quad (2.122)$$

$$\Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E) = 2\pi |< \lambda_z, \vec{k}_{||} | (\Delta H_{pot} + H_{scatt}) | \vec{k}_R >|^2 \delta(E(\vec{k}_R) - E) \quad (2.123)$$

Bis jetzt haben wir angenommen $E = E(\lambda, \vec{k}_{||})$. Hier sind wir nur interessiert am Fließgleichgewicht. Dies führt zu

$$f(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) = \frac{\Gamma_{in}(E)}{\Gamma_{in}(E) + \Gamma_{out}(E)} \quad (2.124)$$

Der Im-Topf-Streuterm hebt sich heraus aufgrund von Mikroreversibilität und der Symmetrie der Struktur. Der Gesamtstrom vom Topf zum Kollektor (R) ist

$$\begin{aligned} I &= I_{\lambda R} - I_{R\lambda} \\ &= \frac{2e}{\hbar} \sum_{\vec{k}_{||}} \sum_{\vec{k}_R} \left(f(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) (1 - f_R(E(\vec{k}_R))) - (1 - f(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E)) f_R(E(\vec{k}_R)) \right) \\ &\quad \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E) \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int dE \sum_{\vec{k}_{||}} \sum_{\vec{k}_R} \left(f(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) - f_R(E) \right) \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E) \delta(E - E(\lambda_z, \vec{k}_{||})) \\ &= \frac{2e}{\hbar} \int dE \sum_{\vec{k}_{||}} (f_L(E) - f_R(E)) \delta(E - E(\lambda_z, \vec{k}_{||})) \\ &\quad \frac{\sum_{\vec{k}_L} \Gamma^L(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_L, E) \sum_{\vec{k}_R} \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E)}{\sum_{\vec{k}_L} \Gamma^L(\lambda, \vec{k}_{||}, \vec{k}_L, E) + \sum_{\vec{k}_R} \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E)} \end{aligned} \quad (2.125)$$

Der Faktor zwei berücksichtigt den Spin (wir setzen Entartung voraus). Wir haben die dritte unabhängige Variable, die den Zustand im Topf beschreibt, mit der Einführung der spektralen Dichte wieder verfügbar gemacht. Die wichtigste Änderung im Quantentransport ist hier das Abweichen der spektralen Dichte von der Deltafunktionsgestalt. Wir müssen deshalb nur die Deltafunktion durch eine realistischere spektrale Dichte ersetzen, um eine bessere Näherung für den Strom (und z.B. die Teilchenzahl im Topf) zu erhalten.

$$\begin{aligned} I &= \frac{2e}{\hbar} \int dE \sum_{\vec{k}_{||}} (f_L(E) - f_R(E)) \rho(E, \vec{k}_{||}, \lambda_z) \\ &\quad \frac{\sum_{\vec{k}_L} \Gamma^L(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_L, E) \sum_{\vec{k}_R} \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E)}{\sum_{\vec{k}_L} \Gamma^L(\lambda, \vec{k}_{||}, \vec{k}_L, E) + \sum_{\vec{k}_R} \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, \vec{k}_R, E)} \end{aligned} \quad (2.126)$$

und

$$N(\lambda_z, \vec{k}_{||}) = \int dE f(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) \rho(E, \vec{k}_{||}, \lambda_z) \quad (2.127)$$

Die spektrale Dichte ist gegeben durch

$$\rho(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) = \frac{1}{\pi} \frac{\text{Im}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E))}{(E - E(\lambda_z, \vec{k}_{||}) - \text{Re}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E)))^2 + \text{Im}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E))^2} \quad (2.128)$$

Bereits ohne Streuprozesse im Topf hat ρ näherungsweise eine Lorentzform aufgrund der (elastischen) Kopplung an die Zuleitungen. Die einzige Größe, die zu bestimmen bleibt, ist die Selbstenergie.

Die oben gegebene Herleitung für die Verteilungsfunktion, den Strom und die Teilchenzahl ist nur heuristisch, gibt aber eine größere physikalische Einsicht in das Problem. Insbesondere die Bewegungsgleichung für die Verteilungsfunktion müßte man eigentlich mit Gedächtnisfunktionen schreiben. In der Regel ändert sich die Verteilungsfunktion aber nur auf Zeitskalen, die groß sind im Vergleich zu den anderen charakteristischen Zeiten, womit sich mittels einer Markovnäherung wieder eine Gleichung wie oben ergibt. Mit einer Kopplung an die Zuleitungen, die den parallelen Impuls erhält, reduzieren sich die obigen Formeln auf (mit einer passenden Definition von $\Gamma^{L,R}(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E)$)

$$\rho(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) = \frac{1}{\pi} \frac{\text{Im}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E))}{(E - E(\lambda_z, \vec{k}_{||}) - \text{Re}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E)))^2 + \text{Im}(\Sigma(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E))^2} \quad (2.129)$$

und

$$I = \frac{2e}{\hbar} \sum_{\vec{k}_{||}} \int dE (f_L(E) - f_R(E)) \frac{\Gamma^L(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E)}{\Gamma^L(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) + \Gamma^R(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E)} \rho(\lambda_z, \vec{k}_{||}, E) \quad (2.130)$$

Dies sind exakt die Formeln, die von Indlekofer et al. [41] und Niu [42] mit zeitabhängigen Greenschen Funktionen und unter einigen Näherungen erhalten worden sind. Das Fehlen der Unterscheidung zwischen den Kopplungen aufgrund von Potentialkorrekturen zu H_i, H_f und H_T führt dazu, daß die obige Formel nur für kleine Spannungen korrekte Ergebnisse liefert. Ansonsten stimmt die Formel im Gültigkeitsbereich der Schwachen-Streustärkennäherung (wenig Streuung im Topf) mit Gleichung (2.103) überein, die eine Einteilchengleichung ist. Der physikalische Inhalt ist offensichtlich nicht viel mehr als die obige Boltzmann-Gleichung. Da der Ein- und der Herausstreuprozess aus dem Topf als unabhängige Prozesse eingehen, ist die Phasenkohärenz im Gesamttransport offenbar verloren gegangen.

Eine Verallgemeinerung der Bilanzgleichung auf zwei oder noch mehr gekoppelte resonante Zustände ist möglich (dies können z.B. erster und zweiter Zustand im Γ -Band oder der erste Zustand im Γ -Band und Zustände im X-Band in den Barrieren einer RTD aus GaAs/AlAs sein, die letzere Kombination ist besonders wichtig für den Valleystrom) und macht somit den Quantentransport allgemein innerhalb der obigen Näherungen einer Monte Carlo Simulation zugänglich, wodurch man auch zeitabhängige Vorgänge simulieren kann (Einschalt- und Aufladevorgänge, Schwingungen, nach einer kleineren Modifikation Emission von Photonen, zeitabhängige Laserprozesse etc.).

2.6 Doppeltopfstrukturen

Im folgenden Abschnitt beschäftigen wir uns mit Doppeltöpfen, mit deren Hilfe wir in Abschnitt (3.3) Magnetotransportmessungen an Doppeltöpfen interpretieren können. In Doppeltopfstrukturen gehen wir aus von der folgenden Gleichung (Gleichung 2.36)



λ sind Eigenzustände des 1.-Topf-Hamiltonoperators, während die μ zum zweiten Topf gehören. Der Beitrag erster Ordnung ist wieder verschwindend klein, wenn die Struktur dick genug ist. Das Skalarprodukt von uns interessierenden Zuständen aus verschiedenen Töpfen können wir in guter Näherung zu Null annehmen, wenn die Barrieren nicht zu dünn sind: $|\langle \lambda | \mu \rangle|^2 \approx 0$. Handelt es sich bei dem zweiten Topf um einen solchen im X-Band (bei einer RTD), so ist diese Beziehung exakt. Wir verwenden die folgende

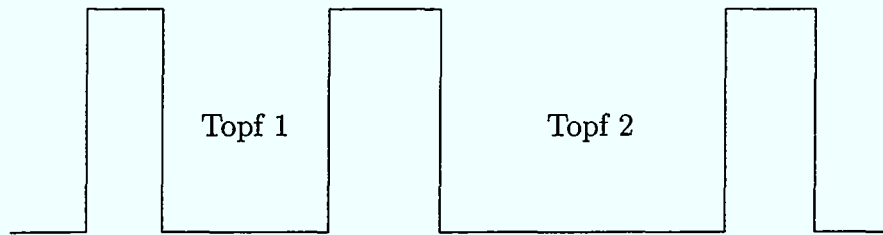


Abbildung 2.10: Doppeltopfstruktur

Näherung

$$\langle \lambda | \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} | \mu \rangle \approx \langle \lambda | \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} | \lambda \rangle \langle \lambda | V | \mu \rangle \langle \mu | \frac{1}{E_i - H + i\epsilon} | \mu \rangle \quad (2.132)$$

mit

$$\begin{aligned} H_0 &= P_\mu H P_\mu + Q_\mu H Q_\mu \\ &= \tilde{E}_\mu + Q_\mu H Q_\mu \end{aligned} \quad (2.133)$$

$$V = P_\mu H Q_\mu + Q_\mu H P_\mu \quad (2.134)$$

($\tilde{E}_\mu = \langle \mu | H | \mu \rangle$). Mit dieser Wahl ist

$$\langle \lambda | \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} | \mu \rangle \approx 0 \quad (2.135)$$

Diese Näherung ist völlig analog zu der Näherung, die für Resonante Tunneldioden durchgeführt wurde, nur daß hier zwei Töpfe beteiligt sind. Hat man es mit noch mehr

Töpfen zu tun, so muß man die Resolvente entsprechend weit entwickeln mithilfe der 2.Resolventenidentität (2.31), bis man über die nötige Zahl von Hoppingmatrixelemente eine endliche Übergangsrate erzeugt hat. Für n Barrieren hat man dann einen endlichen Strom, wenn $(n-1)$ Resolventen von den aufeinanderfolgenden Töpfen in der Entwicklung der Übergangsrate stehen.

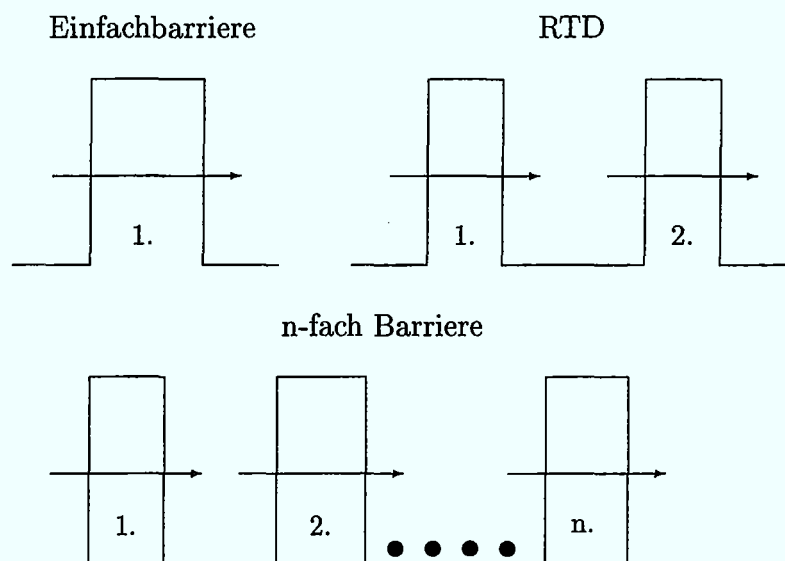
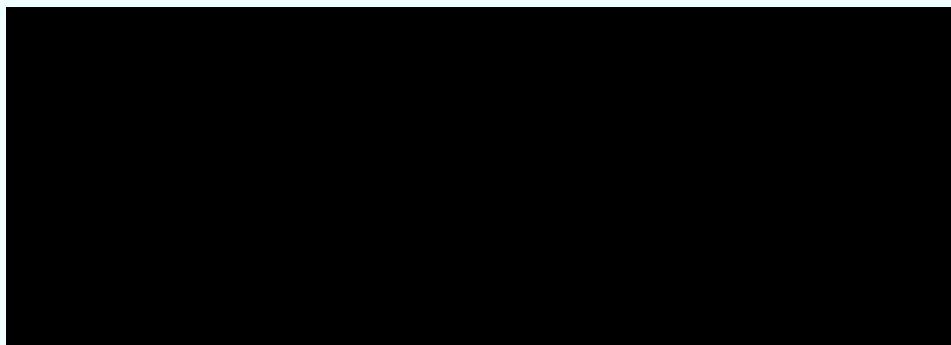


Abbildung 2.11: Hauptbeiträge zur Leitfähigkeit

$w_{i \rightarrow f}$



Man erhält also einen Peak im Strom, wenn $\tilde{E}_\mu$ ($\approx E_\mu$) mit $\tilde{E}_\lambda$ ($\approx E_\lambda$) und mit E_i übereinstimmt (und der Zustand E_i besetzt ist), das heißt immer dann, wenn zwei Niveaus in den benachbarten Töpfen sich bei einer Spannung überkreuzen, wo beide dann energetisch in der Höhe von besetzten Emitterzuständen liegen, gibt es einen Peak im Strom. Mit diesem theoretischen Rüstzeug kann man nun Magnetospektroskopie an Doppeltöpfen, oder in einfacher Verallgemeinerung, an Mehrfachtöpfen interpretieren. Doppeltöpfe treten zum Beispiel auch im X-Band einer resonanten Tunnel diode aus AlAs/GaAs auf (man hat hier je einen Topf im X-Band der ersten und der zweiten AlAs

Barriere). Stimmen die Resonanzenergien nicht exakt überein, so werden die Resonanzen im Transmissionskoeffizienten um einen Faktor $\Gamma^2/(E_\lambda - E_\mu)^2$ ($1/\Gamma = 1/\Gamma_\lambda + 1/\Gamma_\mu$) unterdrückt.

2.7 Die Kuboformel im Einteilchenbild

In diesem Abschnitt werden wir die Kuboformel ins Einteilchenbild übersetzen. Diese werden wir dann in späteren Abschnitten benutzen, um den Shubnikov-de Haas Effekt und den Quanten-Hall Effekt zu berechnen. Nachdem wir sie dann auch auf den Spezialfall zweidimensionaler und eindimensionaler Zustände übertragen haben, gehen wir kurz auf den Zusammenhang mit der in Abschnitt (2.2) dargestellten Theorie ein.

Wir nehmen an, daß der relevante Anteil des Vielteilchen-Hamiltonoperator H sich im interessierenden Temperaturbereich darstellen läßt als

$$H = \sum_{n,m} a_n^+ a_m < \psi_n | h | \psi_m > \quad (2.137)$$

(h ist der Einteilchen-Hamiltonoperator, $\psi_{n,m}$ sind beliebige orthonormierte Einteilchenzustände; die obige Gestalt des Hamiltonoperators bedeutet, daß nur elastische Potentialstreuungen (Legierungs-, Grenzflächenrauhigkeits-, Versetzungs- und Störstellenstreuung) wichtig sind). Startpunkt der Analyse ist eine bestimmte Form der Kuboformel für den Gleichstrom (siehe z.B. [43, 44])

$$\sigma_{\alpha,\gamma} = \frac{e}{V} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \int_0^\beta d\beta' TR[\rho_0 j_\gamma(-t - i\hbar\beta') j_\alpha] \quad (2.138)$$

$\rho_0 = e^{\beta\Omega - \beta H + \mu N}$ ist die Gleichgewichts-Vielteilchendichtematrix, $\mathcal{E}_\gamma$ das E-Feld, V das Volumen, $\beta = 1/kT$, TR steht für die Spur im Fockraum und

$$j_\gamma(-t - i\hbar\beta') = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t + i\hbar\beta')} j_\gamma e^{\frac{i}{\hbar} H(t + i\hbar\beta')} \quad (2.139)$$

mit dem $\vec{q} = 0$ Vielteilchen-Stromdichteoperator

$$j_\gamma = \frac{e}{V} \sum_{n,m} a_n^+ a_m < \psi_n | v_\gamma | \psi_m > \quad (2.140)$$

$$= \frac{e}{V} \sum_{n,m} a_n^+ a_m < \psi_n | v_\gamma | \psi_m > \quad (2.141)$$

$$(2.142)$$

Die ψ_n sind hier beliebige orthonormierte Einteilchenzustände. Im folgenden wollen wir die Kuboformel in eine für unsere Zwecke günstige Gestalt bringen, die uns eine Beschreibung von Magnetotransportprozessen mit Streuung im Einteilchenbild erlaubt. Man erhält mit dieser Formel für die Stromdichte die Leitfähigkeit

$$\sigma_{\alpha,\gamma} = V \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dt e^{-\epsilon t} \int_0^\beta d\beta' TR[\rho_0 j_\gamma(-t - i\hbar\beta') j_\alpha] \quad (2.143)$$

Wir benutzen die Basis, in der der Einteilchen-Hamiltonoperator diagonal ist, nummerieren die Vielteilchenzustände in geeigneter Weise durch und erhalten (vgl. [43])

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha,\gamma} &= e^2 V e^{\beta\Omega} \sum_{N,M} e^{-\beta E_N} \langle N | j_\gamma | M \rangle \langle M | j_\alpha | N \rangle \\ &\quad \frac{e^{\beta(E_N - E_M)} - 1}{E_N - E_M} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-i\hbar}{E_N - E_M - i\epsilon\hbar} \end{aligned} \quad (2.144)$$

Das thermodynamische Potential Ω ist dann gegeben durch

$$e^{\beta\Omega} = \prod_n \frac{1}{1 + e^{\beta\mu - \beta E_n}} \quad (2.145)$$

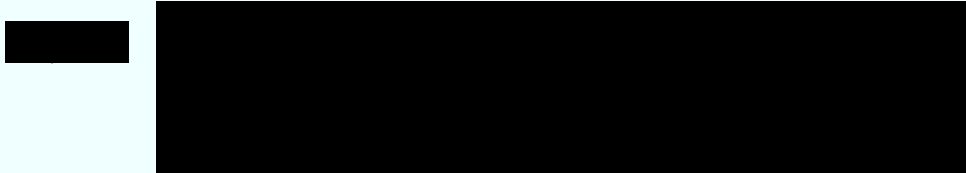
(kleine Buchstaben nummerieren Einteilchen- und große Vielteilchenzustände). Wir greifen uns zwei Vielteilchenzustände N und M heraus. Offenbar dürfen sich beide allerhöchstens in der Besetzung zweier Einteilchenzustände, die wir mit n und m bezeichnen wollen, unterscheiden (bei gleicher Gesamtteilchenzahl), ansonsten verschwindet das Strommatrixelement $\langle N | j_\gamma | M \rangle$. Die Beiträge der anderen Einteilchenzustände (besetzt oder unbesetzt) in der Summe über N und M kürzen sich gerade gegen die entsprechenden Terme in $e^{\beta\Omega}$ und man erhält für $n \neq m$ (in diesem Fall muß der Zustand n mit einem Elektron besetzt sein, wohingegen m leer sein muß, ansonsten verschwindet wieder das Strommatrixelement)

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha,\gamma}^{n \neq m} &= \frac{e^2}{V} \sum_{n \neq m} \frac{e^{\beta\mu - \beta E_n}}{1 + e^{\beta\mu - \beta E_n}} \frac{1}{1 + e^{\beta\mu - \beta E_m}} \langle \psi_n | v_\gamma | \psi_m \rangle \\ &\quad \langle \psi_m | v_\alpha | \psi_n \rangle \frac{e^{\beta(E_n - E_m)} - 1}{E_n - E_m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-i\hbar}{E_n - E_m - i\epsilon\hbar} \\ &= \sum_\gamma \frac{e^2 \mathcal{E}_\gamma}{V} \sum_{n \neq m} (f(E_m) - f(E_n)) \langle \psi_n | v_\gamma | \psi_m \rangle \langle \psi_m | v_\alpha | \psi_n \rangle \\ &\quad \frac{1}{E_n - E_m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-i\hbar}{E_n - E_m - i\epsilon\hbar} \end{aligned}$$

mit der Fermiverteilung $f(E) = 1/(1 + e^{\beta(E - \mu)})$. Wir verwenden

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E_n - E_m} \frac{1}{E_n - E_m - i\epsilon\hbar} &= - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d}{dE} \frac{1}{E - E_n + i\epsilon\hbar} \right)_{E=E_m} \\ &= - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{d}{dE} \frac{1}{E - E_m - i\epsilon\hbar} \right)_{E=E_n} \end{aligned}$$

und erhalten, nach Einführung der Resolventen $G^\pm(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} 1/(E - h \pm i\epsilon\hbar)$



Der Term ($N = M$) ergibt

$$\sigma_{\alpha,\gamma}^{n=m} = \frac{e^2}{V} \sum_n f(E_n) \langle \psi_n | v_\gamma | \psi_n \rangle \langle \psi_n | v_\alpha | \psi_n \rangle \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\beta}{\epsilon}$$

Ist nur ein diagonales Matrixelement eines Geschwindigkeitsoperators mit den Wellenfunktionen, die das Problem exakt quantenmechanisch lösen (inklusive Streuprozesse) von Null verschieden, so führt dies automatisch in der Kubo-Formel zu unendlichen Leitfähigkeiten/Strömen (Widerstand Null). Die Kubo-Formel ist in einem solchen Fall (ballistischer Transport) nicht anwendbar, da sie keine Kontaktwiderstände enthält (siehe die Diskussion der Kubo-Formel für eine Dimension, Abschnitt (2.7.2)). Ist die Probe hinreichend groß, so ergibt sich über die stochastischen Streuprozesse automatisch eine Mittelung über verschiedene Ausbreitungsrichtungen, so daß

$$\langle \psi_n | v_\alpha | \psi_n \rangle = 0 \quad (2.146)$$

gilt. Dies kann man als die quantenmechanische Definition von diffusivem Transport auffassen, auch wenn man aus diesem Kriterium praktisch keinen Nutzen ziehen kann, da die exakten Lösungen nie bekannt sind. Man kann unter diesen Voraussetzungen zu dem Term $N \neq M$ ($n \neq m$) den folgenden Term addieren

$$0 = \frac{i\hbar e^2}{V} \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} dE f(E) \left(\langle \psi_n | \frac{dG^+(E)}{dE} v_\gamma \delta(E - \hbar) | \psi_n \rangle \right. \\ \left. \langle \psi_n | v_\alpha | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | \delta(E - \hbar) v_\gamma \frac{dG^-(E)}{dE} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | v_\alpha | \psi_n \rangle \right)$$

und erhält

$$\sigma_{\alpha,\gamma} = \frac{i\hbar e^2}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f(E) \text{TR} \left(\frac{dG^+(E)}{dE} v_\gamma \delta(E - \hbar) v_\alpha - \delta(E - \hbar) v_\gamma \frac{dG^-(E)}{dE} v_\alpha \right) \quad (2.147)$$

Die obige Form ist wieder unabhängig von der verwendeten Einteilchenbasis und daher ein geeigneter Ausgangspunkt für eine störungstheoretische Behandlung von Streuprozessen. Die Spur geht diesmal nur über Einteilchenzustände. Für die longitudinale Leitfähigkeit bedeutet dies

$$\sigma_{xx} = \frac{i\hbar e^2}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f(E) \text{TR} \left(\frac{dG^+(E)}{dE} v_x \delta(E - \hbar) v_x - \delta(E - \hbar) v_x \frac{dG^-(E)}{dE} v_x \right) \\ = \frac{\hbar e^2}{2V} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{df(E)}{dE} \right) \text{TR} (\delta(E - \hbar) v_x \delta(E - \hbar) v_x) \quad (2.148)$$

Die letzte Umformung folgt mittels partieller Integration (der Faktor 1/2 hat ebenfalls hier seinen Ursprung) und Verwendung von

$$\delta(E - \hbar) = \frac{i}{2\pi} (G^+(E) - G^-(E)) \quad (2.149)$$

Für σ_{xy} erhält man einen komplizierteren Ausdruck:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xy} &= \sigma_{xy}^1 + \sigma_{xy}^2 \\
 \sigma_{xy}^1 &= \frac{i\hbar e^2}{2V} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{df(E)}{dE} \right) \text{TR} (G^+(E) v_y \delta(E - \hbar) v_x - \delta(E - \hbar) v_y G^-(E) v_x) \\
 \sigma_{xy}^2 &= \frac{\hbar e^2}{4\pi V} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f(E) \text{TR} \left(G^+(E) v_y \frac{dG^+(E)}{dE} v_x - \frac{dG^+(E)}{dE} v_y G^+(E) v_x \right. \\
 &\quad \left. - G^-(E) v_y \frac{dG^-(E)}{dE} v_x + \frac{dG^-(E)}{dE} v_y G^-(E) v_x \right)
 \end{aligned} \tag{2.150}$$

Die hier durchgeführte Umformung von σ_{xy} wird sich als zweckmäßig erweisen. Der Zusatzterm ist von Smrcka und Streda [45] übersehen worden. Er ist, wie sich zeigen wird, für den Quanten-Hall-Effekt verantwortlich (zur Berechnung des Quanten-Hall-Effektes werden wir aber die im nächsten Abschnitt hergeleitete Kuboformel für zweidimensionale Systeme benutzen). Die Formeln (2.148, 2.150) sind unter den genannten Voraussetzungen äquivalent zur Vielteilchen-Kuboformel für die Leitfähigkeit.

2.7.1 Die Kuboformel für zwei Dimensionen

Für die Behandlung des SdH- und Quanten-Hall-Effektes leiten wir nun die Kuboformel für ein zweidimensionales System her. Beim zweidimensionalen Transport darf man nicht die $\vec{q} = 0$ Kuboformel für die Stromdichte verwenden, da die z-Richtung quantisiert ist und die Wellenfunktion entsprechend lokalisiert. Eine korrekte Berechnung des Gleichstromes in x- und y-Richtung mit der $\vec{q} = 0$ Kuboformel ergäbe deshalb für $L_z \rightarrow \infty$ (Ausdehnung der Probe in z-Richtung) den Strom Null, da das Produkt von in z-Richtung lokalisierten Wellenfunktionen keinen $q_z = 0$ -Anteil enthält. Da man sich hier für den kompletten Strom in x- bzw. y-Richtung interessiert, der nicht als eine Dichte in z-Richtung beschrieben werden soll, muß man den lediglich in zwei Dimensionen auf $\vec{q}_{\parallel} = 0$ projizierten Vielteilchenstromdichteoperator zur Herleitung der korrekten Kuboformel für den Gleichstrom in zwei Dimensionen verwenden. Die Integration über z führt auf den Erwartungswert des Stromes (in Abhängigkeit von dieser Dimension). Als Ausgangspunkt für die Stromberechnung innerhalb der Schicht dient uns deshalb

$$J_{\alpha} = A \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{\gamma} \mathcal{E}_{\gamma} \int_0^{\infty} dt e^{-\epsilon t} \int_0^{\beta} d\beta' \text{TR} [\rho_0 j_{\gamma}(-t - i\hbar\beta') j_{\alpha}] \tag{2.151}$$

Hier sind die zweidimensionalen Stromdichteoperatoren gegeben durch (wir wählen wieder eine spezielle Einteilchenbasis, die wir der Einfachheit halber durchnummerieren)

$$\begin{aligned}
 j_{\gamma} &= \frac{e}{A} \int d^3r \Psi^+(\vec{r}) v_{\gamma} \Psi(\vec{r}) \\
 &= -\frac{ie}{\hbar A} \sum_{n,m} a_n^{\dagger} a_m \langle \psi_{\parallel n} | [r_{\gamma}, \hbar] | \psi_{\parallel m} \rangle
 \end{aligned} \tag{2.152}$$

$$\text{[Redacted Equation]}$$
(2.153)

$$= \frac{e}{A} \sum_{i, n_i, m_i} a_{n_i}^+ a_{m_i} \langle \psi_{||n_i} | v_\gamma | \psi_{||m_i} \rangle_{\vec{r}_{||}} \quad (2.154)$$

(i und j nummerieren Subbänder aus der z-Quantisierung, der Index $\vec{r}_{||}$ deutet an, daß die verbleibende Integration sich nur über $\vec{r}_{||}$ erstreckt, n_i und m_i nummerieren parallele Freiheitsgrade eines Subbandes). Die letzte Form ist korrekt, wenn ein eventuell vorhandenes Magnetfeld in z-Richtung orientiert ist ($\Rightarrow$ keine Subbandübergänge durch v) und Intersubbandstreuung nur eine untergeordnete Rolle spielt ($\Rightarrow \psi \rightarrow \psi_z \cdot \psi_{||}$). Letzteres ist in der Regel korrekt, wenn keine Streuprozesse mit extrem großen Impulsüberträgen vorhanden sind. Die Stromdichten einzelner Subbänder addieren sich in diesem Fall einfach. Hiermit ergeben sich (in völliger Analogie zu drei Dimensionen) die folgenden Kuboformeln in zwei Dimensionen, wenn Intersubbandstreuung zu vernachlässigen ist und ein eventuell vorhandenes Magnetfeld parallel zur Wachstumsrichtung orientiert ist (bzw. wenn die Feldkomponente parallel zur Schicht nicht zu groß ist):

$$\sigma_{xx} = \sum_i \sigma_{xx}^i \quad (2.155)$$

$$\sigma_{xx}^i = \frac{he^2}{2A} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{df(E)}{dE} \right) TR^i (\delta(E - h_i) v_x \delta(E - h_i) v_x) \quad (2.156)$$

$$\sigma_{xy} = \sum_i \sigma_{xy}^i \quad (2.157)$$

$$\sigma_{xy}^i$$

$$\text{[Redacted Equation]}$$

Die Spur geht jeweils nur über zweidimensionale Zustände des Subbandes i. $h_i = \langle i | h | i \rangle = E_i + h_{i\text{eff}}$. h_i ist der auf zwei Dimensionen herunterprojizierte Hamiltonoperator. $h_{i\text{eff}}$ ist der effektiv in zwei Dimension wirkende Hamiltonoperator. h_i ist auch der in den Resolventen zu verwendende Hamiltonoperator. E_i ist die Kantenenergie vom i-ten Subband ($|i\rangle \langle i|$ beschreibt den Projektor auf dieses Subband). Innerhalb dieser Näherung addieren sich also die Leitfähigkeiten verschiedener Subbänder. Genauso wenig wie in der Kubo-Formel für Volumenmaterial zweidimensionale Stromkanäle enthalten sind, sind in der Kubo-Formel für zwei Dimensionen (2.158) eindimensionale Stromkanäle enthalten (die Mittelung über die zusätzliche Dimension läßt die Beiträge dieser Kanäle zur *Stromdichte* der höheren Dimension verschwinden. Deshalb ist nur eine einfache Integration über die Richtung senkrecht zur Schicht zur Berechnung der Stromdichte in niedrigeren Dimensionen erlaubt. Der Gesamtstrom ergibt

sich aus der Summe der Strombeiträge aller Dimensionen). Man kann auch für die eindimensionalen Kanäle eine Kuboformel herleiten.

2.7.2 Die Kuboformel in einer Dimension

In völlig analoger Weise zur Vorgehensweise in zwei Dimensionen erhält man die folgende Kuboformel für eindimensionale Leitungskanäle ($\mathcal{E}$ ist die Feldkomponente in Transportrichtung)

$$\sigma = \frac{e^2}{L} \sum_{i,j} \frac{1}{E_{i,j} - E} \text{Im} \left[\langle i,j | h | i,j \rangle \right] \quad (2.159)$$

$$\sigma = \frac{e^2}{L} \sum_{i,j} \frac{1}{E_{i,j} - E} \text{Im} \left[\langle i,j | h | i,j \rangle \right] \quad (2.160)$$

i nummeriert die zweidimensionalen Subbänder, während j die zu jedem zweidimensionalen Subband gehörigen eindimensionalen Kanäle nummeriert. $h_{i,j}$ ist der auf eine Dimension herunterprojizierte Hamiltonoperator: $h_{i,j} = \langle i,j | h | i,j \rangle = E_{i,j} + h_{i,j}^{\text{eff}}$. $h_{i,j}^{\text{eff}}$ ist der effektiv in einer Dimension wirkende Hamiltonoperator, $E_{i,j}$ ist die Kantenenergie des j -ten Kanals vom i -ten Subband. Die Spur geht entsprechend nur über Zustände eines eindimensionalen Kanals (i,j). Intersubbandübergänge sind hier sowohl zwischen zweidimensionalen Subbändern als auch verschiedenen eindimensionalen Kanälen vernachlässigt (echte eindimensionale Leitung). Ist nur ein Subband besetzt, so folgt

$$\sigma = \frac{e^2}{L} \sum_{i,j} \frac{1}{E_{i,j} - E} \text{Im} \left[\langle i,j | h | i,j \rangle \right] \quad (2.161)$$

$$\sigma = \frac{e^2}{L} \sum_{i,j} \frac{1}{E_{i,j} - E} \text{Im} \left[\langle i,j | h | i,j \rangle \right] \quad (2.162)$$

Man erhält in einer Dimension natürlich direkt eine Formel für den Strom (keine Stromdichte). Die Kuboformel für eine Dimension ist allerdings ein pathologischer Fall, mit der man wirkliche Ströme nur für den hier (meistens) uninteressanten Spezialfall des diffusiven Transports berechnen kann. Während man in zwei und drei Dimensionen experimentell praktisch immer makroskopische „Volumen“-Materialien vorliegen hat, sind eindimensionale Proben (Punktkontakte, Drähte etc., im weiteren kurz Drähte genannt) oft so kurz, daß ballistischer oder quasiballistischer Transport zwischen Emitter und Kollektor stattfindet. In diesem Fall ist der Widerstand des eigentlichen Drahtes, den man mit der Kuboformel berechnen kann, verschwindend klein. Im Gegensatz hierzu wird eindimensionalen Leitfähigkeitskanälen üblicherweise ein endlicher, maximaler Leitwert von e^2/h zugesprochen. Wo liegt der Fehler? Die Kuboformel enthält keine (idealen) Kontaktwiderstände zu Emitter und Kollektor! Das es sich bei dem vorliegenden Widerstand um einen Kontaktwiderstand handelt, sieht man wie folgt ein: Ohne Streuung, d.h. auch ohne Energieverlust/Richtungsänderung des Elektrons in der eigentlichen Probe, gilt für einen Kanal in einer Dimension für kleine Spannungen:

$$I = \frac{e}{L} \sum_k v_k (f_E(E) - f_C(E))$$

$$= \frac{e}{h} \int dE (f_E(E) - f_C(E)) \quad (2.163)$$

d.h.

$$\frac{dI}{dV}_{V=0} = \frac{e^2}{h} \quad (2.164)$$

Der Kanal hat also einen endlichen Widerstand. Das Elektron hat aber in der ganzen eigentlichen Probe keine Streuung erlitten! Über welchen Weg kommt hier der Widerstand zustande? Antwort: Implizit über die Verteilungsfunktionen! Jedes Elektron, daß den Kollektor erreicht, muß dort mittels eines Streumechanismus gemäß der im Kollektor gültigen Fermiverteilung umgruppiert werden. Es ist diese Streuung im Kollektor, die zwangsweise zu dem angegebenen minimalen Gesamtwiderstand führt. Deshalb handelt es sich um einen (idealen) Kontaktwiderstand zu den angeschlossenen Elektronenbädern. Insbesondere die Energiedissipation findet in diesem Fall im Kollektor statt. Man darf die Kuboformel daher im Falle von ballistischem Transport nicht anwenden. Stattdessen sollte man die in Abschnitt (2.2) vorgestellte Theorie verwenden. Sind jedoch die Drähte hinreichend lang, so daß der Widerstand des Kanals aufgrund von Streuprozessen durch den Widerstand des Drahtes bestimmt ist (diffusiver Transport) und keine Energie mehr im Kollektor dissipiert werden muß, so liefert die eindimensionale Kuboformel sinnvolle Ergebnisse, weil man den (idealen) Kontaktwiderstand dann vernachlässigen kann. Um den Zusammenhang zwischen den beiden Formeln für den Strom klarzustellen, nehmen wir an, daß in langen eindimensionalen Drähten sich jeweils in einen Abstand λ (freie Weglänge) ein Emitter-/Kollektor-Elektronenbad befindet. Auf dieser Strecke fällt eine Spannung λ/L ab, wenn L die gesamte Länge des Drahtes ist. Hiermit gilt dann näherungsweise

$$\frac{dI}{dV}_{V=0} = \frac{e^2 \lambda}{hL} \quad (2.165)$$

mit $\lambda = \sqrt{\frac{2E_f}{m^*}} \tau$

$$\begin{aligned} \frac{dI}{d\mathcal{E}}_{\mathcal{E}=0} &= \frac{e^2 \sqrt{2E_f} \tau}{h \sqrt{m^*}} \\ &= \frac{e^2 n(E_f) \tau}{m^*} \end{aligned} \quad (2.166)$$

Dies entspricht gerade dem Ergebnis, daß man mit der Kuboformel erhalten hätte! Das entscheidende ist hier die variable Distanz der Elektronenbäder. Ist die Probe kürzer als λ , darf die Kubo-Formel nicht angewendet werden. Umgekehrt sollte man für diffusiven Volumentransport entsprechend die Kuboformel verwenden.

2.8 Leitfähigkeit in zweidimensionalen Elektronengasen

Im folgenden wird die allgemeine Theorie auf den Shubnikov-de Haas und den Quanten-Hall-Effekt angewendet. Der Shubnikov-de Haas Effekt (SdH-Effekt) bezeichnet eine magnetfeldabhängige periodische Modulation der longitudinalen Leitfähigkeit in zweidimensionalen Elektronengasen. Er hat seine Ursache in dem periodischen Schwanken der Zustandsdichte am Ferminiveau, welches durch das Durchschieben von Landauniveaus mit steigendem Magnetfeld verursacht wird (in einigen Lehrbüchern [31] wird behauptet, auch daß Ferminiveau würde oszillieren. Dies stimmt nur für Proben ohne ohmsche Kontakte, da dann die Elektronenzahl erhalten bleibt. Mit ohmschen Kontakten, wie sie zwingend notwendig sind zum Messen des SdH- und Quanten-Hall-Effektes, ist das Ferminiveau fixiert durch die Lage des Ferminiveaus in den Zuleitungen, dafür ist die Elektronenzahl variabel. Durch ein hinreichend großes magnetisches Feld kann man alle freien Elektronen aus der Probe entfernen. Dies passiert beim Durchschieben des letzten Landauniveaus). Aus dem Schwanken der Zustandsdichte ergibt sich auch eine Modulation der Leitfähigkeit. Beim Hall-Effekt ergeben sich für größere Magnetfelder Plateaus im Verhältnis von Hallspannung (Spannung senkrecht zum Strom) zu fließendem Strom, dem sogenannten Hall-Widerstand. Die Höhe der Stufen im Leitwert beträgt hierbei e^2/h , falls Spinentartung vorliegt $2e^2/h$. Dieser Effekt wird Quanten-Hall-Effekt genannt. Die Stufen in der Hall-Spannung liegen hierbei genau bei den Magnetfeldern, bei denen im longitudinalen Widerstand (SdH-Effekt) Peaks auftreten. Zwischen den Peaks fällt der longitudinale Widerstand bei größeren Magnetfeldern bis auf Null ab [46].

Im folgenden werden wir eine Theorie der Leitfähigkeit von zweidimensionalen Elektronengasen mit Spin Split darstellen. Wir verwenden zur Berechnung des Stromes die Kuboformel für zwei Dimensionen, Gleichung (2.158). Wir nehmen an, daß nur ein Subband besetzt ist (ansonsten muß man über verschiedene Subbänder summieren). Streuprozesse werden wir störungstheoretisch im Geiste der Coherent Potential Approximation (CPA) [36] für die *einzelnen* Resolventen einschließen ($\sum_m <n|G^+(E)|m><m| \approx <n|G^+(E)|n><n|$ etc., mit selbstkonsistent bestimmter Selbstenergie). Dies ist nur zu rechtfertigen, wenn schwache Streuung vorliegt, also die Matrixelemente des Streupotentials selbst klein gegen die Energien des ungestörten Problems sind. In der Berechnung verwenden wir die sich aus dem in Abschnitt (2.1.4) hergeleiteten effektiven Hamiltonoperator

$$H = \frac{\vec{D}^2}{2m^*} \cdot \mathbf{1} + \frac{1}{2}g^*\mu_B\vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \frac{1}{\hbar}\vec{\alpha} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{D}) \quad (2.167)$$

ergebenden Eigenfunktionen (Rashbaniveaus) als Basis. Das Magnetfeld soll hierbei wie $\vec{\alpha}$ senkrecht zum zweidimensionalen Elektronengas orientiert sein. Es ergeben sich folgende Energieeigenwerte[20]

$$E_0 = \hbar\omega_c \delta \quad (2.168)$$

$$E_{j\pm} = \hbar\omega_c \left(j \pm \sqrt{\delta^2 + \gamma^2 j} \right) \quad (2.169)$$

$j \geq 1$ ist ein ganzzahliger Wert, der die Rashbaniveaus numeriert (wir führen diesen Begriff ein um unterscheiden zu können zwischen Zuständen, die g-Faktor-Term und Spin-Bahn-Wechselwirkung exakt einschließen und solchen, die dies nicht tun (=Landauniveaus)),

$$\delta = \frac{m_0 - g^* m^*}{2m_0} \quad (2.170)$$

(μ_B ist ersetzt durch $e\hbar/(2m_0)$) und

$$\gamma = |\vec{\alpha}| \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^3 \omega_c}} \quad (2.171)$$

sind beides dimensionslose Größen und ω_c ist die Zyklotronfrequenz

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*} \quad (2.172)$$

Es sei hier angemerkt, daß der zu E_0 gehörige Zustand, der für $|\vec{\alpha}| = g^* = 0$ zur doppelten Entartung des Grundzustandes führt (Spin), gerade dem Zustand $j = 1$ mit negativem Vorzeichen entspricht. Entwickelt man die Eigenfunktionen nach Landauniveaus mit Spin up/down [20], so gilt

$$R_0(\vec{r}_{||}) = L_0(\vec{r}_{||}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.173)$$

$$R_{j\pm}(\vec{r}_{||}) = u_j^\pm L_{j-1}(\vec{r}_{||}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + d_j^\pm L_j(\vec{r}_{||}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.174)$$

(R steht für Rashbaniveau, L für Landauniveau) mit ($j \geq 1$)

$$u_j^\pm = \pm i \sqrt{\frac{\sqrt{(1/2 - \delta)^2 + \gamma^2 j} \mp (1/2 - \delta)}{2\sqrt{(1/2 - \delta)^2 + \gamma^2 j}}} \quad (2.175)$$

$$d_j^\pm = \sqrt{\frac{\sqrt{(1/2 - \delta)^2 + \gamma^2 j} \pm (1/2 - \delta)}{2\sqrt{(1/2 - \delta)^2 + \gamma^2 j}}} \quad (2.176)$$

(Für $j = 0$ ist $d_0 = 1$). Pro Rashbaniveau sind nur (maximal) zwei Koeffizienten von Null verschieden, d.h. der g-Faktorterm und die Spin-Bahn-Wechselwirkung mischen nur zwei Landauniveaus, die sich ohne die entsprechenden Wechselwirkungsterme ergeben würden. Die Geschwindigkeitsoperatoren lassen sich darstellen als

$$v_x = \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2m^*}} \begin{pmatrix} a^+ + a & i\gamma \\ -i\gamma & a^+ + a \end{pmatrix} \quad (2.177)$$

$$v_y = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2m^*}} \begin{pmatrix} a^+ - a & i\gamma \\ i\gamma & a^+ - a \end{pmatrix} \quad (2.178)$$

a^+ und a sind hier die üblichen Leiteroperatoren der Landauniveaus. Die Matrixelemente der Geschwindigkeitsoperatoren sind dann gegeben durch

$$\begin{aligned}
 \langle R_{j+1 s_{j+1}} | v_x | R_{j s_j} \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{2m^*}} \cdot (\sqrt{j} u_{j+1}^{s_{j+1}*} u_j^{s_j} + i \gamma u_{j+1}^{s_{j+1}*} d_j^{s_j} + \sqrt{j+1} d_{j+1}^{s_{j+1}*} d_j^{s_j}) \\
 \langle R_{j-1 s_{j-1}} | v_x | R_{j s_j} \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar \omega_c}{2m^*}} \cdot (\sqrt{j-1} u_{j-1}^{s_{j-1}*} u_j^{s_j} - i \gamma d_{j-1}^{s_{j-1}*} u_j^{s_j} + \sqrt{j} d_{j-1}^{s_{j-1}*} d_j^{s_j}) \\
 \langle R_{j+1 s_{j+1}} | v_y | R_{j s_j} \rangle &= -i \langle R_{j+1 s_{j+1}} | v_x | R_{j s_j} \rangle \\
 \langle R_{j-1 s_{j-1}} | v_y | R_{j s_j} \rangle &= i \langle R_{j-1 s_{j-1}} | v_x | R_{j s_j} \rangle
 \end{aligned} \tag{2.179}$$

(s_j bezeichnet das Vorzeichen der Energie des entsprechenden Zustandes). Alle anderen Matrixelemente verschwinden. In expliziter Form werden wir die Matrixelemente jedoch nicht benötigen. Es sei angemerkt, daß die Rashbaniveaus, genau wie die Landauniveaus, entartet sind. Der Entartungsfaktor beträgt eBA/h (A ist die Fläche). Der Geschwindigkeitsoperator ist diagonal in den Quantenzahlen, die die Entartung beschreiben (anschaulich den „Ort“ des Rashbaniveaus). Damit folgt,

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx} &\approx \frac{\hbar e^2}{2A} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{df(E)}{dE} \right) \sum_{n,m} \delta_{nn}(E) \delta_{mm}(E) |v_{xnm}|^2 \\
 \sigma_{xy} &= \sigma_{xy}^1 + \sigma_{xy}^2 \\
 \sigma_{xy}^1 &\approx \frac{i \hbar e^2}{2A} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{df(E)}{dE} \right) \sum_{n,m} (G_{nn}^+(E) \delta_{mm}(E) - \delta_{nn}(E) G_{mm}^-(E)) v_{ynm} v_{xmn} \\
 \sigma_{xy}^2 &\approx \frac{\hbar e^2}{4\pi A} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f(E) \sum_{n,m} \left(G_{nn}^+ + (E) \frac{dG_{mm}^+(E)}{dE} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{dG_{nn}^+(E)}{dE} G_{mm}^+(E) - G_{nn}^-(E) \frac{dG_{mm}^-(E)}{dE} + \frac{dG_{nn}^-(E)}{dE} G_{mm}^-(E) \right) v_{ynm} v_{xmn} \\
 &= \frac{\hbar e^2}{2\pi A} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f(E) \sum_{n,m} \left(G_{nn}^+ + (E) \frac{dG_{mm}^+(E)}{dE} - G_{nn}^-(E) \frac{dG_{mm}^-(E)}{dE} \right) v_{ynm} v_{xmn} \\
 &\quad - \frac{\hbar e^2}{4\pi A} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{df(E)}{dE} \right) \sum_{n,m} (G_{nn}^+ + (E) G_{mm}^+(E) - G_{nn}^- + (E) G_{mm}^-(E)) v_{xmn} v_{ynm}
 \end{aligned} \tag{2.180}$$

mit

$$G_{nn}^{\pm} = \langle n | G^{\pm}(E) | n \rangle = \frac{1}{E - E_n - \Delta_n(E) \mp i \Gamma_n(E) \pm i \epsilon} \tag{2.181}$$

$$\delta_{nn}(E) = \langle n | \delta(E - h) | n \rangle = \frac{\frac{\Gamma_n(E)}{\pi}}{(E - E_n - \Delta_n(E))^2 + \Gamma_n^2(E)} \tag{2.182}$$

etc. Die g -Faktoren in Heterostrukturen können absolute Werte von einer Größenordnung bis 20 annehmen, wohingegen α im Bereich $0 - 1 \cdot 10^{-11} \text{ eVm}$ liegt. Am Fermi-

niveau gilt $v_{xnm} \approx \sqrt{E_f/m^*} \approx 5 \cdot 10^5 m/s$ für die Größe der nichtverschwindenden Matrixelemente ohne Spin-Flip ($j \approx E_f/\hbar\omega_c$), wohingegen, wenn man die obere Grenze für α nimmt, sich ein maximaler Betrag eines Spin-Flip-Matrixelementes von v_x zu $v_{\text{flip}} \leq |\alpha|/\hbar \leq 10^4 m/s = 1/50 \cdot v_{\text{noflip}}$ ergibt. Da die entsprechenden Matrixelemente quadratisch eingehen, kann man Spin-Flip-Prozesse in v_x vernachlässigen. Für diesen Fall kann man $|E_n - E_m|$ ausgezeichnet nähern durch $\hbar\omega_c$. Es gilt (Es ist $v_x = \frac{D_x}{m^*} - \frac{\alpha}{\hbar}\sigma_y$ etc.).

$$\frac{1}{2}m^*v_x^2 + \frac{1}{2}m^*v_y^2 \quad (2.183)$$

d.h. (wegen $\langle n|v_x^2|n \rangle = \langle n|v_y^2|n \rangle$)

$$m^* \sum_m |v_{xnm}|^2 = E_n + \frac{\alpha^2 m^*}{\hbar^2} + \left(\delta - \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c \langle n|\sigma_z|n \rangle =: E_{vn} \quad (2.184)$$

Sei n ein Rashbaniveau ($j \pm$). Der letzte Term führt dann auf

$$\left(\delta - \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c (|u_j^\pm|^2 - |d_j^\pm|^2) = \pm \frac{(\delta - \frac{1}{2})^2}{(\delta - \frac{1}{2})^2 + \gamma^2 j} \hbar\omega_c \quad (2.185)$$

d.h.

$$E_{vj\pm} = E_{j\pm} + \frac{\alpha^2 m^*}{\hbar^2} \pm \frac{(\delta - \frac{1}{2})^2}{(\delta - \frac{1}{2})^2 + \gamma^2 j} \hbar\omega_c \quad (2.186)$$

Für Felder, für die $\hbar\omega_c < E_f$ gilt, kann man alle Korrekturterme im Vergleich zu $E_{j\pm}$ vernachlässigen (den Term mit α^2 können wir immer vernachlässigen). Eine Näherung von E_{vn} durch E_n ist daher sinnvoll für nicht zu große Magnetfelder ($\Gamma < \hbar\omega_c < E_f$), es sei denn, der g-Faktor verschwindet nahezu, wie z.B. in GaAs. Für extrem große Magnetfelder sollte man bei großen g-Faktoren mit dem exakten $E_{vj\pm}$ rechnen. Außerdem gilt

$$\sum_{m \neq n} \frac{|v_{xnm}|^2}{E_m - E_n} = \frac{1}{2m^*} \quad (2.187)$$

(diese Beziehung kann man herleiten mittels $i\hbar v_x = [x, H] = [x, H_0] \rightarrow i\hbar v_{xnm} = (E_m - E_n)x_{nm}$ und $[x, v_x] = i\hbar/m^* \rightarrow \sum_{m \neq n} x_{nm}v_{mn} - v_{nm}x_{mn} = i\hbar/m^*$; einsetzen von x_{nm} liefert die obige Beziehung) Denkt man an eine Auswertung der Integrale mittels des Residuensatzes, so kann man die Integranden umschreiben auf (Faktor mit einfachem Pol) $\times$ (Residuum) und die Summen so umnummerieren (n und m vertauschen), daß die Pole nur bei E_n liegen. Man erhält

$$\sigma_{xx} = \frac{\hbar e^2}{2\pi A} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{df(E)}{dE} \right) \sum_{n,m} |v_{xnm}|^2$$

mit $\tau_n = \hbar/2\Gamma_n$ und

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2}{4A} \sum_n \frac{\tau_n}{\Gamma_n} |v_{xn}|^2 \quad (2.189)$$

$\tau_{\pm}$ bezeichnet die Streuzeit der Rashbaniveaus mit positivem/negativem Vorzeichen. Für $\alpha = g^* = 0$ (Landauniveaus ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung und ohne Spinan-kopplung an das Magnetfeld $\rightarrow E_{vn} = E_n$) ist die Näherung exakt. Die letzte Summe zählt jedes Rashbaniveau nur noch einmal ohne Entartung. Für $B \rightarrow 0$ strebt n_{xx} gegen die Teilchendichte der Probe ohne Magnetfeld, da die Zustandsdichte dann konstant wird. Wir haben angenommen, daß die Selbstenergien für die relevanten (d.h. benachbarten, über die Matricelemente von v gekoppelte) Rashba-Niveaus sich kaum unterscheiden ($\Sigma_m \approx \Sigma_n$). Es ist dies die Selbstenergie der Niveaus, die am Ferminiveau liegen. Hierdurch erreicht man eine drastische Reduktion der Zahl der freien Parameter (man hätte sonst eine große Zahl freier Parameter, mit denen man jede Kurve anpassen könnte, die sich so auf 2 reduzieren lassen). Mit der obigen Teilsummation kann man σ_{xx} auch schreiben als

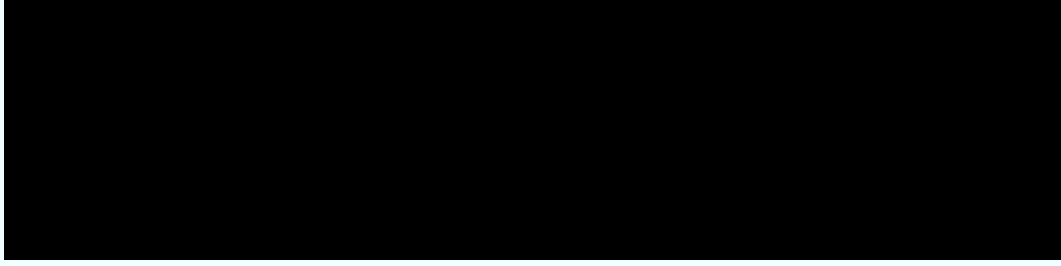
$$\sigma_{xx} =$$

Hier wird jedes Rashbaniveau nur noch einmal gezählt! Die natürliche Einheit der Leitfähigkeit von allen entarteten Rashbaniveaus zusammengefaßt ist e^2/h (In zwei Dimensionen stimmen die Einheit der Leitfähigkeit und des Leitwertes überein). An der obigen Formel erkennt man, daß es sich hier um einen rein diffusiven Transport handelt, da die longitudinale Leitfähigkeit für $\Gamma \rightarrow 0$ sogar verschwindet! Die Leitfähigkeit entsteht also erst durch Streuprozesse (dies ist auch anschaulich einleuchtend, da die Geschwindigkeitsoperatoren diagonal in den Quantenzahlen sind, die den räumlichen Ort des Niveaus festlegen). Gleichzeitig rechtfertigt dies die Verwendung der Kuboformel. Für σ_{xy} folgt

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^1 &= \frac{h e^2}{4A} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{df(E)}{dE} \right) \sum_{n,m} \frac{|E_n - E_m|}{\Gamma_n} |v_{xnm}|^2 \\ &\quad \frac{4\Gamma_n^2(E_n - E_m) - 8\Gamma_n^2(E - E_n - \Delta E_n)}{((E - E_n - \Delta E_n)^2 + \Gamma_n^2)((E_n - E_m)^2 + (2\Gamma_n)^2)(E_n - E_m)} \\ &\approx \frac{e^2}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \left(-\frac{df(E)}{dE} \right) \sum_{\pm} (E - \Delta E_{\pm}) \frac{(\omega_c \tau_{\pm})^2}{1 + (\omega_c \tau_{\pm})^2} \sum_j \delta_{j \pm j \pm}(E, B) \end{aligned} \quad (2.191)$$

und

$$\sigma_{xy}^2 =$$



mit

$$\sigma_{xy}^2 \approx e \frac{\partial n}{\partial B} \quad (2.193)$$

($j \pm$) läuft nur noch über je ein Rashbaniveaus, ohne Entartungsfaktor! Wir haben bereits über die entarteten Rashbaniveaus summiert. Dies hat einen Faktor $eBA/h = m^* \hbar \omega_c / \hbar^2 2\pi$ geliefert. Offensichtlich trägt jeweils die Gesamtheit aller entarteten Rashbaniveaus unterhalb der Fermienergie zusätzlich einen Beitrag e^2/h zur transversalen Leitfähigkeit bei. Dies wird zur Erklärung des Quanten-Hall-Effekts führen. Für $\alpha = g^* = 0$ kann man noch einen Faktor 2 aus den Summen für die dann vorliegende Spinentartung herausziehen.

σ_{xy}^2 kann man näherungsweise auch schreiben als

$$\sigma_{xy}^2 \approx e \frac{\partial n}{\partial B} \quad (2.194)$$

mit n als der gesamten Teilchendichte der Probe,

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E) \sum_m \delta_{mm}(E) \quad (2.195)$$

wenn man $E_{vn}/\hbar\omega_c \approx E_n/\hbar\omega_c \approx \frac{m^*}{\hbar e} \frac{\partial E_n}{\partial B}$ verwendet. Ohne Spin-Bahnwechselwirkung ist der letzte Schritt exakt, da die Energien dann linear von B abhängen, für $g^* = \alpha = 0$ ist die ganze Umformung exakt (in dieser Form ist der Zusatzterm σ_{xy}^2 von Isihara und Smrcka [47] für spinlose Elektronen angegeben worden). In der obigen Gestalt kann man für den Term eine klassische, heuristische Erklärung in dem Umstand finden, daß ein E -Feld in y -Richtung bei vorhandenem Magnetfeld in z -Richtung zu einem Zusammenhang zwischen E und B -Feld über die mittlere Geschwindigkeit in x -Richtung ($\langle v_x \rangle = E_y/B$) führt. (Es ist $m^* \vec{v} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$, d.h. nach Erwartungswertbildung im stationären Fall mit einem Magnetfeld in z -Richtung $0 = E_y - \langle v_x \rangle \cdot B$ oder $\langle v_x \rangle = E_y/B$, analog $\langle v_y \rangle = -E_y/B$, $\rightarrow \sigma_{xy}^2 = -\sigma_{yx}^2$). Schreibt man die Stromdichte als $j_x = en(B) \langle v_x \rangle (E_x, E_y)$, benutzt $\sigma_{xy} = \frac{\partial j_x}{\partial E_y} \big|_{\vec{E}=0}$ und den obigen Zusammenhang zwischen E_y und B , so folgt $\sigma_{xy} = e \frac{\partial n}{\partial B} + \sigma_{xy}^1$.

Abschließend müssen wir uns noch um die Bestimmung der Selbstenergie kümmern. Dies wollen wir hier näherungsweise für etwas größere Magnetfelder tun. Es gilt für

Energien nahe E_i

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\Gamma_0} \sqrt{1 - \left(\frac{E - E_i - V_{ii}}{2\Gamma_0} \right)^2} \right] \\ & \left[\frac{1}{\Gamma_0} \sqrt{1 - \left(\frac{E - E_i - V_{ii}}{2\Gamma_0} \right)^2} \right] \end{aligned} \quad (2.196)$$

Im letzten Schritt summieren wir nur noch über die mit dem Ausgangszustand entarteten Rashbaniveaus, da die anderen bei etwas größeren Magnetfeldern energetisch zu weit entfernt sind, um einen größeren Beitrag zur Selbstenergie zu leisten. Lösen wir diese quadratische Gleichung in Real- und Imaginärteil auf, so folgt (nach Wahl der korrekten Vorzeichen, mit $V_{if} = \langle i|V|f \rangle$) für $\Delta E = |E - E_i - V_{ii}| < 2\sqrt{\sum_f |V_{if}|^2}$

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\Gamma_0} \sqrt{1 - \left(\frac{E - E_i - V_{ii}}{2\Gamma_0} \right)^2} \right] \\ & \left[\frac{1}{\Gamma_0} \sqrt{1 - \left(\frac{E - E_i - V_{ii}}{2\Gamma_0} \right)^2} \right] \end{aligned} \quad (2.197)$$

und für $\Delta E = |E - E_i - V_{ii}| > 2\sqrt{\sum_f |V_{if}|^2}$

$$\text{Im} \Sigma_i(E, B) = 0 \quad (2.198)$$

d.h. für $\Delta E = |E - E_i - V_{ii}| > 2\sqrt{\sum_f |V_{if}|^2}$ besitzen die Zustände keine Dichte mehr. Innerhalb dieser Näherung sind die Zustände für größere Magnetfelder energetisch nicht lorentzförmig verteilt, sondern sind auf ein endliches Energieintervall der Länge $4\sqrt{\sum_f |V_{if}|^2}$ beschränkt. Setzen wir die obige Selbstenergie in die Formel für die spektrale Dichte ein, so ergibt sich für $|E - E_i - V_{ii}| < 2\sqrt{\sum_f |V_{if}|^2}$

$$\delta_i(E) = \frac{1}{\pi\Gamma_0} \sqrt{1 - \left(\frac{E - E_i - V_{ii}}{2\Gamma_0} \right)^2} \quad (2.199)$$

mit $\Gamma_0^2 = \sum_f |V_{if}|^2$. Dies entspricht gerade einer halben Ellipse mit normierter Fläche mit $E_i - V_{ii}$ als Ursprung. Außerhalb des Energiefensters verschwindet δ_i . Dies wird zur Erklärung des vollständigen Abfalls des longitudinalen Widerstandes auf Null bei höheren Magnetfeldern führen. Die obige Form der Selbstenergie enthält einen leichten Widerspruch zu unserer anfänglichen Annahme, daß die Selbstenergien gekoppelter Niveaus bei derselben Energie gleich sein sollen. Man erhält natürlich auch einen Beitrag zur Selbstenergie für E nahe einer Energie E_j von weiter entfernt liegenden Zuständen, nur ist die zugehörige spektrale Dichte klein (ein Faktor $\Gamma_0^2/(\Gamma_0^2 + (E_i - E_j)^2)$ kleiner als die Dichte des dort vorhandenen Zustands). Ein Übereinstimmen der Selbstenergien zweier Zustände i und j bedeutet hier, daß die Summe der Matrixelemente $\sum_f | <$

$i|V|f\rangle^2$ und $\sum_f | \langle j|V|f\rangle |^2$ (die Summe läuft über entartete Zustände des Niveaus, welches in Resonanz mit dem Fermi-niveau liegt) sich kaum unterscheidet.

Für kleinere Magnetfelder überlappen sich die Zustände stärker, so daß die Zustandsdichte nahezu konstant wird. Konsistenter Weise muß man deshalb auch annehmen, daß die Selbstenergie aller Zustände für kleine Magnetfelder fast konstant und für alle Zustände gleich wird $\Gamma_+ = \Gamma_- = \Gamma$. Dies bedeutet, daß die Zustände selber nahezu lorentzförmig verteilt sind. Die Unterscheidung von Γ_+ und Γ_- muß für größere Magnetfelder beibehalten werden (obwohl die Grundformeln, nach denen sie berechnet werden, übereinstimmen), da es zu Niveauüberschneidungen in der Nähe des Fermi-niveaus kommen kann, und, aufgrund der unterschiedlichen energetischen Distanz zum Fermi-niveau, unterschiedliche Selbstenergien für den Plus- und den Minus-zweig gelten. Setzen wir die Selbstenergie für größere Magnetfelder in die Formel für n_{xy} für $T=0K$ ein, so erhalten wir für alle Zustände, die mehr als $2\Gamma_0(B)$ unterhalb vom Fermi-niveau liegen, einen vollen Beitrag e^2/h zur transversalen Leitfähigkeit. Ein Niveau, in welches die Fermi-energie fällt, trägt in dieser Näherung einen Beitrag

$$\frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \quad (2.200)$$

bei festem Magnetfeld zur transversalen Leitfähigkeit bei (abgesehen von den anderen Beiträgen in σ_{xy}^1 und σ_{xy}^2). Den entsprechenden Beitrag für $T > 0$ erhält man durch Mitteln des obigen Ausdruckes mit $\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right)$. Ist $T \ll \Gamma_0$, so ändert sich der Wert nur für Magnetfelder, bei denen die Kante eines Niveaus in die Nähe des Fermi-niveaus kommt. Hierdurch wird σ_{xy}^2 an den Ecken etwas verrundet.

Die einzigen unbekannten Größen sind jetzt noch die Matrixelemente der Streupotentiale und insbesondere deren Abhängigkeit vom Magnetfeld. Die Abhängigkeiten vom Magnetfeld sind, wenn die Spin-Bahn-Wechselwirkung vernachlässigbar ist, da sich dann die Entwicklungskoeffizienten nach Landauniveaus nicht mehr verändern (dies ist richtig für größere Magnetfelder), über ein Skalenargument zu erhalten. Wir schreiben die Schrödingergleichung für Landauniveaus um auf dimensionslose Größen, d.h. Längen messen wir in $\sqrt{\hbar/eB}$, Energien in $\hbar\omega_c$. Die dimensionsbehafteten Wellenfunktionen sind dann aus den dimensionslosen Wellenfunktionen zu erhalten mittels (dimensionslose Größen sind mit einer Schlangenlinie gekennzeichnet)

$$\psi = \sum_n \tilde{\psi}_n \quad (2.201)$$

Die Matrixelemente von V ergeben sich hiermit zu

$$V_{nm} = \int \tilde{\psi}_n^* V \tilde{\psi}_m \quad (2.202)$$

Gehört V zu einem Streupotential, das auf der Skala der Größenausdehnung der Landauniveaus wie ein deltafunktionsartiges Streupotential wirkt (Störstellen, Versetzungen,

Defekte, etc.), so kann man aus der Deltafunktion des Streupotentials den Faktor eB/h herausziehen ($\delta(ax) \cdot \delta(ay) = 1/a^2 \delta(x) \cdot \delta(y)$) und erhält

$$\langle i|V_\delta|f \rangle (t \cdot B) = t \cdot \langle i|V_\delta|f \rangle (B) \quad (2.203)$$

Wird das Streupotential dagegen beschrieben durch eine charakteristische Länge λ (Korrelationslänge), so ist

$$\langle i|V_\delta|f \rangle (t \cdot B) = t \cdot \langle i|V_\delta|f \rangle (B) \quad (2.204)$$

Das heißt, die Matrixelemente bei größerem Magnetfeld verhalten sich wie die Matrixelemente bei vergrößerter Korrelationslänge. Dies führt, bis $\lambda \approx \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ erreicht (j ist der Index des Rashbaniveaus), in der Regel ebenfalls zu einer Vergrößerung des entsprechenden Matrixelementes, danach zu einem Abfallen. Ist der Streuprozess skaleninvariant, so erhält man konstante Matrixelemente. (z.B. Legierungsstreuung mit einer Korrelationslänge Null, es sei denn, man hat Cluster vorliegen). Im weiteren wollen wir alle Streuprozesse mittels zweier Parameter beschreiben. Wir setzen $\Gamma_0^2 = \sum_f |V_{if}|^2 (B)$ als charakteristische Größe für die Stärke der Streuung bei dem Magnetfeld B_0 . Der einfachste Ansatz ist

$$\langle i|V_\delta|f \rangle (t \cdot B) = t \cdot \langle i|V_\delta|f \rangle (B) \quad (2.205)$$

Für Legierungsstreuung verschwindet V_{ii} , für Störstellenstreuung werden wir es ebenfalls vernachlässigen, ansonsten hätte man noch einen weiteren Parameter, der mit einer sich mit wachsendem Magnetfeld vergrößernden Verschiebung der Niveaus zusammenhängt.

Hierdurch haben wir zwei freien Parameter erlangt, um Streuprozesse innerhalb aller Niveaus zu beschreiben. Diese werden wir als anpassbare Parameter behalten. Offenbar muß $2\Gamma_1(B_0) < \hbar e B_0 / m^*$ sein, damit überhaupt auflösbare Peak entstehen, da sonst die Breite der Niveaus schneller wächst als ihr Abstand. Erst wenn die für den Anstieg von Γ_1 verantwortlichen Streuzentren auf der Skala der Größenausdehnung der Rashbaniveaus nicht mehr als δ -förmig beschrieben werden können, können dann wieder Peaks entstehen. Den Übergangspunkt zwischen dem Fall für kleine Magnetfelder und dem für große Magnetfelder können wir festlegen über die Forderung, daß

$$2\Gamma_1(B_0) < \hbar e B_0 / m^* \quad (2.206)$$

gelten soll. Diese Bedingung legt gerade fest, bei welchem Magnetfeld sich die Niveaus eines Zweiges (für sich verkleinerndes Magnetfeld) zu überschneiden beginnen.

2.8.1 Der Shubnikov-de Haas-Effekt bei größeren Magnetfeldern

Der spezifische longitudinale Widerstand ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \rho_{xx} &= \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + (\sigma_{xy}^1)^2 + 2\sigma_{xy}^1 \sigma_{xy}^2 + (\sigma_{xy}^2)^2} \\ &= \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + (\sigma_{xy}^1)^2 + 2\sigma_{xy}^1 \sigma_{xy}^2 + (\sigma_{xy}^2)^2} \end{aligned} \quad (2.207)$$

Der Einfachheit halber führen wir die folgende Überlegungen für $T = 0K$ durch. Liegt das Fermi-niveau nicht innerhalb eines Bereichs, in dem die spektralen Dichte mindestens eines Niveaus nicht verschwindet, so ist $\rho_{xx} = 0$ ($\delta \rightarrow 0, \tau \rightarrow \infty$). Aufgrund der endlichen Breite der Niveaus bei größeren Magnetfeldern verschwindet daher der longitudinale Widerstand zwischen zwei Peaks.

Im Peak ist $\delta_i \propto 1/B$ und nahezu $n_{xy} \propto 1/B$. Unter den gemachten Voraussetzungen wächst die Höhe der Peaks in ρ_{xx} deshalb nahezu linear mit dem Magnetfeld, genau wie ihre Breite, die sich für nicht zu großes $\Gamma_0(0)$ ebenfalls linear verhält. Umgekehrt kann man aus dem experimentellen Befund einer linear mit dem Magnetfeld wachsenden Peakhöhe auf die Linearität der Streubreite im Peak mit dem Magnetfeld schließen, also auf die Anwesenheit von Streuprozessen, die zu diesem charakteristischen Verhalten führen.

$\Gamma_1(B_0)$ kann man festlegen über die abgeschätzte Breite der Niveaus bei einem genügend großen Magnetfeld, bei dem man unmittelbar die Breite des Peaks einer SdH-Messung (von $\rho_{xx} = 0$ bis $\rho_{xx} = 0$ abzüglich der Verschmierung durch die Temperatur) umrechnen kann in eine energetische Breite. Ist B_0 hinreichend groß (aber gleichzeitig $\Gamma_0(B_0)$ noch nicht zu groß), so gilt die Abschätzung an der Stelle des Peaks um B_0

$$\frac{4m^*}{4B_0} \quad (2.208)$$

(B_0 ist das Feld am Peak, ΔB die Breite des Peaks, j der Index des Rashbaniveaus und E_f die Fermienergie). Hieraus folgt auch, daß die Breite der Peaks in einer SdH-Messkurve für höhere Magnetfelder unter den gemachten Voraussetzungen (solange die Streuzentren als δ -Funktion beschreibbar sind und die Breite noch nicht zu groß ist und sich die Selbstenergie nicht zu stark von Zustand zu Zustand ändert) linear wachsen sollten, so wie dies Γ_0 tut.

2.8.2 Shubnikov-de Haas-Effekt bei kleinen Magnetfeldern

Für kleinere Magnetfelder führt die Beziehung zwischen den Matrixelementen der Streupotentiale ($\Gamma_0 = \Gamma_0 + \Gamma_0(0)/B_0 \cdot B$) näherungsweise zu der folgenden Formel für den Imaginärteil der Selbstenergie ($T=0K$)

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_0} = \frac{g}{g_0} \quad (2.209)$$

(g ist die Zustandsdichte am Fermi-niveau, Γ_0 der Imaginärteil der Selbstenergie bei $B=0$). Diese Beziehung ist für kleinere Felder für δ -artige Störstellenstreuung von Ishihara und Smrcka[47] innerhalb einer CPA gefunden worden. Entwickeln wir mit diesem Ansatz die Formel für ρ_{xx} bis zu linearen Gliedern in $\Delta g/g_0$ (σ_{xx} ist mit der Beziehung oben konstant), so erhalten wir ($T=0K$)

$$\quad \quad \quad (2.210)$$

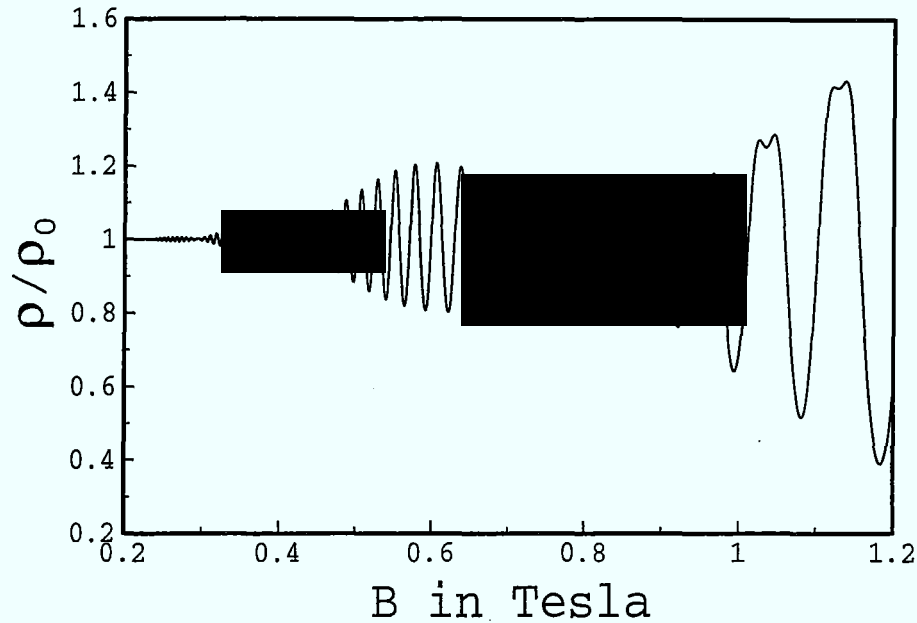


Abbildung 2.12: berechneter SdH-Effekt mit Spin-Bahn-Wechselwirkung, $\alpha = 1 \cdot 10^{-11} \text{eVm}$, $g^* = -15$, $m^* = 0.035m_e$, $n = 6 \cdot 10^{11} / \text{cm}^2$, $T = 0K$, $\Gamma_0 = 0.9 \text{meV}$

Δg beschreibt die Abweichung der Zustandsdichte am Ferminiveau mit Magnetfeld von der Zustandsdichte g_0 ohne Magnetfeld. Für kleine Magnetfelder ist die relative Variation im longitudinalen Widerstand hiernach unmittelbar proportional zu der relativen Variation der Zustandsdichte am Ferminiveau. Je größer die Halbwertsbreiten der Rashbaniveaus sind (die Streuung), desto geringer ist die Abweichung der Zustandsdichte vom Wert ohne Magnetfeld (eine Gleichverteilung im zweidimensionalen Elektrongas), d.h. desto kleiner ist die Amplitude der Oszillationen. In den Abbildungen (2.12) und (2.13) sind Sdh-Kurven mit und ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung mit der obigen Formel simuliert. Die charakteristischen Einschnürungen in Abbildung (2.12) sind offensichtlich eine Folge der Spin-Bahnwechselwirkung, deren Parameter sich hieraus bestimmen läßt. Während sich das Schwebungsmuster selbst bei einer kleinen Veränderung der Parameter stark ändern kann, ist die Fouriertransformierte in $1/B$ unempfindlich gegen kleine Abweichungen und kann zur Bestimmung des Spin-Bahn-Parameters verwendet werden, da der Abstand der beiden nah benachbarten Frequenzen nahezu proportional zu α ist. Eine vollständig korrekte Vorgehensweise hierzu sieht wie folgt aus: Als erstes muß man alle wesentlichen Parameter der Struktur bestimmen (effektive Masse im Subband, Ladungsträgerkonzentration, g-Faktor, ungefähre Streuzeit, wobei letzte-

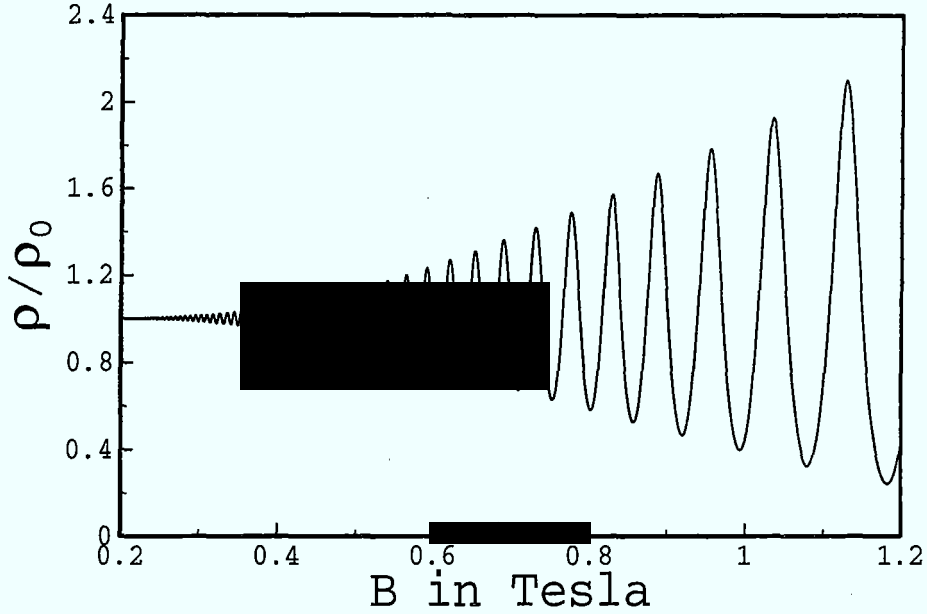


Abbildung 2.13: SdH-Effekt ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung, $\alpha = 0$, $g^* = -15$, $m^* = 0.035m_e$, $n = 6 \cdot 10^{11}/\text{cm}^2$, $T = 0\text{K}$, $\Gamma_0 = 0.9\text{meV}$

re nur Einfluß auf die Amplitude hat und nicht auf die Frequenz). Danach berechnet man eine theoretische Eichkurve für α , das heißt man berechnet den Abstand der beiden Frequenzen bei sonst festgehaltenen Parametern bei variierendem α unter Zuhilfenahme von Formel (2.210). Danach kann man anhand der Eichkurve unmittelbar den Spin-Bahn-Wechselwirkungsparameter der Probe ablesen.

Ähnliche Formeln für die oszillierende longitudinale Leitfähigkeit σ_{xx} bei kleinen Magnetfeldern sind schon von Adams und Hollstein [48], später dann auch von Ando [49], Ando und Uemura [50] sowie Isihara [47] für spinlose Landaulevels auf verschiedenen Wegen hergeleitet worden.

2.8.3 Der Quanten-Hall-Effekt

Für den Hall-Widerstand erhalten wir mit

$$\begin{aligned} E_y &= \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}} E_x \\ U_y &= \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}} E_x \cdot L_y \end{aligned} \quad (2.211)$$

(L_y ist die Ausdehnung der Probe in y-Richtung, U_y die Hall-Spannung) und

$$I_x = \frac{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}{\sigma_{xx}} E_x \cdot L_y \quad (2.212)$$

den Ausdruck

$$\begin{aligned} \frac{U_y}{I_x} &= \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} E_x \cdot L_y \\ &\approx \frac{1}{\sigma_{xy}} \\ &= \frac{h}{e^2} \frac{1}{n_{xy}} \end{aligned} \quad (2.213)$$

(die letzte Beziehung gilt exakt nur für Magnetfelder, in denen keine Rashbaniveaus am Fermi-niveau liegen, also auf den Plateaus) bzw.

$$\frac{I_x}{U_y} = \frac{e^2}{h} n_{xy} \quad (2.214)$$

$n_{x,y}$ ändert sich nur um 1, wenn ein Rashbaniveau über das Fermi-niveau gedrückt wird. Dies ist eine mögliche Erklärung des Quanten-Hall-Effekts ohne Randzustände [51], wie sie schon im Ansatz von von Klitzing [46] vorgeschlagen worden ist.

Für große Magnetfelder kann man σ_{xx} im Nenner vernachlässigen, während σ_{xy}^1 sich dann fast vollständig gegen den Korrekturterm zu n_{xy} in σ_{xy}^2 heraushebt (in den Formeln von Isihara und Smrcka [47] für spinlose Landauniveaus, die diese nicht ganz so weit entwickelt haben wie wir hier, steht vor σ_{xy}^1 das falsche Vorzeichen. Deshalb kompensieren sich diese Terme nicht bei hohen Magnetfeldern und die Autoren kommen zu dem Schluß, ihre Theorie wäre nur gut für kleine Magnetfelder). In der Abbildung (2.14) sind eine simulierte Sdh- und eine Quanten-Hall-Kurve unter Vernachlässigung der Korrekturen dargestellt. Offensichtlich liegen die Stufen im Quanten-Hall-Effekt an denselben Stellen wie die Peaks im Sdh-Effekt. Im Bereich unter 3 Tesla überlappen die Zustände und die Simulation gibt allerhöchstens noch die Peaklagen richtig an. Für $T > 0$ sind die Ecken verrundet. Man muß sich an dieser Stelle fragen, ob in Proben, die sehr rein sind und große freie Weglängen aufweisen, ein Mechanismus, bei dem die Leitfähigkeit erst durch Streuprozesse entsteht, nicht tatsächlich von ideal leitenden Randkanälen überflügelt werden kann. Für die Stufen im Hall-Effekt würde dies keinen Unterschied machen, da beide Prozesse zwischen den Übergangsbereichen zur selben Spannung senkrecht zur Transportrichtung führen, sich also gegenseitig nicht beeinflussen. Deshalb kann man auch so nicht entscheiden, welcher Mechanismus hier zum tragen kommt. Möglich ist, daß beide Prozesse nebeneinander existieren und die Reinheit der Probe entscheidet, welcher dominiert (je „dreckiger“ die Probe desto mehr „Volumentransport“).

Das Auftauchen des Faktors e^2/h in der Leitfähigkeit eines zweidimensionalen Systems hat nichts speziell mit den Rashbaniveaus zu tun. Für $B = 0$ erhält man z.B.

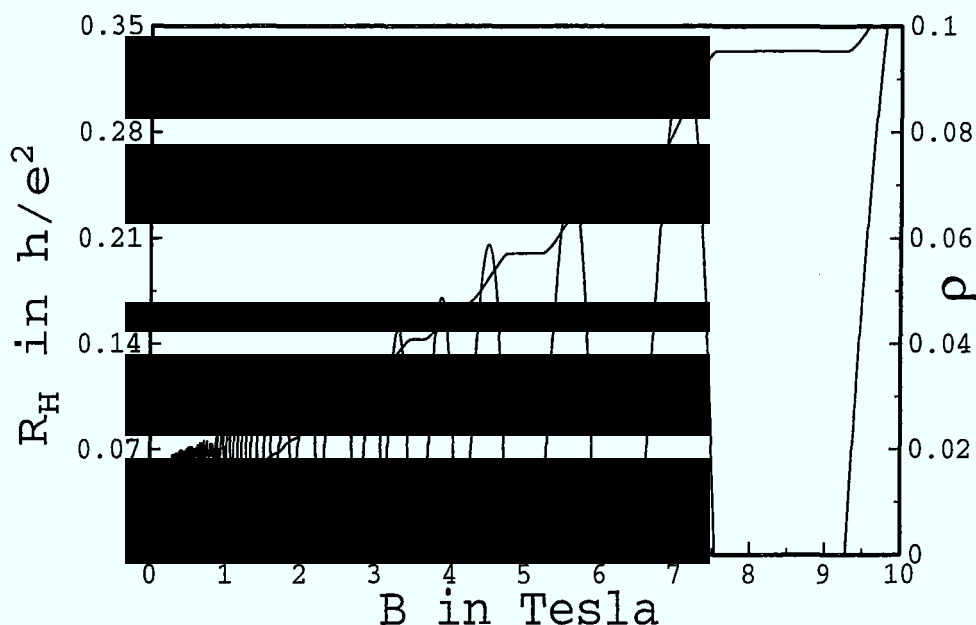


Abbildung 2.14: Quanten-Hall- und SdH-Effekt bei größeren Magnetfeldern $\alpha = 1 \cdot 10^{-11} \text{ eVm}$, $g^* = -15$, $m^* = 0.035m_e$, $n = 6 \cdot 10^{11}/\text{cm}^2$, $T = 0\text{K}$, $\Gamma_0(0)=0.9\text{meV}$, $\Gamma_0(B_0)/B_0=0.075\text{meV/T}$

mit ebenen Wellen als Basis innerhalb derselben Näherung für die Resolventen($T=0\text{K}$)



Mit $n(E_f) = m^*E_f/\pi\hbar^2$ folgt



E_f/T zählt anschaulich die Zahl der unabhängigen Kanäle (wobei es sich hier *nicht* um eindimensionale Kanäle handelt).

Hier sei auch noch auf ein Argument von Coleridge, Stoner und Fletcher[52] hingewiesen, wonach man besser in den analogen Gleichungen für die Leitfähigkeit von spinlosen Elektronen[47] an der Stelle von τ nicht die echten Lebensdauern verwenden sollte, sondern Transportzeiten, die einen Faktor 10 oder mehr größer sind als die Lebensdauern[52, 53, 54]. Dieses Argument bezieht seine Kraft aus dem Umstand,

daß im Grenzfall verschwindender Magnetfelder in der Gleichung für die longitudinale Leitfähigkeit keine Lebensdauer stehen sollte, sondern eine Transportzeit. Das gleiche Argument gilt auch für eingeschaltete Magnetfelder, wenn man an eine Behandlung spinloser Elektronen mit der Boltzmann-Gleichung denkt[55]. Nach Ansicht von Cole-ridge ist die Ursache für das Auftauchen der Lebensdauern anstelle von Transportzeiten bedingt durch die Verwendung von δ -förmigen Streuzentren bei Isihara und Smrcka[47]. Dies ist offensichtlich nicht richtig, da wir keinerlei Voraussetzungen über die Streupotentiale bei der Herleitung der Formeln gemacht haben. Die Ursache ist vielmehr im Verwenden jeweils einer CPA getrennt für die beiden Resolventen zu suchen, wodurch Interferenzglieder herausfallen, die aufgrund einer Konfigurationsmittelung eigentlich nicht herausfallen würden. Dadurch bedingt dürfte auch der Übergangsbereich zwischen den Plateaus noch etwas modifiziert werden. Die Formeln lassen sich sicher noch verbessern.

Kapitel 3

Experimente und Vergleich mit der Theorie

3.1 Einfachbarrieren

In einer Vielzahl von elektronischen Bauelementen auf GaAs-Substraten verwendet man als Barrierenmaterial für die Ladungsträger $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. GaAs ist ein direkter Halbleiter mit dem niedrigsten Leitungsbandminimum am Γ -Punkt der Brillouinzone, wohingegen Al-reiches $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x > 0.4$) ein indirekter Halbleiter ist, mit den niedrigsten Leitungsbandminima nahe den X-Punkten der Brillouinzone. Aufgrund dieser Tatsache ist es nicht einfach, Bauelemente in diesem System mit Modellen zu simulieren. Um realistische Bauelementsimulationen zu erhalten ist es unumgänglich, alle stromtragenden Prozesse innerhalb einer solchen Heterostruktur zu verstehen.

In den letzten Jahren hat es einige experimentelle (z.B. [56, 57, 102, 58, 59, 60]) und theoretische (z.B. [61, 62, 63, 64, 24, 65, 66, 67, 26, 27, 46]) Anstrengungen gegeben, um die elastische Kopplung zwischen Γ - und X-Tälern in AlAs/GaAs-Heterostrukturen zu verstehen. Das einfachste Model ist dasjenige, welches zuerst von Liu [26] innerhalb der Envelope Function Approximation (kurz EFA, auch Effektivmassennäherung genannt) als Ansatz vorgeschlagen worden ist. Diese Form der Kopplung hat ihre Rechtfertigung innerhalb einer verbesserten Herleitung der EFA für Heterostrukturen in dieser Arbeit gefunden.

An dieser Stelle wollen wir uns mit dem Transport durch dicke AlAs Barrieren bei kleinen Spannungen beschäftigen. Unter diesen Bedingungen gibt es vermutlich nur drei wichtige stromtransportierende Prozesse: Grenzflächenrauhigkeit, Γ -X Kopplung und eventuell störstellenassistiertes Tunneln [76, 77, 78]. Die untersuchten Strukturen, die mit MBE gewachsen worden sind, sahen wie folgt aus: n^+ -GaAs Substrat, 500nm GaAs $n = 1 \cdot 10^{18}/\text{cm}^3$, 20nm GaAs $n = 5 \cdot 10^{16}/\text{cm}^3$, 5nm GaAs nominell undotiert, (1.42/3.11/5.09/7.36)nm AlAs Barriere nominell undotiert, 5nm GaAs nominell undotiert, 20nm GaAs $n = 5 \cdot 10^{16}/\text{cm}^3$, 500nm GaAs $n = 1 \cdot 10^{18}/\text{cm}^3$. Alle Dotierungen sind Si-Dotierungen. Die Dotierung ist so eingestellt, daß eine nahezu temperaturunabhängige Elektronenkonzentration von $n_e = 1 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$ im Gleichgewicht nahe der Barriere in Emitter und Kollektor besteht (mit einem selbstkonsistenten Programm [74] berechnet). Bei der Fertigung der Strukturen wurde extrem darauf geachtet, alle Dioden gleich zu behandeln, d.h. Wachstum aller Schichten direkt hintereinander in der MBE (gleiche Wachstumsbedingungen, Hintergrunddotierung etc.), gleichzeitige Aufdampfung der Kontakte (Ni/AuGe/Ag/Au) aller Proben, identische Ätzdauer in ein und demselben Ätzmittel. Nur hierdurch kann man eine wirkliche Vergleichbarkeit der Daten erreichen. Die Messungen wurden mit einem Semiconductor Parameter Analyser von HP durchgeführt. Es wurde bei jeder Temperatur jeweils eine Kennlinie (in 1mV Schritten) der Dioden von -10mV bis +10mV mit der größten Integrationszeit aufgenommen. Alle Messwerte der in diesem Bereich linearen Kurven wurden dann in äquivalente Stromwerte bei 5mV umgerechnet und gemittelt. Hierdurch wurden Nullpunktskalibrierungsfehler, die man häufig bei diesen kleinen Spannungen und Strömen an einer Verschiebung der Kennlinie aus dem Nullpunkt (Nulldurchgang bei $V \neq 0\text{V}$) an den Messkurven erkennen konnte, eliminiert. Gleichzeitig wurde so der mittlere Fehler des Messwerts um einen Faktor 5 weiter reduziert. Der Anteil des Strom am Γ -Punkt, der durch Grenzflächenrauhigkeit bedingt ist, ist in Abschnitt (2.4) beschrieben. Wir

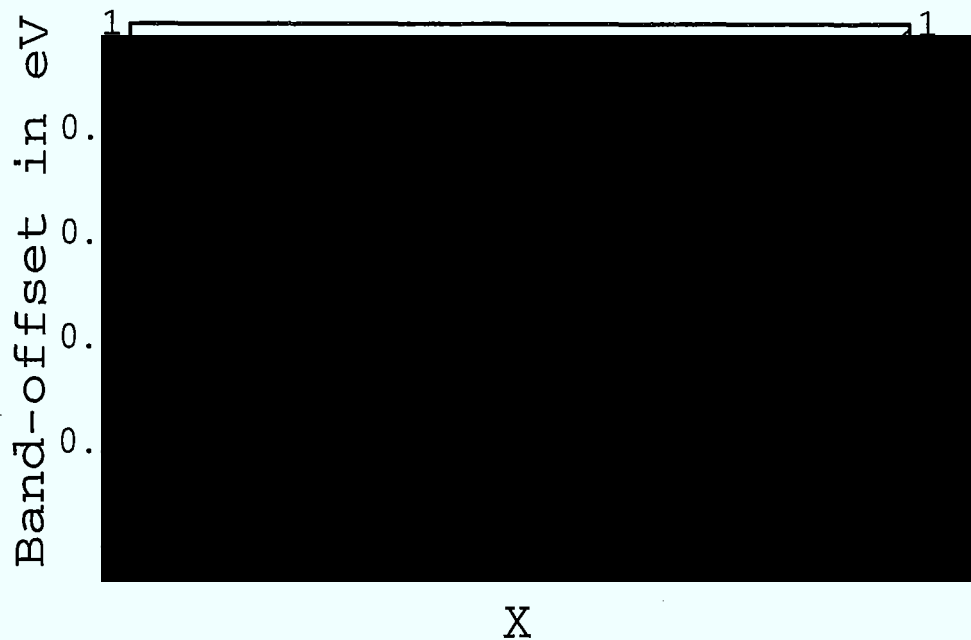


Abbildung 3.1: Bandkantenverläufe relativ zum GaAs Leitungsband von Γ -, X- und L-Band in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

nehmen hier an, daß es sich hier um den Grenzfall großer Korrelationslängen handelt. Da alle auftretenden Matrixelemente exponentiell von der Barrierendicke abhängen, sind die Beiträge in zweiter Ordnung am Γ -Punkt für dicke Barrieren exponentiell klein im Vergleich zur ersten Ordnung und deshalb vernachlässigbar. Ab der zweiten Ordnung tritt aber der Strom durch resonante Zustände auf. Im X-Band haben wir statt einer Barriere einen Topf im AlAs vorliegen (Abbildung (3.2)), in dem quantisierte Zustände auftreten, die durch die elastische Kopplung an das Γ -Band metastabil werden. Durch diese resonante Zustände fließt dann ein in unserem Fall thermisch aktivierter Strom, dessen Aktivierungsenergie eine obere Schranke für den Bandsprung vom Γ -Leitungsband im GaAs zum X-Leitungsband im AlAs darstellt, der eine wichtige Größe in diesem Materialsystem darstellt und deshalb genau bestimmt werden sollte. In Abbildung 3.3 sind einige experimentelle Messkurven von Stromdichten bei einer Spannung von 5mV von AlAs/GaAs Einfachbarrieren dargestellt. Nur die Kennlinie der 1.42 nm dicken Barriere zeigt innerhalb des hier dargestellten Temperaturbereichs keinen Übergang zu thermisch aktivierten Transport bei höheren Temperaturen. Für alle größeren Barrierendicken dominiert ein thermischer Strom bei $T=300\text{K}$ die Kennlinien. Die Stromdichte der 7.36nm Barriere ist im Tieftemperaturbereich nicht mehr

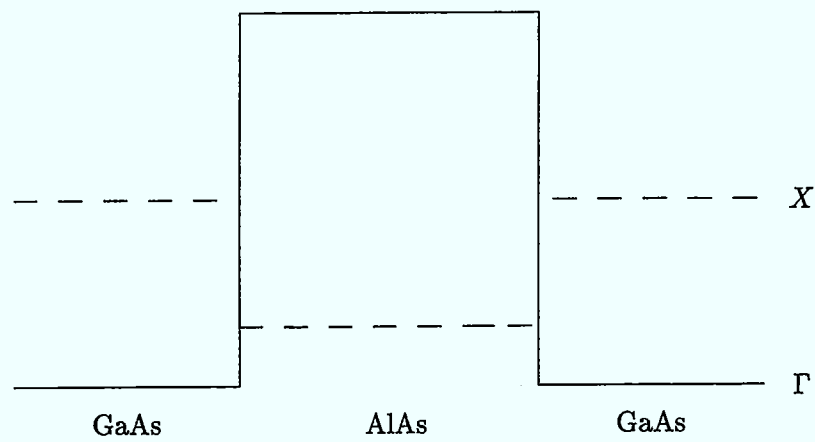


Abbildung 3.2: Bandkantenverläufe in GaAs/AlAs

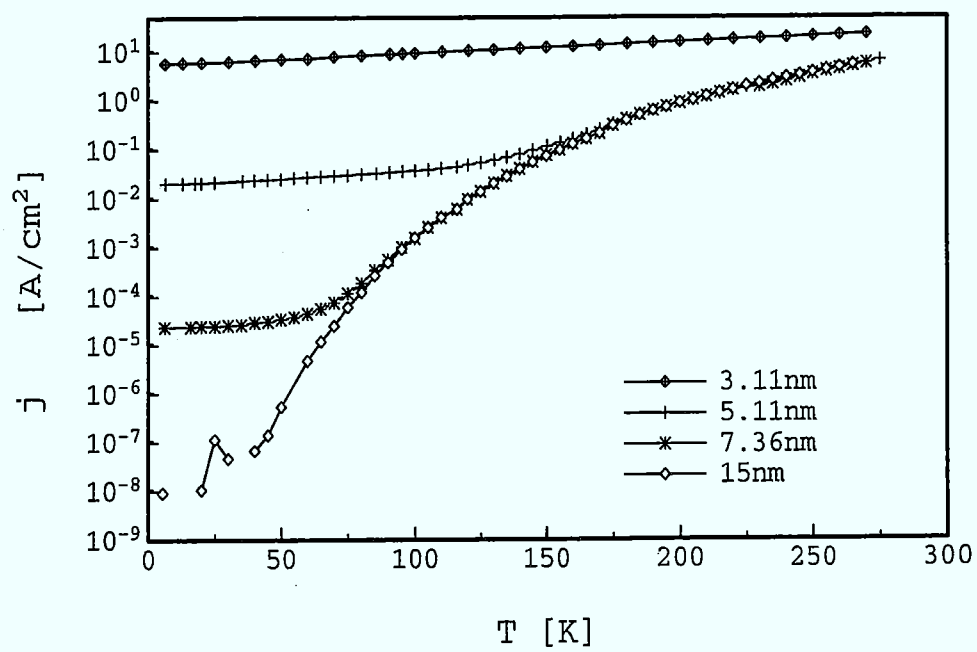
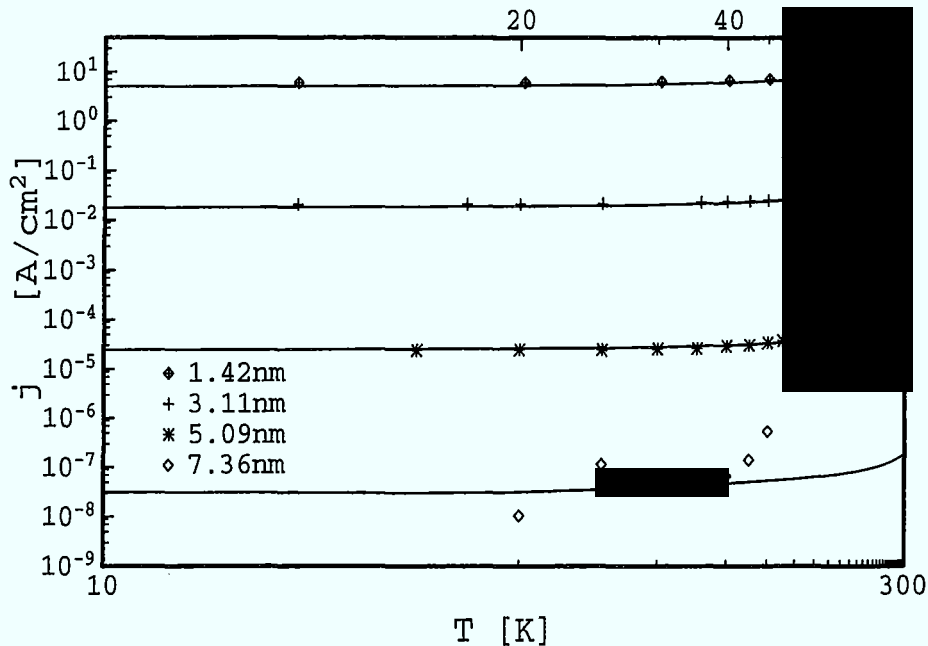


Abbildung 3.3: Stromdichte in Abhängigkeit von der Temperatur

Abbildung 3.4: j über $1/T$; Experiment und Theorie mit Grenzflächenrauigkeit

ganz korrekt gemessen. Was man hier auch sieht, ist das Rauschen des Messgeräts/der Spannungsquelle. Bei tieferen Temperaturen findet je nach Barrierendicke früher oder später ein Übergang zu Γ -Punkt dominiertem Transport statt. Dies liegt daran, daß der durch die Γ -Barriere tunnelnde Strom nahezu konstant bleibt, wohingegen der thermisch aktivierte Strom mit fallender Temperatur kleiner wird. In Abbildung 3.4 sind die gleichen experimentellen Kurven über die reziproke Temperatur aufgetragen. Hier erkennt man besonders gut den nahezu exponentiellen Zusammenhang der Ströme mit der reziproken Temperatur. Zusätzlich sind in dem Bild einige theoretisch berechnete Kurven eingezeichnet, auf die wir weiter unten eingehen werden. Auffallend ist in Bild (3.4) das Einmünden scheinbar aller experimenteller Messkurven von dickeren Barrieren zu höheren Temperaturen hin auf eine universelle Kurve. Hieraus kann man zum einen schließen, daß die Lage des resonanten Niveaus unabhängig von der Barrierendicke ist, zum anderen aber auch, daß die Stromdichte nicht von der Barrierendicke abhängt. Aufgrund der Unabhängigkeit des Resonanzniveaus von der Barrierendicke kann man schließen, daß es sich nicht um resonante X-Zustände handelt (vgl. Gleichung (2.100)), denn diese sollten mit kleiner werdender Barrierendicke angehoben werden. Eine Möglichkeit, die zu Aktivierungsenergien führen kann, die unabhängig von der Barrierendicke sind, ist Tunneln durch Störstellen, die im Barrierenmaterial angesie-

delt sind. Gleichzeitig folgt allerdings aus der Unabhängigkeit der Stromdichte von der Barrierendicke, daß es sich nicht nur um einzelne Störstellen handeln kann, da sonst der Strom von der mittleren Entfernung der Emittierelektronen zur einzelnen Störstelle abhängen sollte, die mit der Barrierendicke wächst, sondern es muß sich um ein Störstellenband handeln. Störstellen können genau so zu Resonanzen im Transmissionskoeffizienten führen, wie dies Zustände in Töpfen können [76, 77, 78]. Die Frage ist nun, welche Störstellen können hier vorliegen? In unserem Fall liegen tatsächlich die wasserstoffartigen, relativ flachen Störstellen, welche an das X-Band in AlAs gekoppelt sind und etwa 80 meV tiefer als dessen Kante [75] liegen, an der energetischen Lage unserer Resonanz ($\approx 130\text{--}140\text{ meV}$ über der GaAs Γ -Kante), wenn man für den Bandsprung vom Γ -Band in GaAs zum X-Band in AlAs einen Wert von etwa 0.21 eV annimmt. Der Literaturwert liegt in einem Bereich von 0.16–0.25 eV [26, 27, 69, 70, 71, 72, 73, 103, 5, 28]. Noch etwa höher gelegen ($\propto 20\text{ meV}$) als die wasserstoffartigen Störstellen befindet sich das von Si verursachte D-X-Zentrum in AlAs. Dieses jedoch dürfte nicht verantwortlich sein für einen resonanten Strom, da es zu metastabilen Zuständen führt.

Man kann zwar die Rechnung mit Γ -X-Kopplung für eine Barrierendicke allein an die thermische Kennlinie relativ gut anpassen (z.B. mit Gleichung (2.100)), muß hierfür aber beispielsweise das Produkt aus (Kopplungsparameter)² und Masse parallel zur Schicht je nach Barrierendicke mindestens um einen Faktor 100 und mehr anheben. Gleichzeitig erhält man natürlich für die anderen Barrierendicken mit den gleichen Parametern indiskutable Ergebnisse. Bei der Bestimmung des thermischen Stromes kann man am X-Punkt mit einem Einband-EFA-Modell rechnen, da hier der niedrigste Zustand am wichtigsten ist. In Abbildung (3.5) ist das zum Leitungsband gehörige X₁-Band und sein nächster Nachbar (X₃-Symmetrie), der nur etwa 0.25 eV entfernt ist, für GaAs dargestellt. Durch die kleine Distanz kommt es zu starken Nichtparabolizitäten. Man erkennt den komplizierten Bandverlauf. Aus diesem Grunde sollte man eigentlich die X-Zustände allein in einem Zweiband-EFA-Modell berücksichtigen, zumindest um die höher gelegenen Zustände sinnvoll zu beschreiben [66]. Da die hier notwendigen Parameter aber fast alle unbekannt sind, kann man zur Zeit nur Größenabschätzungen in einem Einbandmodell rechnen (oder man muß auf deutlich aufwendigere Rechnungen mit Pseudopotentialen zurückgreifen). Dennoch kann man die Γ -X-Kopplung hier als Verursacher des thermischen Stromes ausschließen.

Neben der Untersuchung des thermischen Stromes kann man mit einer Barrierendickenserie auch die effektive Masse in der Barriere bestimmen (aus dem temperaturunabhängigen Stromanteil, d.h. dem Strom bei tiefen Temperaturen), die ein wichtiger Parameter in Bauelementsimulationen ist und die in der Regel fälschlicherweise gleich der Γ -Leitungsbandkantenmasse gesetzt wird. Hierzu braucht man sich nur eine der Formeln für den Transmissionskoeffizienten mit Grenzflächenrauigkeit anzuschauen, um festzustellen, daß alle von der Barrierendicke nur über den Exponentialterm abhängen, falls die Grenzflächenrauigkeit sich nicht zu stark mit der Barrierendicke verändert. Bei genügend tiefen Temperaturen (und nicht zu dicken Barrieren) gibt es keinen thermisch angeregten Strom durch die resonanten Zustände. Setzen wir einen der Transmissionskoeffizienten in die Formel (2.44) für den Leitwert pro Flächeneinheit

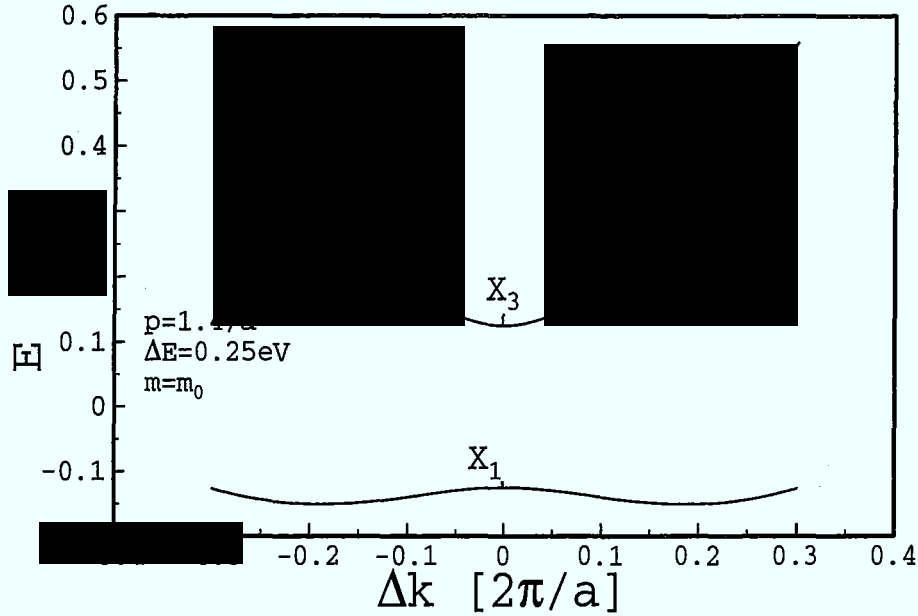


Abbildung 3.5: schematische Bandstruktur am X-Punkt in GaAs, mit kp-Theorie bestimmt

für kleine Spannungen ein, so erhalten wir

$$\text{[shaded box]} \quad (3.1)$$

(mit $\kappa \approx \sqrt{2m_b^*V_0/\hbar^2}$. In unseren Strukturen gilt $E_f \ll V_0$. Man kann daher in der Formel die Energie E neben V_0 in κ vernachlässigen). Falls sich die Grenzflächenrauigkeit nicht zu stark mit der Barrierendicke ändert, kann man hiermit die effektive Masse in der Barriere unmittelbar aus der exponentiellen Abhängigkeit des Leitwertes von der Barrierendicke bestimmen. Für GaAs/AlAs erhält man so den experimentell bestimmten Wert

$$m_{AlAs}^{*exp} = 0.09 \pm 0.01m_0 \quad (3.2)$$

($V_0 \approx 1.0\text{eV}$; der Fehler kommt aus dem ungenau bekannten effektiven Bandoffset). Der im Abschnitt über die EFA bestimmte theoretische Wert betrug

$$m_{AlAs}^{*theo} = 0.09 \pm 0.02m_0 \quad (3.3)$$

(Der Fehler kommt auch hier aus den nur ungenau bekannten effektiven Bandsprüngen). Eine ausgezeichnete Übereinstimmung!

Der Absolutwert der Stromdichte bei tiefen Temperaturen ist determiniert über die Lage des Fermi-niveaus und die vorhandene Rauigkeit. Es bereitet keine Schwierigkeit, mit realistischen Werten für die Rauigkeiten, die Messkurven im Bereich tiefer Temperaturen zu reproduzieren. In Abbildung 3.4 gehören die durchgezogenen Linien, die nahezu parallel zur Temperaturachse verlaufen, zu theoretisch berechneten Kurven (unter Einschluß von Grenzflächenrauigkeit mit großer Korrelationslänge) mit einer Elektronkonzentration von $n_e = 1 \cdot 10^{17} / \text{cm}^3$ und einer Masse in den Barrieren von $0.09 m_e$ bei einer Spannung von 5mV. Die Rauigkeiten wurden für beide Grenzflächen jeweils als gleich angenommen ($= \sigma$), da es sich um ein unterbestimmtes Problem handelt (man kann die Rauigkeit einer Barriere etwas vergrößern, wenn man die Rauigkeit der anderen passend reduziert und erhält den gleichen Strom). Trotzdem stellt der so erhaltene Kennwert ein Maß für die Qualität der Grenzflächen dar. Hiernach liegen folgende Rauigkeiten an den Grenzflächen der Barrieren vor:

b in nm	σ in ML
1.42	1.3
3.11	1.1
5.09	0.9
7.36	~ 1.0

Dies sind realistische Werte, die wir auch schon mit HRTEM Aufnahmen gefunden haben[10, 35] und die auch mit typischen Werten aus der Röntgenstreuung[11] übereinstimmen.

Abschließend sei bemerkt, daß man die Resonanzen im X-Band tatsächlich als schwache Wellen in der differentiellen Strom-Spannungskennlinie erkennen kann. Dies ist bereits von Mendez [79] gefunden worden. Einen echten Peak in der Strom-Spannungskennlinie bei 77K haben Beresford et al.[25] als ersten X-Zustand einer 4nm dicken AlAs Barriere interpretiert. Auf dieser Messung basieren einige Versuche, Theorie und Experiment anzupassen [28]. Dies liefert eine Kopplungskonstante α in einer Größe von $0.15 \text{ eV } \text{\AA}$, was mit unserem berechneten Wert fast übereinstimmt (Abschnitt 2.1.5). Die Auswertung der Tieftemperaturmesswerte hat uns so zum einen die effektive Masse geliefert, die in Übereinstimmung mit dem von uns im Abschnitt (2.1) theoretisch bestimmten Wert ist, zum anderen haben wir eine schöne Übereinstimmung der theoretisch mit Grenzflächenrauigkeit bestimmten Kennlinien mit den experimentellen Kurven bei tiefen Temperaturen. Simulierte Kennlinien einer 7.4nm Barriere mit Γ -X-Kopplung findet man in Abschnitt (3.2).

3.2 Grenzflächenrauhigkeit und Γ -X-Transfer in RTDs

In der Abbildung (3.6) sind zwei Kennlinien von AlAs/GaAs/AlAs RTDs gezeigt (Barrierendicke MBE 6ML, MOCVD (MOVPE) nominell 6ML, Well 5nm), von denen die mit MBE gewachsene nicht bei der optimalen Temperatur zur Erzielung eines optimalen Peak-to-Valley Verhältnisses (bei optimaler Wachstumstemperatur liegt der „Weltrekord“ in diesem System bei Raumtemperatur bei 5.5 [35]) gewachsen worden ist. Die Abbildung zeigt die erste RTD, die mit MOCVD gewachsen wurde und die bei Raumtemperatur funktioniert. Das neue hieran ist, daß der MOCVD bisher die nötige Qualität

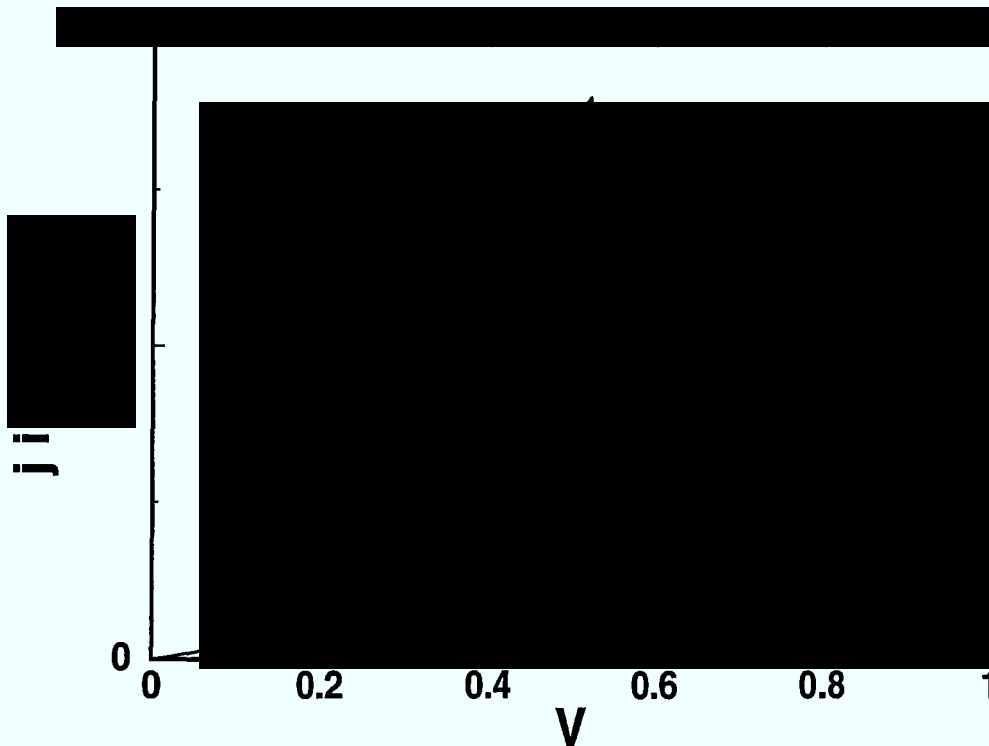


Abbildung 3.6: 6 ML/5nm/6ML AlAs/GaAs/AlAs RTD bei Raumtemperatur

der Grenzflächen abgesprochen wurde. RTDs sind hier genau die richtigen Indikatoren für gute/schlechte Grenzflächen[35], da erst die Verbesserung der Wachstumsmethoden im Laufe der Jahre ein erkennbares resonantes Tunneln bei Raumtemperatur möglich gemacht hat. Die Verbesserung der Wachstumsmethoden hat natürlich vor allen Dingen zu einer Verbesserung der Grenzflächen geführt. Im negativdifferentiellen Teil der experimentellen Kurven sieht man nicht die „wahren“, statischen Messkurven, sondern einen Mittelwert über Schwingungszyklen[35]. Die zugehörige Schwingfrequenz (auch der nichtlinearen Schwingung) läßt sich berechnen[35] und am Oszilloskop überprüfen [35]. Bei der mit MOCVD gewachsenen Probe stimmt offenbar die Barrierendicke nicht ganz (sie ist etwas zu groß, im Gegensatz zur MBE kann man hier nicht die Dicke

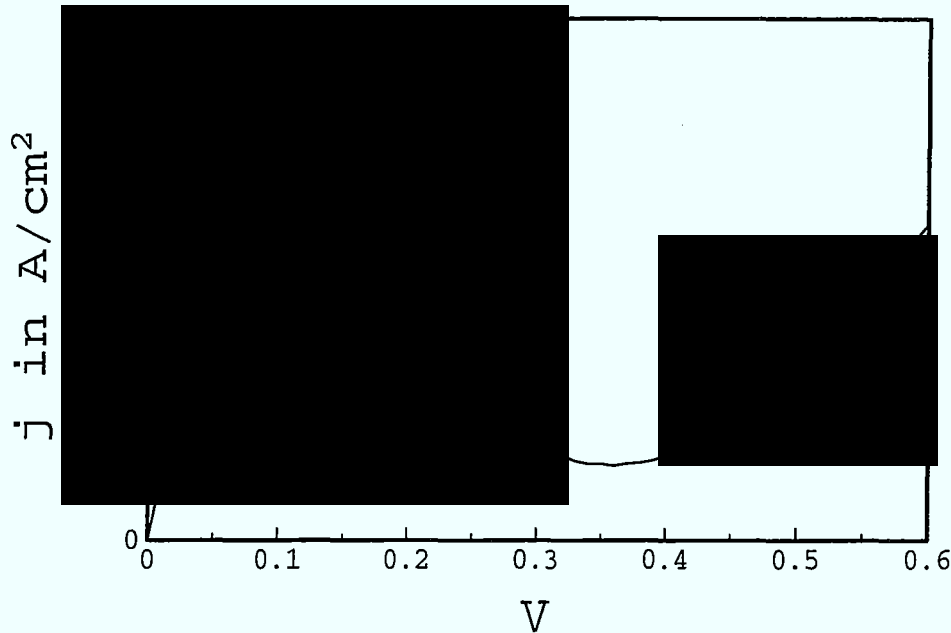


Abbildung 3.7: Simulierte Stromdichte einer AlAs/InGaAs/GaAs RTD, $b=6\text{ML}$, $w=5\text{nm}$, $\sigma=1.5\text{ML}$ $n=1 \cdot 10^{18}/\text{cm}^3$ $T=300\text{K}$, $r_{ik}=0$

unmittelbar beim Wachstum mit RHEED kontrollieren) und Dotierung ist verschleppt worden, was man an der hier nicht dargestellten deutlichen Asymetrie der Kennlinie unter Spannungsumkehr erkennt[35]. Dies stellt einen Achtungserfolg für die MOCVD dar, die mittlerweile auch fast atomar glatte Grenzflächen herstellen kann[37], auch wenn das gemessene PVR mehr als einen Faktor 2 schlechter ist als dasjenige von 6ML-RTDs, die mit MBE unter optimalen Bedingungen gewachsen worden sind[35]. Zur Modellierung des Einflusses von Grenzflächenrauhigkeit mit großen lateralen Korrelationslängen auf die Strom-Spannungskennlinie von Resonanten Tunneldioden, der völlig analog zu dem bei Einfachbarrieren zu sehen ist und seinen Einfluß auf den Strom aus der schwankenden Barrierendicke zieht, wurde ein Computerprogramm geschrieben, daß eine Transfermatrixmethode verwendet. Zur Mittelung über unterschiedliche Grenzflächenpositionen wurden Monte Carlo Integrationstechniken verwendet, die es auch möglich gemacht haben, Korrelationseffekte zwischen den Rauigkeiten unterschiedlicher Grenzflächen einzuschließen, indem die Position der einen Grenzfläche mit derjenigen der anderen korreliert wird. Hierzu wurde ein Zufallszahlengenerator entwickelt, der beliebig korrelierte gaußverteilte Zufallszahlen erzeugen kann. Die Korrelationseffekte zwischen den Rauigkeiten unterschiedlicher Grenzflächen werden anhand

eines Satzes von Replikationsfaktoren beschrieben. Diese Replikationsfaktoren können kontinuierliche Werte von -1 bis +1 annehmen. Ein Replikationsfaktor von +1 zwischen zwei aufeinander folgenden Grenzflächen bedeutet, daß die zweite Grenzfläche in diegleiche Richtung wie die erste versetzt wird, bei -1 entsprechend in die entgegengesetzte Richtung, während 0 zu einer völligen Unkorrelation der Abweichungen von den mittleren Positionen (sowohl in Betrag als auch in Richtung) führt. Die Zwischenwerte beschreiben entsprechende Übergangssituationen, in denen die Rauigkeiten weder völlig korreliert noch unkorreliert sind. Physikalisch realisiert sind vermutlich nur Replikationsfaktoren zwischen 0 und +1, da die nächste wachsende Schicht das Oberflächenprofil der unter ihr liegenden Grenzfläche zunächst einmal nachzeichnen wird. Wie man an hochauflösenden transmissionselektronenmikroskopischen Aufnahmen vermuten kann [35] liegen diese Replikationsfaktoren auch für sehr dünne AlAs-Barrieren (6 Monolagen) vermutlich näher bei 0 als bei +1. Messen (bzw. anfiten) kann man diese Faktoren mittels Röntgenstreuung. Eine Korrelation von Rauigkeiten zwischen den beiden Grenzflächen des Topfes hat vor allen Dingen einen Einfluß auf die Lage der Resonanzenergie (da der Topf dann im Mittel größer/kleiner ist) und damit auf den Wert der Spannung, bei dem der Peak auftritt, während eine Korrelation zwischen den Grenzflächen einer Barriere vor allen Dingen die Stromdichte verändert im Vergleich zu dem Fall ohne Korrelation.

In Abbildung (3.7) ist eine simulierte Kennlinie einer AlAs/InGaAs/GaAs RTD gezeigt (Schichtaufbau siehe [35]), in der der 5nm Topf und jeweils ein Emitter- und Kollektortopf aus $\text{In}_{0.17}\text{Ga}_{0.83}\text{As}$ bestehen. In der simulierten Kurve fehlt der Anteil der Spannung, der zum einen an Serienwiderständen, zum anderen an den Übergängen zwischen unterschiedlichen Dotierungen in den Zuleitungen abfällt. Auch die experimentellen Kurven von AlAs/InGaAs/GaAs RTD zeigen keine Anlaufspannung bei 300K (siehe Abbildung 12 in [35]) im Gegensatz zu den oben gezeigten Kennlinien von AlAs/GaAs RTDs. Dies liegt an dem tiefer liegenden Resonanzzustand (fast 0.1eV tiefer). Die effektive Masse in den Barrieren ist hier zu $0.07 \pm 0.01 m_e$ bestimmt worden [35] und ist damit etwas kleiner als in den AlAs/GaAs-Einfachbarrieren.

In den mir bekannten Rechnungen zum Einfluß von Grenzflächenrauigkeit auf den Strom in RTD's [80, 81, 82, 83, 84] verschwindet der Effekt für große laterale Korrelationslängen. Dies liegt an der lediglichen Berücksichtigung des niedrigsten Terms aus der Mittelung über die Grenzflächenrauigkeit, in dem ein Streupotential proportional zu $\delta(z - z_0)$ angenommen wird, wobei z_0 für die Lage einer Grenzfläche steht. Offensichtlich ist der Effekt auch für große Korrelationslängen nicht zu vernachlässigen, insbesondere in Strukturen mit großem Bandsprung wie z.B. in AlAs/GaAs/AlAs RTD's, da dann bereits ein kleines Verändern der Barrierendicke den Strom stark ändert. Den Einfluß der Rauigkeit erkennt man besonders schön am Transmissionskoeffizienten (Abbildung 3.8). In Dioden mit relativ dünnen Barrieren ist Grenzflächenrauigkeit der dominante Effekt, wohingegen bei dickeren Barrieren die Γ -X-Kopplung den Valleystrom dominiert, wie dies auch experimentell mittels druckabhängigen Messungen von Diniz et al.[103]) gezeigt worden ist. In Abbildung 3.9 ist ein Vergleich angestellt worden zwischen theoretisch berechneten und gemessenen Peak-to-Valley Verhältnissen bei symmetrischen AlAs/InGaAs/GaAs resonanten Tunnelnioden mit unterschiedlichen

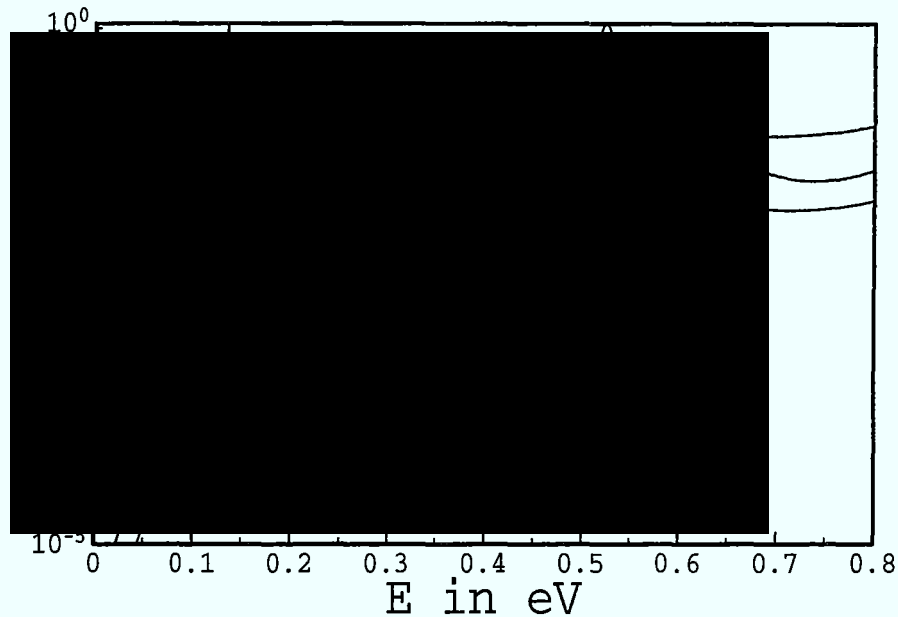


Abbildung 3.8: Transmissionskoeffizient einer 6ML AlAs/InGaAs/GaAs mit verschiedenen Rauigkeiten. Die σ sind hier für alle Barrieren gleich angenommen worden

Barrierendicken. Bis zu einer Dicke von etwa 6ML sind die experimentellen Kurven in guter Übereinstimmung mit theoretischen Werten, die nur Grenzflächenrauhigkeit mit großen Korrelationslängen berücksichtigen. Die Werte für die Rauigkeit der zweiten Grenzfläche einer Barriere sind jeweils 1ML größer angenommen worden als die Rauigkeit der ersten. Dies ist von uns näherungsweise mit HRTEM Aufnahmen gefunden worden[35, 21]. Dies hat seine Ursache in der geringen Oberflächenbeweglichkeit des Al bei den verwendeten (niedrigen) Wachstumstemperaturen, im Gegensatz zu derjenigen des In. Die Kurve mit 1/2/1/2ML Rauigkeit sollte in etwa den tatsächlich vorhandenen Rauigkeiten angepaßt sein. Für größere Barrierendicken fallen die experimentellen Werte stark ab gegenüber den theoretischen Werten. Dies hat vermutlich seine Ursache in einem (inkohärenten) Γ -X-Transfer. Der experimentelle Beweis, daß es sich um Γ -X-Transfer handelt, gelang Brugger et. al.[85], die durch druckabhängige Messungen (siehe auch [102]) die starke Abhängigkeit des Valleystroms vom Druck festgestellt haben. Nach diesen Messungen gewinnt der X-Bandtransport für symmetrische AlAs/GaAs RTDs mit einem 5nm Topf bei $T=300\text{K}$ ab 6ML an Bedeutung, wie wir es auch am Abfall des PVR für RTDs mit Barrierendicken größer 6ML erkennen. Diese Druckabhängigkeit hat seine Ursache in der Druckabhängigkeit des Γ -X-

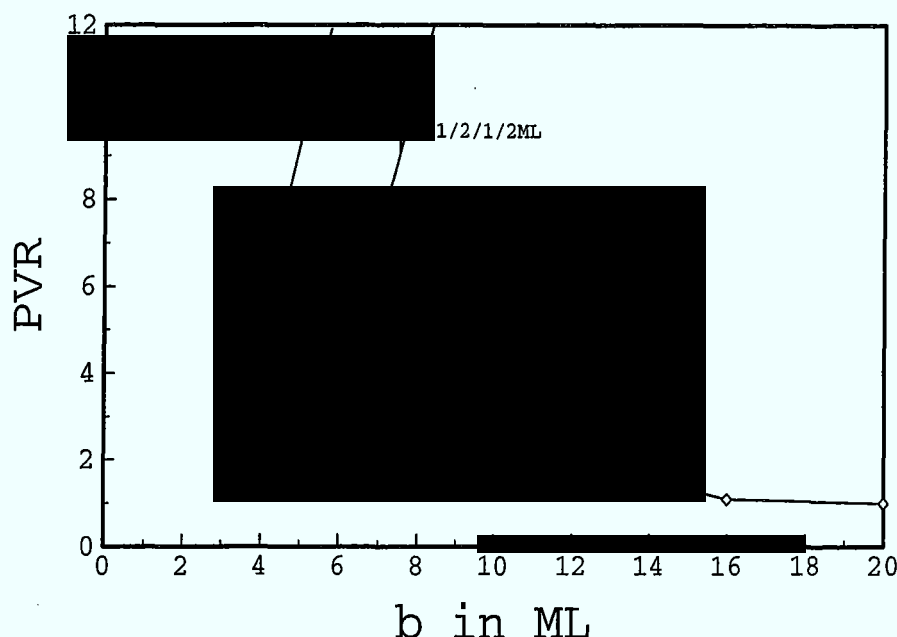


Abbildung 3.9: PVR über Barrierendicke, Experiment und Theorie inklusive Grenzflächenrauhigkeit (die Zahlen geben die Rauigkeiten der verschiedenen Grenzflächen an)

Bandoffsets[103] (alle anderen relevanten Offsets und Parameter (Massen) verändern sich nur wenig hier gegenüber)

$$\Delta E_{\Gamma X} \approx 0.19 \text{ eV} - 0.011 \frac{\text{eV}}{\text{kbar}} p \quad (3.4)$$

Den prinzipiellen Effekt erkennt man in Abbildung (3.10) anhand einer 7.4nm Einfachbarriere. Der relative Einfluß des Druckes ist umso größer, je dicker die Barriere ist, d.h. je tiefer die Zustände im X-Band von der Geometrie bedingt schon liegen. In Einfachbarrieren aus AlAs in GaAs sollte der Übergang zu X-Band dominiertem Transport ($T=300\text{K}$) bei kleinen Spannungen nach unseren Rechnungen bei etwa 4nm (14ML) Barrierendicke, je nach Γ -X-Bandsprung, stattfinden. Bei einer höheren Elektronkonzentration, wie sie hier vorliegt, findet der Übergang entsprechend früher statt.

Im Valleybereich nach dem ersten Peak in RTDs liegen in den hier interessierenden Strukturen etwa 0.4V an der Struktur, von denen ein Teil an der ersten Barriere abfällt. Deshalb findet der Übergang zu X-Band-Transport im Valleybereich des Stromes in RTDs mit 5nm Topf bei kleineren Barrierendicken (6-8ML) statt. Für kleinere Spannungen können sich die Zustände im X-Band wie ein Doppelpotf (Abschnitt 2.6)

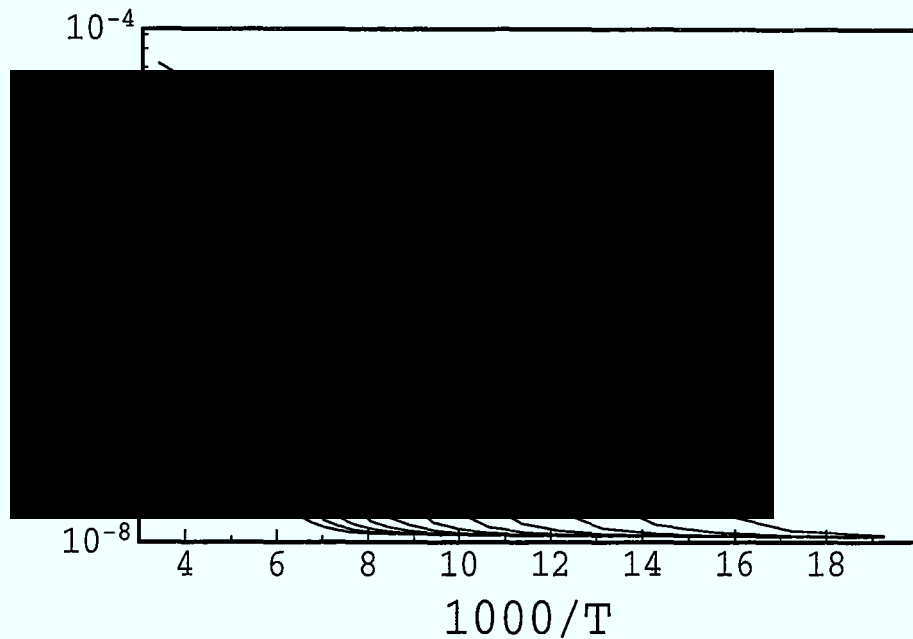


Abbildung 3.10: Stromdichte bei 5mV in einer 7.4nm AlAs-Einfachbarriere in Abhängigkeit von Temperatur und Druck $P=0-10\text{kbar}$ mit Γ -X-Kopplung, der Druck nimmt von links nach rechts zu

verhalten. Man muß deshalb zusätzlich noch einen X-Zustand in der 2. Barriere „treffen“, um einen merklichen Peak zu erhalten (Abschnitt 2.6). Für dünne Barrieren erhält man deshalb nur dann einen merklichen Strom durch X-Zustände, wenn zusätzlich der laterale Impuls sich ändert, und zwar so, daß die nötige Energie, um die sich zwei X-Subbänder in der Quantisierungsenergie in der ersten und zweiten Barriere unterscheiden, von der lateralen Energie entnommen/aufgenommen wird. Zusätzlich muß man hier bedenken, daß die Barrierenhöhe und die longitudinale effektive Masse sich im Vergleich zu einer AlAs Barriere am Γ -Punkt ändern. Die Barrierenhöhe ist nur etwa ein Drittel so hoch, während die Masse etwa 15 mal so groß ist. Deshalb ist eine Γ -Topf dicke (InGaAs) von 5nm im X-Band vergleichbar mit einer AlAs Barrierendicke am Γ -Punkt von 10nm. Dementsprechend klein ist die direkte Kopplung zwischen den beiden X-Töpfen und kann von einem Prozess überflügelt werden, der einem Dreifachtopf (Γ -X- Γ -X- Γ , das erste und letzte Γ beziehen sich auf Emitter und Kollektor) entspricht. Hier erhält man zusätzlich Peaks im Transmissionskoeffizienten, wenn sich Niveaus aller drei Töpfe überschneiden. Alle diese Überschneidungen sind aber ohne Impulsübertrag praktisch ausgeschlossen. Ein weiterer möglicher Pfad lautet Γ -X- Γ - Γ . Hierzu muß ein Γ -Zustand im Topf sich mit einem X-Zustand in der ersten Barriere überkreuzen.

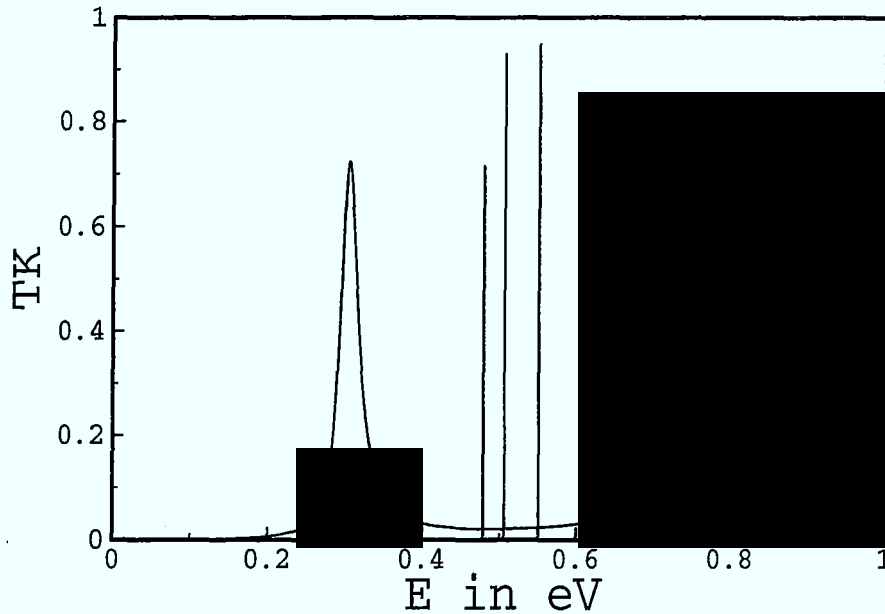


Abbildung 3.11: Transmissionskoeff. eines Γ -Elektrons in einer 6ML AlAs/5nm GaAs/6ML AlAs RTD mit exakter Berechnung der Γ -X-Kopplung bei 0.4V

Auch dies ist nur wahrscheinlich, wenn man einen Energieübertrag aus der z-Richtung in die lateralen Richtungen hat. Der letzte Prozess ist aber vermutlich derjenige, der in dem hier interessierenden Barrierendickenbereich für den Valleystrom verantwortlich ist, da eine direkte Herausstreuung aus dem Γ -Topf bei den vorliegenden Barrierendicken (6-20ML) mit einer größeren Rate abläuft als ein doppelter Streuprozess über einen X-Zustand in der zweiten Barriere. Nebenbei sei bemerkt, daß ein ähnlicher Prozess auch über die von uns gefundenen Störstellen ablaufen kann, deren energetische Lage ebenfalls an das X-Band in AlAs gekoppelt ist.

Den elastischen, den lateralen Impuls erhaltenden Γ -X-Transfer kann man exakt (unter Vernachlässigung anderer Streuprozesse) innerhalb einer Mehrbandtransfermatrixmethode berechnen. Für RTDs hat sich in unseren Rechnungen herausgestellt, daß ein reiner kohärenter Prozess zu fast unveränderten Valleystromen (für Strukturen mit Barrierendicken bis einschließlich 8ML) führt, somit für diesen Barrierendickebereich nicht alleine der entscheidende Effekt sein kann. Dasselbe Resultat ist, innerhalb desselben Modells der Kopplung, von Sun et al. [28] gefunden worden. In Abbildung (3.11) ist der Transmissionskoeffizient einer RTD mit 6ML Barrierendicken für eine Spannung im Valleybereich (0.4V) nach dem ersten Strompeak gezeigt. als Γ -X-Kopplungsparameter

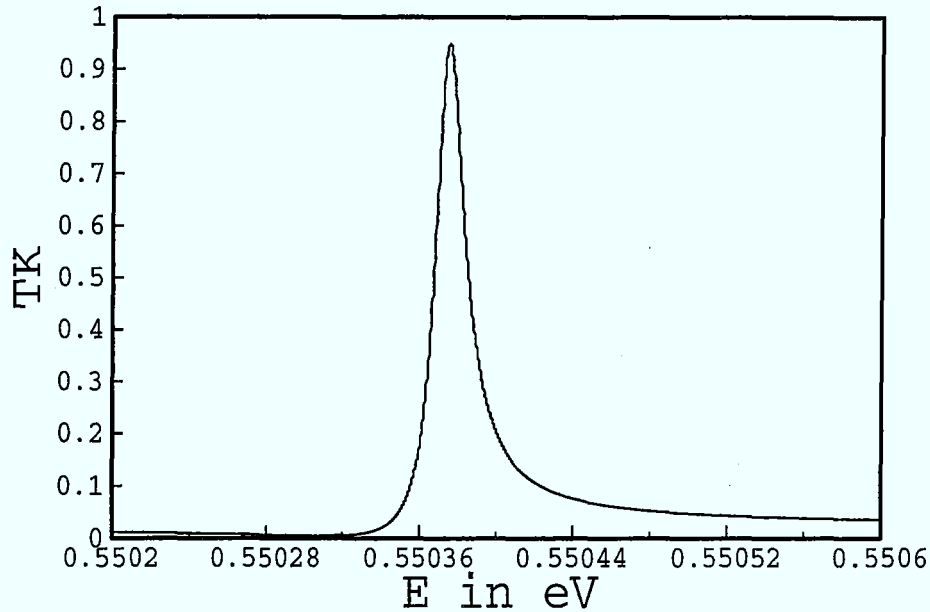


Abbildung 3.12: Eine der X-Resonanzen

wurde $0.1 \text{ eV\AA}$ verwendet. Die (longitudinalen) Massen am X-Punkt, für die in der Regel ungenaue Daten vorliegen (und die ohnehin, zumindest im Barrierenmaterial, von den Bandkantenmassen abweichen werden, vgl. Abschnitt (3.1)), wurden (einheitlich) zu m_e angenommen, die lateralen in AlAs zu $0.19 m_e$, in GaAs zu 0.24 . Für den Γ -X-Offset wurde 0.19 eV verwendet, die Lage des X-Bandes in GaAs wurde 0.48 eV über dem Γ -Band angenommen. Im Bereich vor der nächsten Γ -Resonanz findet man keine Veränderungen im Vergleich zu einer Kurve ohne Γ -X-Kopplung. Erst oberhalb der nächsten Resonanz sieht man typische, sehr schmale Resonanzen. Die Resonanzen sind hier nicht ganz lorentzförmig (Abbildung (3.12)). Dies hat Ando[66] dazu verleitet, von Antiresonanzen zu sprechen, da in einer logarithmischen Auftragung der kleine Dip, wie er vor der eigentlichen Resonanz hier auftaucht, etwas dramatischer aussieht (dieselben, nicht ganz lorentzförmigen Resonanzen treten auch bei Einfachbarrieren auf).

Abschließend müssen wir noch einen Streuprozess finden, der einen Übergang aus dem X-Valley in ein Γ -Valley verursachen kann und gleichzeitig zu einem Impulsübertrag in laterale Richtung führen kann, um so einen Energietransfer von der Ausbreitungsrichtung senkrecht zur Schicht in Richtung parallel dazu zu ermöglichen. Eine solche Kopplung kann, bei den hohen anliegenden Spannungen, z.B. durch Emission eines Phonons zuwege kommen. Durch Emission eines Phonons werden praktisch alle

Γ -Zustandssubbänder im zentralen Topf für ein Elektron in einem X-Zustand $E_\lambda(k_\parallel)$ mit Parallelimpuls $k_\parallel$ in der ersten Barriere erreichbar, deren Subbandkanten unterhalb $E_\lambda(k_\parallel) - \hbar\omega$ liegen, da der parallele Impuls nicht erhalten sein braucht. Phononstreuung in Heterostrukturen kann ein sehr effektiver Prozess sein, der relativ komplex sein kann aufgrund des Auftretens neuer Phononmoden (Schicht- und Grenzflächenphononen/Polaritonen) [86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101].

In diesem Abschnitt haben wir gezeigt, daß die Strom-Spannungs-Kennlinien von resonanten Tunneldioden mit dünnen Barrieren durch Grenzflächenrauhigkeit determiniert sind, wohingegen ab mittleren Barrieren ein den parallelen Impuls verändernder Streuprozess (vermutlich ein phononassistierter Transportprozess) die Kennlinien verändert. Der elastische Γ -X-Transfer spielt hier als Zulieferer der Elektronen eine wichtige Rolle (hauptsächlich durch ihn werden die X-Zustände in der Emitterbarriere populierte).

3.3 Magnetotransportmessungen an Quasidoppeltopfstrukturen

Es gibt eine einfache Möglichkeit, experimentell die Abstände verschiedener Energiezustände in Heterostrukturen mit vertikalem Stromtransport bei verschiedenen Spannungen zu ermitteln (Abschnitt 2.6) [105, 106]. Hierzu muß man bei jeweils fester Spannung Magnetotransportmessungen mit dem Magnetfeld parallel zur Wachstumsrichtung durchführen. Gleichzeitig kann man eventuell die Energie der für den Transport wichtigsten phononischen Übergänge bestimmen. Das Prinzip der Messung sei hier an

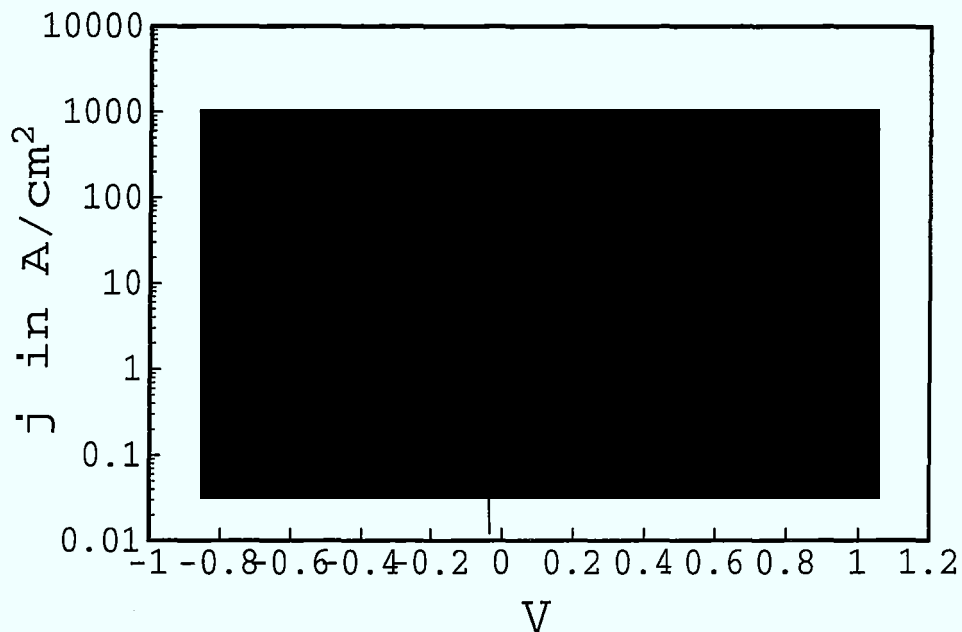


Abbildung 3.13: I-V-Kennlinie einer Doppeltopfstruktur

einer Quasidoppeltopfstruktur (drei Barrieren, die zwei gekoppelte Quasitöpfe bilden) dargestellt. In Abschnitt 2.6 ist plausibel gemacht worden, daß jeweils ein Maximum im Strom entsteht, wenn einer der Zustände, die den Hauptteil des Stromes tragen, in Resonanz mit einem anderen Zustand gerät, sich somit entladen kann und von neuem zur Aufladung zur Verfügung steht, wodurch insgesamt ein größerer Strom fließen kann. Bei eingeschaltetem Magnetfeld tritt im Strom also immer dann ein Peak auf, wenn (nur elastische Kopplung)



(m nummeriert die Zustände (Subbänder) im Topf i, n diejenigen im Topf j, p und q nummerieren die Landauniveaus) und die zugehörigen Subbandkanten unterhalb des Fermi-niveaus liegen. Aufgrund der Kopplung tauchen Peaks nur auf, wenn i und j übereinstimmen oder zu benachbarten Töpfen gehören (die Zustände sind nur an Zustände im selben oder im benachbarten Topf gekoppelt wegen der exponentiellen Abnahme der Kopplung mit der Entfernung) Die obige Gleichung bedeutet für das Magnetfeld

$$\frac{1}{B} = (p - q) \frac{\hbar e}{m^*} \frac{1}{E_m^i - E_n^j}$$

Für eine feste Spannung ist der Strom deshalb eine periodische Funktion in $1/B$, seine Fouriertransformierte weist folglich bei einem Magnetfeld

$$B_{el}^{i,m \rightarrow j,n} = \frac{m^*(E_m^i - E_n^j)}{\hbar e}$$

ein Maximum auf (el steht für elastisch, da wir bisher nur elastische Prozesse betrachten). An inelastischen Prozessen ist in unseren Strukturen hier nur Emission (die Messungen sind nur bei tiefen Temperaturen sinnvoll) von longitudinalen optische Phononen (Auswahlregeln) wichtig, was zu einem Peak in der Fouriertransformierten des Stromes bei einem Magnetfeld

$$B_{in}^{i,m \rightarrow j,n} = \frac{m^*(E_m^i - E_n^j - \hbar\omega_{LO})}{\hbar e}$$

führt. Weitere Oszillationen treten auf, falls sich ein Emittierzustand über das Fermi-niveau schiebt. Das zugehörige Magnetfeld in der Fouriertransformierten ist

$$B_{qf} = \frac{m^* E_f}{\hbar e}$$

Diese periodische Modulation entsteht, wenn Landaulevels durch das Quasiferminiveau schieben, somit zum Transport beitragen/nicht beitragen. Eventuell weitere Oszillationen können entstehen, wenn sich ein Quasiferminiveau in einem der Subbänder etabliert[105].

In der Tabelle unten sind die verschiedenen Prozesse, ihre Abhängigkeit von der angelegten Spannung und die erhaltene Information für eine Doppeltopfstruktur dargestellt. Der dem Emitter/Kollektor am nächsten liegende Topf ist mit e/c bezeichnet.

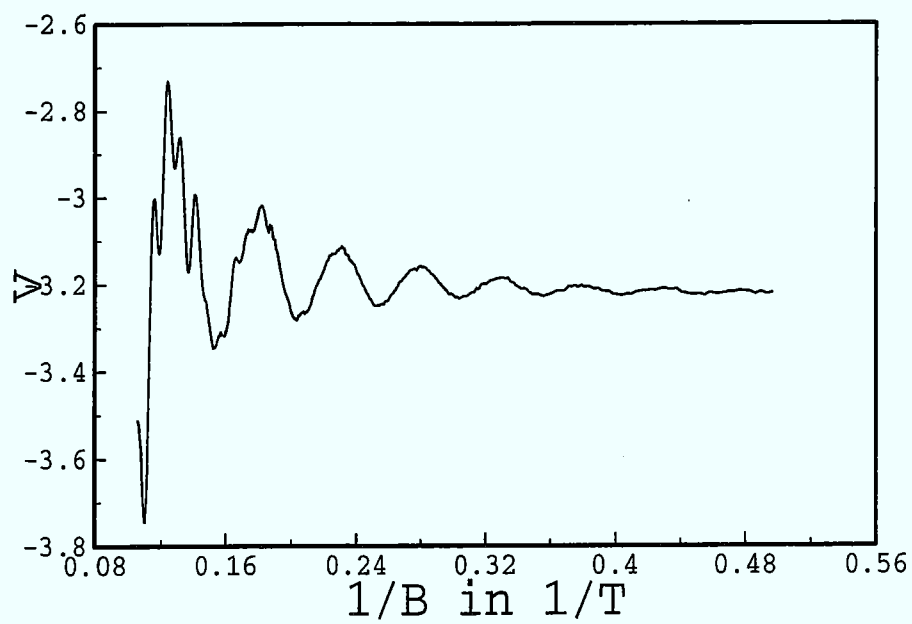
Prozess	Streuung	Abhängigkeit des B-Peaks von V	erhaltene Information
e,m $\rightarrow$ c,n	elastisch	stark (nahezu linear)	$E_m^e - E_n^c$
e,m $\rightarrow$ c,n	inelastisch	stark (nahezu linear)	$E_m^e - E_n^c - \hbar\omega_{LO}$
c,m $\rightarrow$ c,n	elastisch	(fast) keine	$E_m^c - E_n^c$
c,m $\rightarrow$ c,n	inelastisch	(fast) keine	$E_m^c - E_n^c - \hbar\omega_{LO}$
-	-	schwach	E_f

Neben den obigen Messungen bei fester Spannung und variierendem Magnetfeld kann man noch eine Strom-Spannungs-Kennlinie bei $B=0$ aufnehmen. Die anhand der Peaks

im Strom erhaltene Information ist in der Tabelle unten dargestellt. Es führen nur solche Niveauüberschneidungen zu einem Peak, die oberhalb der Emittorbandkante und unterhalb des Quasiferminiveaus des Emitters bzw. wenige kT darüber stattfinden. In letzterem Fall sind die Peaks stark temperaturabhängig und aus der Aktivierungsenergie (temperaturabhängige Messung bei der Peakspannung) kann die energetische Lage des Kreuzungspunktes ermittelt werden.

Übergang	Streuung	erhaltene Information
$e, m \rightarrow c, n$	elastisch	$E_m^e = E_n^c$
$e, m \rightarrow c, n$	inelastisch	$E_m^e = E_n^c + \hbar\omega_{LO}$

Der kohärente Prozess ist hier unter elastisch subsummiert. Mithilfe dieser charakteristischen Abhängigkeiten kann man nun umgekehrt auf die zugrunde liegenden Prozesse schließen und auf die spannungsabhängige Lage der Kanten der Subbänder zurückrechnen. Auf diese Weise erhält man eine sehr gründliche experimentelle Charakterisierung der Heterostruktur, die allerdings sehr zeitaufwendig ist und sich deshalb nur für Strukturen empfiehlt, bei denen man tatsächlich die genaue Lage der Zustände kennen will/muß. In Abbildung 3.13 ist der Betrag der Stromdichte einer Doppeltopfstruktur bei nominell 0.3K dargestellt. Die etwas seltsame Form der Kennlinie bei dem 2. Peak positiver Spannung liegt daran, daß in der Kennlinie der (sehr große) gemessene Serienwiderstand der Zuleitungen des Kryostaten herausgerechnet worden ist. Hierdurch werden die Sprungpunkte an den bistabilen Randbereichen[35] je nach Stromwert unterschiedlich verschoben. Es handelt sich um einen GaAs/AlAs-Doppeltopf mit folgendem Schichtaufbau: nach dem üblichen Dotierprofil[35] 10ML AlAs/4nm GaAs/7ML AlAs/11nm GaAs/5 ML AlAs plus Deckschichten mit der umgekehrten Dotierfolge. Bei allen Strompeaks erkennt man im Valleybereich eine kleine weitere Wölbung, die hier durch phononassistiertes Tunneln verursacht wird[107] („Phononsatellit“). In Abbildung (3.14) erkennt man die periodische Abhängigkeit des Leitwerts vom inversen Magnetfeld bei einer Spannung von +0.5V. In Abbildung (3.15) ist die zugehörige Fouriertransformierte in $1/B$ dargestellt, die einen Peak bei etwa 120 Tesla aufweist. In GaAs entspricht 1T Magnetfeld einer Energie von 1.72meV, so daß der Peak auf eine Energiedifferenz von zwei Subbandkanten von etwa 200meV hinweist. Eine vollständige Charakterisierung einer Doppeltopfstruktur findet man bei Smet[108].

Abbildung 3.14: Leitwertschwankung über $1/B$

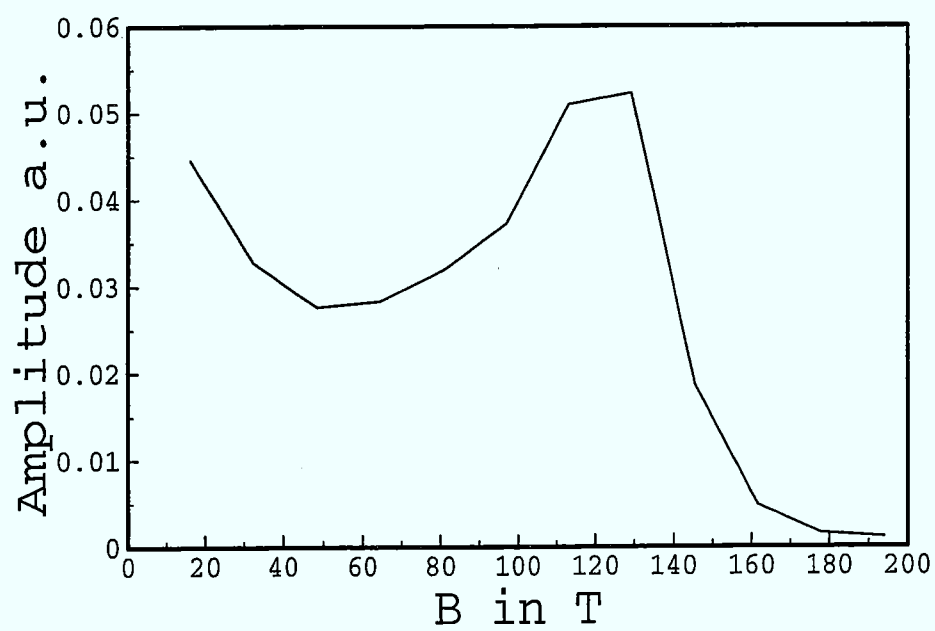


Abbildung 3.15: in $1/B$ Fouriertransformierte der Leitwertschwankung

3.4 Spin-Split in zweidimensionalen Elektronengasen

In diesem Abschnitt wird ein Vergleich zwischen theoretisch berechneten und gemessenen Werten für den Rashbakopplungskoeffizienten α in einem zweidimensionalen Elektronengas beschrieben. Nähere Details zu den Simulationen (und noch einige weitere von uns durchgeführte Simulationen), die zusammen mit Gernot Engels durchgeführt wurden, finden sich in dessen Dissertation [104]. Desweiteren wird eine Simulation zu SdH- und Quanten-Hall-Effekt vorgestellt und mit dem Experiment verglichen. Hier

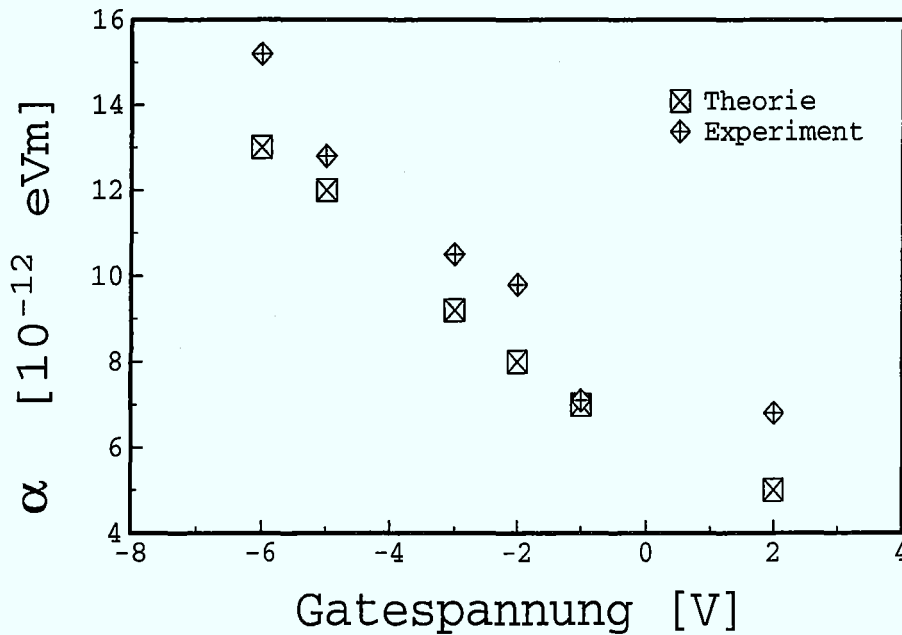


Abbildung 3.16: Experimenteller und simulierter Spin-Bahn-Kopplungsparameter α

nur kurz beschrieben seien die Ergebnisse zu einem mit einem Gate versehenen, oberflächennahen zweidimensionalen Elektronengas. Durch dieses Gate ist es möglich, sowohl das Feld im Bereich des zweidimensionalen Elektronengases als auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an den Grenzflächen zu verändern. Zur Berechnung der Wellenfunktionen des Subbandes wurde ein von Arnulf Leuther geschriebenes Programm [74] verwendet, welches die Bandkantenverläufe und Wellenfunktionen selbstkonsistent bestimmt. Mit diesen Wellenfunktionen wurde dann von uns der zu erwartende Wert für die Kopplungskonstante α gemäß Gleichung (2.24) bestimmt, in der noch eine weitere Vereinfachung durchgeführt wurde, in dem nur die Valenzbänder berücksichtigt werden. Der Beitrag der höher gelegenen Bänder ist mit Sicherheit in den hier interessierenden Fällen aufgrund der unterschiedlichen Bandabstände (und des kleineren E_{pc}) weit mehr

als eine Größenordnung kleiner als der der Valenzbänder. Die Schichtstrukturen und die verwendeten theoretischen Parameter findet man in der Arbeit von G. Engels[104]. In den Simulationen hat sich herausgestellt, daß der Grenzflächenterm in vielen Fällen den größten Beitrag zur Kopplungskonstante liefert. Die mikroskopische Ursache für diesen Grenzflächenterm ist vermutlich in den elektrischen Dipolen zu suchen, die auf atomarer Skala nur an der Grenzfläche zwischen den unterschiedlichen Atomen der konstituierenden Materialien entstehen, und sonst nirgendwo in der Probe zu finden sind. Dieses elektrische Feld führt dann zu einer zusätzlichen Spin-Bahn-Wechselwirkung. Simulation und Experiment passen gut (nicht nur in den hier dargestellten Simulationen) zusammen. Zum ersten Mal ist es gelungen, experimentell gefundene Werte für die Spinaufspaltung theoretisch zu simulieren.

Sowohl die experimentellen als auch die Theoriewerte haben relativ große Fehlerbalken im 10 Prozent Bereich, da auf der einen Seite die experimentelle Auswertemethode nur ungenaue Werte liefert, auf der anderen Seite in die Theorie viele nur ungenau bekannte Parameter eingehen. Auch durch diese Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment findet die im ersten Abschnitt hergeleitete verbesserte EFA ihre Bestätigung.

Im folgenden zeigen wir eine SdH- und Quanten-Hall-Effekt Messung von Gernot Engels [104] und mit den gemessenen Parametern der Probe simulierte Kurven. In Abbildung 3.18 sind simulierte Kurven innerhalb der Hochfeldnäherung gezeigt, bei denen im Nenner jeweils nur n_{xy} berücksichtigt wurde. Hierdurch wird die Quanten-Hall-Kurve zwar in den Stufen reproduziert, aber der Übergangsbereich ist breiter als im Experiment. Der Bereich kleinerer Magnetfelder wird schlecht beschrieben, aber hier ist die 'Hochfeldnäherung in der Selbstenergie aufgrund des Überlappens der Zustände auch nicht zu rechtfertigen. Die Korrekturterme zu n_{xy} führen zu einem Aufsteilen der Quanten-Hall-Kurve im Übergangsbereich, aber auch (in dieser Näherung) zu einem kleinen Überspringen (Abbildung(3.19)). Dies dürfte vor allem an dem etwas zu steilen Abfallen der spektralen Dichte in dieser Näherung liegen. Vergewärtigt man sich die große Zahl von Näherungen, insbesondere die recht drastische Näherung in der Selbstenergie, so sollten die vorhandenen Diskrepanzen nicht zu ernst genommen werden. Durch eine bessere Näherung in der Selbstenergie dürften auch jeweils die beiden zusammengehörigen Peaks in der SdH-Kurve mehr miteinander verschmelzen als in der simulierten Kurve (dies kann man wahrscheinlich am einfachsten erreichen, wenn man die Spinn-Bahn-Wechselwirkung für große Magnetfelder als Störung auffaßt und einen entsprechenden Term in die Selbstenergie aufnimmt). Offensichtlich können wir die wesentlichen Merkmale einer SdH- und Quanten-Hall-Messung mithilfe der Einteilchen-Kuboformel erklären. Eine Verbesserung in der Berechnung der Selbstenergie (numerisch) dürfte vermutlich viele Diskrepanzen beseitigen. Innerhalb der jetzigen Näherung dauert eine theoretische SdH- und Quanten-Hall-„Messung“ nur wenige Sekunden. Das man den Kleinfeldbereich gut mit der Formel (2.210) simulieren kann, kann man auch der Arbeit von G. Engels[104] entnehmen.

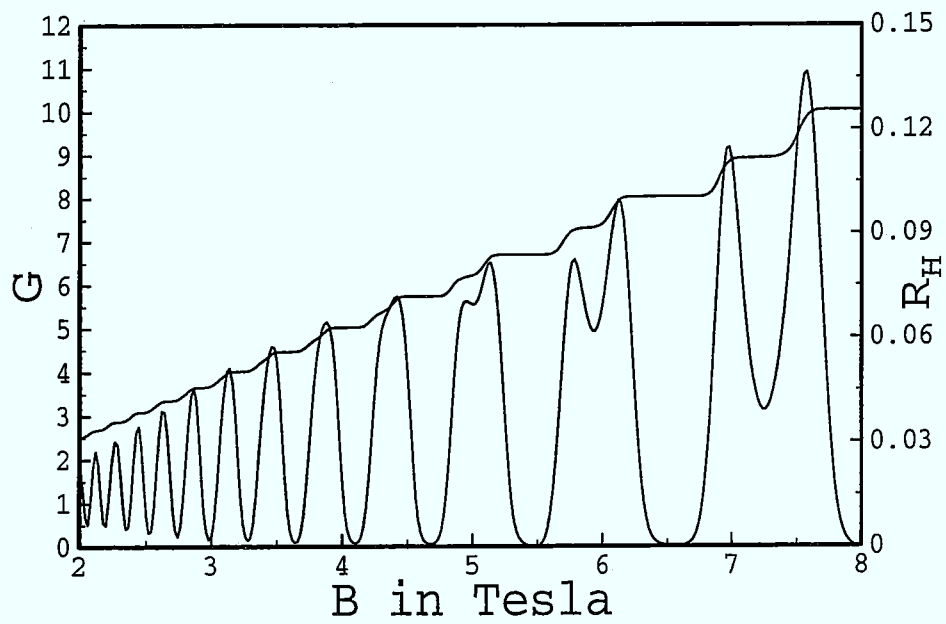


Abbildung 3.17: experimenteller SdH- und Quanten-Hall-Effekt, $g^* \approx -10$, $m^* \approx 0.035m_e$, $\alpha \approx 5.6 \cdot 10^{-12} \text{ eVm}$

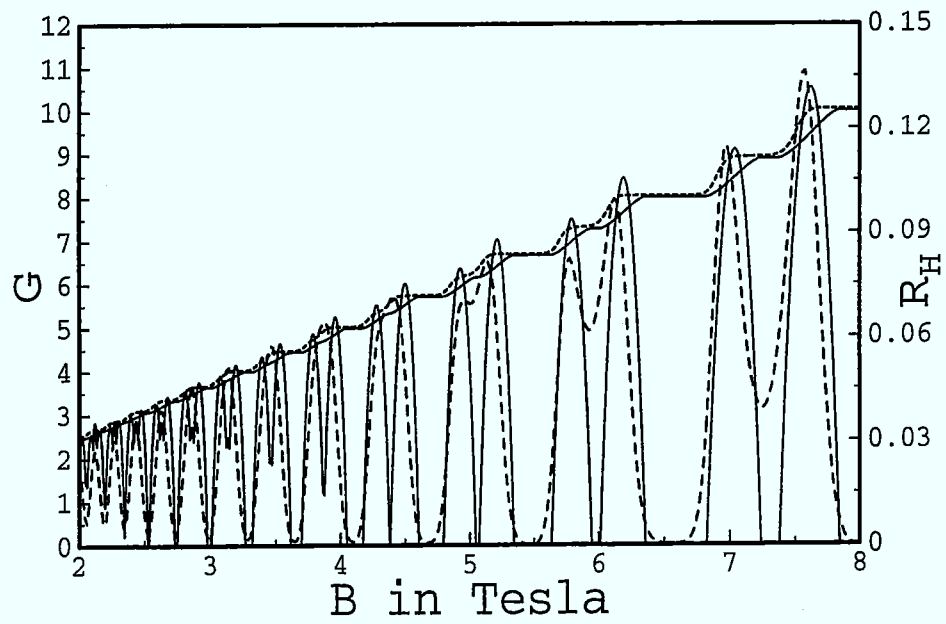


Abbildung 3.18: experimentelle und simulierte SdH- und Quanten-Hall-Effekt, Daten von Bild (3.17), $\Gamma_0(0) = 0.9\text{meV}$, $\Gamma_1/B_0 = 0.1\text{meV/T}$; nur n_{xy}

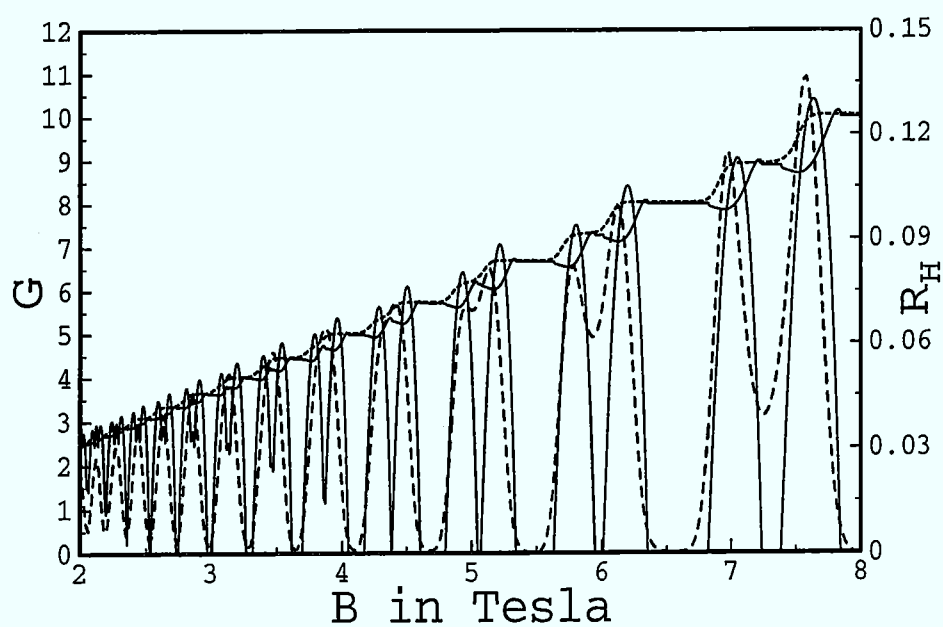


Abbildung 3.19: experimentelle und simulierte SdH- und Quanten-Hall-Effekt, Daten wie in Bild (3.18); inklusive Korrekturterme

3.5 Punktkontakte mit Spin-Split

Ein Punktkontakt ist eine schwach leitfähige Kopplung zwischen zwei Elektronenbädern in zweidimensionalen Elektronengasen. Die schwache Kopplung entsteht durch eine kleine Öffnung innerhalb eines Gates (oder durch einen leitfähigen Steg (Mesa)), welches die Trennlinie zwischen den beiden Bädern definiert (Abbildung (3.20)). Durch Anlegen einer Spannung an das Gate sind die Bereiche unter dem Gate von Elektronen verarmt und nur noch der Bereich der kleinen Öffnung kann zur Leitfähigkeit beitragen. Diese Leitfähigkeit ist aufgrund der Spannungsabhängigkeit der Verarmungszonen ebenfalls spannungsabhängig. Durch Anlegen einer genügend hohen Spannung kann der Kontakt sogar abgeschnürt werden. Die laterale Ausdehnung b des Punktkontaktes liegt, spätestens nach Anlegen einer genügend hohen Spannung, in einem Bereich, der zur Quantisierungseffekten führt. Lediglich in Transportrichtung erhält man ein Kontinuum, so daß man von eindimensionalen Leitfähigkeitskanälen reden kann. Aufgrund dieser Tatsachen kann man einen Punktkontakt auch beschreiben als eine lateral stark eingegengte Resonante Tunneldiode (mit infinitesimal dicken Barrieren) mit einem (quasi-)kontinuierlichen Spektrum in Transportrichtung (große Topfdicke). Ausgangspunkt

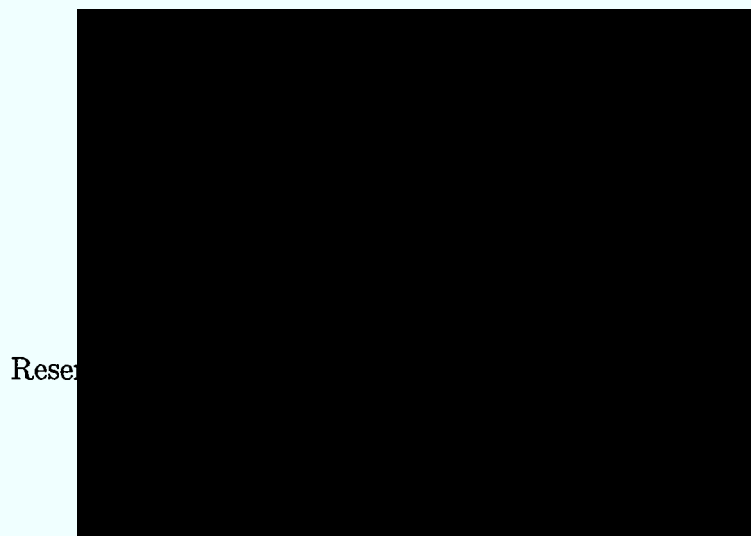


Abbildung 3.20: Geometrie eines Punktkontakts

der Berechnung von Punktkontaktkennlinien mit Spin-Split ist der Hamiltonoperator

(Gleichung (2.23))

$$H = \left(E_z^{\text{sub}} - \frac{\hbar^2}{2m^*} \vec{\nabla}_{||}^2 + \phi(\vec{r}_{||}) \right) \cdot \mathbf{1} - i\vec{\alpha} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}) \quad (3.5)$$

Ohne Potential sind die Eigenfunktionen ebene Wellen und die Eigenwerte gegeben durch ($E_z^{\text{sub}} = 0$)

$$E = \frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m^*} \pm |\vec{\alpha}| k_{||} \quad (3.6)$$

Zu jedem Energieeigenwert und festem k_x (Transportrichtung) gehören vier verschiedene Eigenfunktionen, die sich im Spin und in k_y unterscheiden. Führt man eine (weitere) Quantisierung der Energiewerte in y -Richtung ein, indem man z.B. mit Gates die Struktur quasi-eindimensional macht, so gelangt man zu einem Punktkontakt. Der Einfachheit wegen nehmen wir hier einen unendlich hohen Potentialtopf an. Die Randbedingungen verlangen dann das Verschwinden der Wellenfunktion an den Rändern des Potentialtopfs. Die korrekte Wellenfunktion muß man hierbei durch richtige Überlagerung der vier verschiedenen Lösungen des freien Problems erzeugen, um die Randbedingungen zu erfüllen. Nullsetzen der Koeffizientendeterminante liefert dann die zulässigen Eigenwerte für E_y , die, aufgrund von Zeitumkehrsymmetrie, weiterhin zweifach entartet bleiben. Eine numerische Suche der Nullstellen hat deshalb nur in Form einer Aufsuche der Minima (Maxima, je nach Vorzeichen) der Koeffizientendeterminante Erfolg.

Bei Punktkontakten kann man unterscheiden zwischen „kurzen“ und „langen“ Kontakten. Ein Punktkontakt ist kurz, wenn $\frac{\Gamma L_{Pk}}{\hbar v_f} \ll 1$ ist und lang, wenn dies nicht der Fall ist. L_{Pk} ist die physikalische Ausdehnung des Punktkontaktes in Transportrichtung. $\frac{\Gamma}{\hbar}$ steht hier für eine typische Streurrate eines Zustandes im Punktkontakt. v_f steht für eine typische Transportgeschwindigkeit an der Fermienergie im Punktkontakt. Die Bedingung sagt aus, daß für kurze Punktkontakte die Zeit, in der der Punktkontakt durchlaufen wird, kleiner ist, als die Zeit, in der eine Streuung wahrscheinlich ist, so daß man eine schwache Streustärkenäherung durchführen darf. Der Transmissionskoeffizient eines Kanals oberhalb der Kante des Kanals ist 1 ohne Streuung. Eine Möglichkeit, Streuung für kurze Kontakte einzubeziehen, lautet

$$T(E_z, j) = 1 - R(k_i > 0, j) \quad (3.7)$$

mit dem Reflektionskoeffizienten

$$R(k_i > 0, j) = \frac{L_{Pk}}{v_i} \sum_{k_f < 0, j'} w_{k_i, j \rightarrow k_f, j'} \quad (3.8)$$

In $w_{k_i, j \rightarrow k_f, j'}$ kann man dann auch nur die niedrigste Ordnung berücksichtigen. In Abbildung (3.21) ist ein mit dieser Formel berechneter Reflexionskoeffizient über die unterschiedliche Lage einer typischen Grenzflächenrauhigkeitsinsel von 1 Monolage Höhe dargestellt (Daten für InGaAs/InP). Die X-Achse gibt die Lage des Zentrums der Insel in Einheiten der Breite des Punktkontaktes an. Obwohl eine merkliche Abhängigkeit von der konkreten Lage der Insel besteht, ist der Gesamteffekt nicht besonders groß.

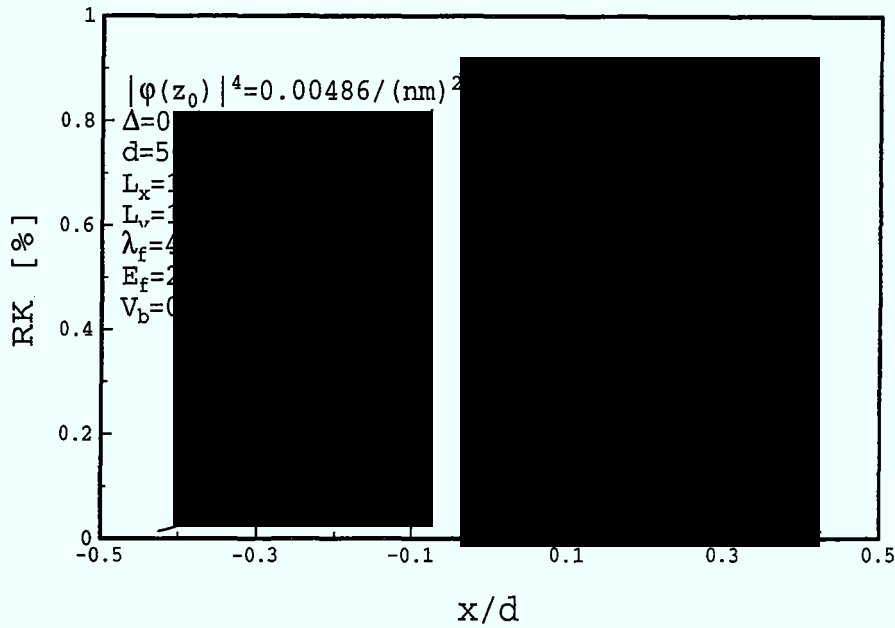


Abbildung 3.21: Reflektionskoeff. in einem Punktkontakt, verursacht durch unterschiedliche Lagen einer Rauheitsinsel

Bei kleinen Punktkontaktbreiten handelt es sich um echte eindimensionale Leitfähigkeitskanäle. Hier spielt in niedrigster Ordnung in dem Übergangsmatrixelement nur die Rückstreuung innerhalb eines Kanals eine entscheidende Rolle (der Wellenvektorsübertrag ist sonst zu groß), und hier auch nur, wenn k_i nicht selbst zu groß ist, d.h. die Unterkante des Kanals gerade am Fermi-niveau liegt, da sonst ebenfalls der Übertrag ($= 2k_i$) zu groß wird. Nur Streupotentiale, die auch für große q -Werte Fourierkoeffizienten von merklicher Größe haben, führen auch in diesem Fall noch zu einer Streuung (Dies kann z.B. für Legierungsstreuung gelten). Hierdurch kann dann die Leitfähigkeitskurve auch in den Bereichen, in denen kein Kanal nahe am Fermi-niveau liegt, merklich von der Kurve ohne Streueignisse abweichen. Deshalb wird man an zweidimensionalen Elektronengasen, deren Topfmaterial aus einer Legierung besteht und in der tatsächlich Legierungsstreuung der beweglichkeitslimitierende Faktor bei tiefen Temperaturen ist, vermutlich niemals „vernünftige“ Punktkontakt-kennlinien (d.h. mit wohlausgeprägten Stufen) messen können.

Ohne Streuung leitet man leicht folgende Formel für den Strom her ($T = 0K$)

$$I = \frac{e}{h} \sum_j \int_{\max\{E_f - eV, E_{Kante j}\}}^{E_f} dk_x \frac{\partial E_{sub}^j}{\partial k_x}$$



Abbildung 3.22: Berechnete Kennlinie eines Punktkontakts mit $\alpha = 1 \cdot 10^{-11} \text{ eVm}$, $m = 0.035m_e$, $E_f = 35 \text{ meV}$, $\Gamma_0 = 1 \text{ meV}$

$$= \frac{e}{h} \sum_j \int_{\max\{E_f - eV, E_{Kante j}\}}^{E_f} dE \quad (3.9)$$

$$= \frac{e^2}{h} \left(n_{comp} V + \sum_j \frac{E_f - E_{Kante j}}{e} \right) \quad (3.10)$$

n_{comp} gibt hier die Anzahl der Subbänder mit $E_{Edge} < E_f - eV$ an, während die verbliebene Summe sich über alle die Subbänder erstreckt, deren Kantenenergie im Intervall $[E_f - eV, E_f]$ liegt. In der Formel taucht wieder die fundamentale Einheit $\frac{e^2}{h}$ auf. Eindimensionale Leitfähigkeitskanäle haben die angenehme Eigenschaft, daß die Dispersionsbeziehung in Transportrichtung für den Leitwert keine Rolle spielt (solange die Dispersionsbeziehung im interessierenden Bereich monoton in k_x ist). Eine einfache Möglichkeit, Streuprozesse einzuschließen, macht Gebrauch von der Analogie des Punktkontaktes zu einer Resonanten Tunneldiode wie im einleitenden Abschnitt erwähnt. Der Unterschied ist hier nur, daß das Spektrum des Punktkontaktes in Transportrichtung quasikontinuierlich ist (großer Topf). Die Kopplung ist schwach, da die Emitterzustände zweidimensional sind, also nur ein kleiner Überlapp mit den eindimensionalen Zuständen des Kanals der Punktkontakte besteht. Streuprozesse kann man

(innerhalb einer schwachen Streustärkenäherung) durch Falten des Transmissionskoeffizienten ohne Streuung (näherungsweise 1) mit einer normierten Lorentzkurve, deren Halbwertsbreite der Streurate entspricht, einbeziehen (hierdurch wird nur die Halbwertsbreite der spektralen Dichte des Zustandes um den Streubeitrag vergrößert, die kleine Verschiebung der Energie aufgrund des Realteils der Selbstenergie vernachlässigen wir). Der Einfachheit halber nehmen wir an, daß die Streurate innerhalb eines Kanals unabhängig von der Energie ist (der Einfluß der Streuung zeigt sich innerhalb dieser Näherung ohnehin nur, wenn die Kante des Kanals nahe dem Ferminiveau liegt, wo dann auch nur Zustände mit kleinen Energien in Transportrichtung wichtig sind, deren Partialbreiten man dann auch als gleich ansehen kann). Hiermit wird in diesem einfachen Modell der Transmissionskoeffizient des j -ten Kanals zu

$$T(E_z, j_{||}) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{E_z - E_{j0}}{\Gamma_j} \right) \quad (3.11)$$

Die Stromformel ($T = 0K$) geht dann über in

$$\begin{aligned} I = & \frac{e^2}{h} \sum_j \left(\frac{1}{2} V + \frac{E_f - E_{Kante j}}{e\pi} \arctan \left(\frac{E_f - E_{Kante j}}{\Gamma_j} \right) \right. \\ & - \frac{E_f - E_{Kante j} - eV}{e\pi} \arctan \left(\frac{E_f - E_{Kante j} - eV}{\Gamma_j} \right) \\ & \left. - \frac{\Gamma_j}{2\pi} \ln \left| \frac{\Gamma_j^2 + (E_f - E_{Kante j})^2}{\Gamma_j^2 + (E_f - E_{Kante j} - eV)^2} \right| \right) \end{aligned} \quad (3.12)$$

$\frac{\Gamma_j}{h}$ steht hier für die Streurate an der Kante im j -ten Subband. Genähert kann man alle Streuraten als gleich ansetzen, obwohl diese sicher zu größeren Punktkontaktbreiten, aufgrund des Übergangs zum Zweidimensionalen, steigt. Eine Kennlinie mit $\Gamma = 1meV$ ist in Abbildung (3.22) dargestellt. Man erkennt an den leichten Wellen in der Abbildung (3.22) die Zwischenstufen, die bei einem Punktkontakt ohne Spin-Bahn-Wechselwirkung nicht auftreten. Wird die Streurate reduziert, treten diese Stufen klar zu Tage, genau wie bei noch größeren Werten für α . Effekte der endlichen Temperatur kann man einschließen, indem man

$$\begin{aligned} I &= \frac{e}{h} \sum_j \int_0^\infty dk_x (f_L(E) - f_R(E)) \frac{\partial E_{sub}^j}{\partial k_x} T(E_x, j) \\ &= \frac{e}{h} \sum_j \int_0^\infty dE_x (f_L(E) - f_R(E)) T(E_x, j) \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$= \frac{e}{h} \sum_j \int_0^\infty dE_x \left(-\frac{\partial f_L(E)}{\partial E} + \frac{\partial f_R(E)}{\partial E} \right) \int_0^{E_x} dE'_x T(E'_x, j) \quad (3.14)$$

mit dem obigen Transmissionskoeffizienten verwendet. Insbesondere läßt sich so sehr einfach eine Tieftemperaturnäherung für die Ableitung der Fermiverteilung verwenden:

$$-\frac{\partial f(E)}{\partial E} = \delta(E - E_f) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{\partial^2}{\partial E^2} \delta(E - E_f) + \dots \quad (3.15)$$

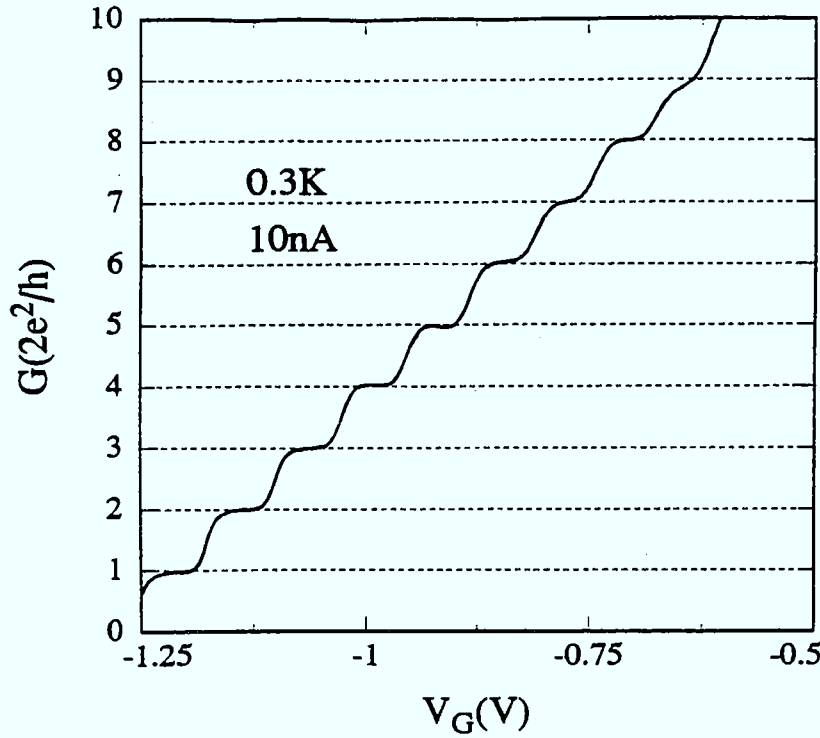


Abbildung 3.23: experimentelle Punktkontaktkennlinie in einem GaAs/AlGaAs zweidimensionalen Elektronengas[109]

Hiermit folgt

$$\begin{aligned}
 & I(V, T) - I(V, 0) \\
 & \approx \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \frac{d^2 I(V, 0)}{(dE_f)^2} \\
 & = \sum_j \frac{e\pi^2}{6h} (kT)^2 \left(\frac{\frac{\Gamma_j}{\pi}}{(E_f - E_{Kantej})^2 + \Gamma_j^2} - \frac{\frac{\Gamma_j}{\pi}}{(E_f - E_{Kantej} - eV)^2 + \Gamma_j^2} \right) \\
 & = \frac{e^2}{h} V \sum_j \frac{\pi\Gamma_j}{6} (kT)^2 \frac{2(E_{Kantej} - E_f) + eV}{((E_f - E_{Kantej})^2 + \Gamma_j^2)((E_f - E_{Kantej} - eV)^2 + \Gamma_j^2)} \quad (3.16) \\
 & \approx \frac{e^2}{h} V \sum_j \frac{\pi\Gamma_j}{3} (kT)^2 \frac{E_{Kantej} - E_f}{((E_f - E_{Kantej})^2 + \Gamma_j^2)^2} \quad (3.17)
 \end{aligned}$$

Die letzte Näherung ist gut, falls $eV \ll \Gamma_j$. Ein Aufheizen der Probe führt folglich als erstes zu einer Veränderung der Kennlinie in den Bereichen, in denen eine Kanalkante nahe dem Fermi-niveau liegt, und zwar wird der Strom verkleinert, falls E_{Kantej} unter dem Fermi-niveau liegt (größere Punktkontaktbreite) und vergrößert, wenn E_{Kantej}



Abbildung 3.24: Berechnete Kennlinie eines Punktkontakts mit $\alpha = 1 \cdot 10^{-12} \text{eVm}$, $\Gamma_0 = 0.5 \text{meV}$

über dem Fermi-niveau liegt (kleinere Punktkontaktbreite). Dies führt insgesamt zu einer Einebnung der Kennlinie in Richtung einer Geraden für höhere Temperaturen, so daß die typische Punktkontaktcharakteristik mit wachsender Temperatur verschwindet, wie dies auch experimentell zu beobachten ist. Experimentell liegen noch keine Kurven von Punktkontakten auf einem Materialsystem mit ausreichend großer Spin-Bahnkopplung vor, die nicht durch zu große Streuphänomene /Kontaktierungsprobleme beeinträchtigt wären[104]. Der Theorie nach müßte man die Zwischenstufen auf InGaAs/InP, aber noch mehr auf Schichten mit Sb, sehen können. Abschließend sei noch eine simulierte Kurve für einen reduzierte Spin-Bahn-Wechselwirkung wie in Al-GaAs/GaAs gezeigt. Hier gibt es auch bei einer halb so groß angenommenen Streurrate von 0.5meV keine Zwischenstufen zu sehen, da die Spin-Bahn-Wechselwirkung viel kleiner ist.

3.6 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde eine verbesserte Herleitung der Envelope Function Approximation dargestellt. Mit ihr ist man in der Lage, Transportsimulationen in Halbleiter-Heterostrukturen unter Einschluß von Streuprozessen mit einem verträglichen Aufwand durchzuführen. Mit dieser neuen Herleitung tauchen verschiedene neue Kopplungsparameter auf. Einer beschreibt eine Spin-Bahnwechselwirkung mit einem Anteil, der nur in Heterostrukturen auftreten kann (der Grenzflächenterm des Rashba-Kopplungskoeffizienten), ein weiterer eine Kopplung zwischen verschiedenen Extrema in der Bandstruktur, die ebenfalls nur in Heterostrukturen existiert.

Im Anschluß an die Herleitung der Envelope Function Approximation haben wir eine allgemeine Theorie des Stromtransports in Heterostrukturen dargestellt, die im Prinzip auf der S-Matrix beruht. Bei dem Versuch, die Vorhersagen der Theorie an AlAs in GaAs Einfachbarrieren zu überprüfen, fanden wir zwar die vorhergesagte effektive Masse im Barrierenmaterial (die von der Bandkantenmasse deutlich abweicht), eine Überprüfung der Intervalley-Kopplungskonstante war aber nicht möglich, da ein anderer Prozess in unseren Barrieren zu noch größeren thermischen Strömen führte. Dieser Prozess wurde als Tunneln durch Störstellen identifiziert, die energetisch unterhalb der X-Bandkante des AlAs liegen. Auf der anderen Seite fanden wir eine ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen den angefitteten Werten für die Rauigkeit der Grenzflächen der Einfachbarrieren, und den aus Messungen an ähnlichen Schichten bekannten Werten hierfür. Der Einfluß von Grenzflächenrauigkeit im vertikalen Transport in Heterostrukturen hat sich im Rahmen dieser Arbeit als bisher unterschätzt herausgestellt. Dies hat sich auch in Simulationen zum Transport in AlAs/InGaAs/GaAs Resonanten Tunnelndioden herausgestellt, wo eine der charakteristischen Kenngrößen, das Peak-to-Valley-Verhältnis, für kleine Barrierendicken fast nur durch Grenzflächenrauigkeit determiniert ist.

In einem weiteren Abschnitt dieser Arbeit wurden berechnete und gemessene Werte für den Spin-Bahn-Wechselwirkungsterm verglichen und eine ausgezeichnete Übereinstimmung festgestellt. Gleichzeitig war es möglich, mit den in dieser Arbeit aus der Kuboformel hergeleiteten Formeln für die Leitfähigkeit den Shubnikov-de Haas- und den Quanten-Hall-Effekt unter Einschluß der Spin-Bahn-Wechselwirkung zu erklären. Der Vergleich mit dem Experiment zeigt eine gute Übereinstimmung in den wesentlichen Charakteristika, wobei gewisse Abweichungen sich leicht anhand der gemachten starken Näherungen erklären. Abschließend haben wir noch Kennlinien von Punktkontakten unter Einschluß der Spin-Bahn-Wechselwirkung berechnet und gefunden, daß man den Spin-Split auch in Punktkontakten in einigen Heterostrukturen sehen können sollte.

Literaturverzeichnis

- [1] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Editions de Physique (Les Ulis, France, 1988) G. Bastard Phys. Rev. B **24**, 5693 (1981); **25**, 7584 (1982)
- [2] T. Ando, S. Wakahara and H. Akera, Phys. Rev. B **17**, 11609 (1989)
- [3] M. Altarelli in *Interfaces, Quantum Wells and Superlattices*, Plenum Press (New York, 1988)
- [4] R. Morrow and K. R. Brownstein, Phys. Rev. B **30**, 678 (1983)
- [5] Landoldt-Börnstein Tables, edited by O. Madelung, M. Schulz and H. Weiss (Springer, Berlin, 1982), Vol. **17a, 22a**
- [6] Baldereschi, E. Hess, K. Maschke, H. Neumann and K. R. Schulze, J. Phys. C: Solid State Phys. **10**, 4709 (1977)
- [7] die Skalarprodukte sind mithilfe von ab initio Pseudopotentialen von Dipl. Phys. P. Richard (IFF im Forschungszentrum Jülich) berechnet worden
- [8] D. Bimberg, F. Heinrichsdorff, R. K. Bauer, D. Gerthsen, D. Stenkamp, D. E. Mars and J. N. Miller, J. Vac. Sci. Technol. B **10**, 1793 (1992)
- [9] C. A. Warwick und R. F. Kopf, Appl. Phys. Lett. **60** (3), 386 (1992)
- [10] A. Förster, J. Lange, D. Gerthsen, Ch. Dieker und H. Lüth, J. Phys. D: Appl. Phys. **27**, 175 (1994)
- [11] U. Klemradt, Dissertation, RWTH Aachen 1994, jetzt Berichte des Forschungszentrums Jülich 2894 (1994)
- [12] M. Funke Diplomarbeit, RWTH Aachen 1995 (unveröffentlicht)
- [13] J. Krug und H. Spohn in *Solids Far From Equilibrium: Growth, Morphology and Defects*, Kap. 6 Hrsg. C. Godreche, Cambridge University Press (1991)
- [14] B. Orschel, G. Oelgart und R. Hudre, Appl. Phys. Lett. **62**, 843 (1993)
- [15] J. M. Luttinger und W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955)

- [16] G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 5693 (1981)
- [17] Q. G. Zhu und H. Krömer, Phys. Rev. B **27**, 3519 (1983)
- [18] U. Rössler Solid State Communications **49** (10), 943 (1984) F. Malcher, G. Lommer und U. Rössler, Superlattices and Microstructure **2** (3), 267 (1986)
- [19] Gernot Engels, priv. Mitteilung
- [20] Yu. A. Bychkov und E. I. Rashba, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **39**, 66 (1984) E.I. Rashba Fizika Tvergodo Tela **2** (6), 1224 (1960)
- [21] A. Foerster, J. Lange, D. Gerthsen, Ch. Dieker und H. Lüth, J. Vac. Sci. Technol. B **11**, 1743 (1993)
- [22] G. Engels, J. Lange, Th. Schäpers und H. Lüth Veröffentlichung in Vorbereitung
- [23] E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca und F. Bassani, Phys. Rev. B **50**, 8523 (1994)
- [24] J. N. Schulman und Y.-C. Chang, Phys. Rev. B **31**, 2056 (1985)
- [25] R. Beresford, L. F. Luo, W. I. Wang und E. E. Mendez, Appl. Phys. Lett. **55** (15), 1555 (1989)
- [26] H. C. Liu, Appl. Phys. Lett. **51** (13), 1019 (1987)
- [27] J. B. Xia, Phys. Rev. B **41**, 3117 (1989)
- [28] J. P. Sun, R. K. Mains, K. Yang und G. I. Haddad, J. Appl. Phys. **74** (8), 5053 (1993)
- [29] T. Ando und H. Akera, in *Proceedings of the Nineteenth International Conference on the Physics of Semiconductors*, edited by W. Zawadzki (Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw, 1988) p.603
- [30] A. Messiah Quantenmechanik Bd.1+2, Walter de Gruyter Berlin und New York 1985
- [31] D.K. Ferry, Semiconductors, Macmillan Publishing Company, New York 1991
- [32] S. Großmann Funktionalanalysis, Aula-Verlag, Wiesbaden 1988
- [33] H. Heuser Funktionalanalysis B.G. Teubner, Stuttgart 1986
- [34] T. Schmidt, M. Terwordt, R.J. Haug, K.v. Klitzing, B. Schönherr, P. Grambow, A. Förster und H. Lüth submitted to Phys. Rev. B (1995)
- [35] J. Lange, Diplomarbeit RWTH Aachen 1993

- [36] W. Jones und N.H. March, Theoretical Solid State Physics Bd. 2, Wiley-Interscience, 1973
- [37] M. Shinohara, M. Tanimoto, H. Yokoyama und N. Inoue, Appl. Phys. Lett. **65** (11), 1418 (1994)
- [38] E. Merzbacher Quantum Mechanics, John Wiley New York 1970
- [39] W. Weber, Dissertation RWTH Aachen 1992 jetzt Bericht des Forschungszentrums Jülich 2603
- [40] D.G. Stearns, J. Appl. Phys. **71**, 4286 (1992)
- [41] K.M. Indlekofer, J. Lange, A. Förster und H. Lüth, Phys. Rev. B **53**, 7392 (1996)
- [42] C. Niu, L. Liu und T. Lin, Phys. Rev. B **51**, 5130 (1995)
- [43] G.D. Mahan Many Particle Physics, Plenum Press New York und London 1990
- [44] E. Fick und G. Sauermann Quantenstatistik dynamischer Prozesse Bde. 1+2, Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt 1986
- [45] L. Smrcka und P. Streda, J. Phys. C **10**, 2153 (1977)
- [46] K. v. Klitzing, G. Dorda und M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980)
- [47] A. Isihara und L. Smrcka, J. Phys. C **19**, 6777 (1986)
- [48] E.N. Adams und T.D. Hollstein J. Phys. Chem. Solids **10**, 254 (1959)
- [49] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **37**, 1233 (1974)
- [50] T. Ando, Y. Matsumoto und Y. Uemura, J. Phys. Soc. Jpn. **39**, 279 (1975)
- [51] M. Büttiker, Phys. Rev. B **38**, 9375 (1988)
- [52] P.T. Coleridge, R. Stoner und R. Fletcher, Phys. Rev. B, 1120 (1989)
- [53] J.P. Harrang, R.J. Higgins, R.K. Goodall, P.R. Jay, M. Laviro und P. Delescluse Phys. Rev. B **32**, 8126 (1985)
- [54] S. Das Sarma und F. Stern, Phys. Rev. B **32**, 8442 (1985)
- [55] Th. Klocke, Diplomarbeit RWTH Aachen 1993
- [56] C.S. Kyono, V.P. Kesan, D.P. Neikirk, C.M. Mazier und B.G. Streetman, Appl. Phys. Lett. **54**, 549 (1989)
- [57] M. Rossmannith, K. Syassen, E. Böckenhoff, K. Ploog und K.v.Klitzing Phys. Rev. B **44**, 3168 (1991)

- [58] P.M. Solomon, S. L. Wright und C. Lanza, *Superlattices and Microstructures* **2** (6), 521 (1986)
- [59] I. Hase, H. Kawai, K. Kaneko und N. Watanabe, *J. Appl. Phys.* **59**, 3792 (1986)
- [60] M.-H. Meynadier, R.E. Nahory, J.M. Worlock, M.C. Tamargo, J.L. de Miguel und M.D. Sturge, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1338 (1988)
- [61] P.J. Price, *Surface Science* **196**, 394 (1988)
- [62] P.A. Schulz und C.E.T. Goncalves da Silva, *Phys. Rev. B* **35**, 8126 (1987)
- [63] D.R. Miller und D.P. Neikirk, *Appl. Phys. Lett.* **58**, 2803 (1991)
- [64] A.C. Marsh, *Semicon. Sci. Technol.* **1**, 320 (1986) A.C. Marsh, *Journal of Quantum Electronics* **23**, 371 (1987)
- [65] T. Ando, S. Wakahara und H. Akera, *Phys. Rev. B* **40**, 11609 (1989)
- [66] T. Ando und H. Akera, *Phys. Rev. B* **40**, 11619 (1989)
- [67] T. Ando, *Phys. Rev. B* **47**, 9621 (1993)
- [68] M. Rossmanith, K. Syassen, E. Böckenhoff, K. Ploog und K. Klitzing, *Phys. Rev. B* **44**, 3168 (1991)
- [69] T.J. Drummond und I.J. Fritz, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 284 (1985)
- [70] T.-H. Shieh und S.-C. Lee, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 3350 (1993)
- [71] J. Batey und S.L. Wright, *J. Appl. Phys.* **59**, 200 (1986)
- [72] S.S. Lu, C.C. Meng, F. Wolliamson und M.I. Nathan, *J. Appl. Phys.* **69**, 8241 (1991)
- [73] H. Ohno und E.E. Mendez, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 1793 (1990)
- [74] A. Leuther, Dissertation RWTH Aachen 1996
- [75] P.M. Mooney, *J. Appl. Phys.* **67**, R1 (1990)
- [76] S.K. Kirby, D.Z.-Y. Ting und T.C. McGill, *Phys. Rev. B* **48**, 15237 (1993)
- [77] H.A. Fertig, S. He und S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **41**, 3596 (1990)
- [78] T.H. Shieh und S.-C. Lee, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 654 (1993)
- [79] E.E. Mendez, W.I. Wang, E. Calleja und C.E.T. Goncalves da Silva, *Appl. Phys. Lett.* **50**, 1263 (1987)
- [80] B. Rudberg, *Semicon. Sci. Technol.* **5**, 600 (1990)

- [81] F. Chevoir und B. Vinter, *Phys. Rev. B*, **47**, 7260 (1993)
- [82] P. Johansson *Phys. Rev. B* **46**, 12865 (1992)
- [83] P. Johansson *Phys. Rev. B* **48**, 8938 (1993)
- [84] J. Leo und A.H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 817 (1990)
- [85] H. Brugger, U. Meiners, R. Diniz, T. Suski, E. Gornik, A. Förster und H. Lüth, Abstract for the 6th Int. Conf. on Modulated Semic. Structures, Garmisch-Partenkirchen, August 23-27, 1993 idem. *Solid State Electronics* **37**, 801 (1994)
- [86] S.M. Goodnick und J.E. Lary, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B109 (1992)
- [87] M.C. Tatham und J.F. Ryan, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B102 (1992)
- [88] O. Al-Dossary, M. Babiker und N.C. Constantinou, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B91 (1992)
- [89] H. Gerecke und F. Bechstedt, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B80 (1992)
- [90] P. Chamberlain, D. Hoare, R.W. Kelsall und R.A. Abram, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B45 (1992)
- [91] E. Molinari, C. Bungaro, M. Gulia, P. Lugli und H. Rucker, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B67 (1992)
- [92] P. Lugli, E. Molinari und H. Rucker, *Superlattices and Microstructure* **10**, 471 (1991)
- [93] T. Tsuchiya und T. Ando, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B73 (1992)
- [94] S. Das Sarma, V.B. Campos, M.A. Strosio und K.W. Kim, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B60 (1992)
- [95] B.K. Ridley und N.C. Constantinou, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B94 (1992)
- [96] M. Babiker, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B52 (1992)
- [97] H. Ruecker, P. Lugli, S.M. Goodnick und J.E. Lary, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B98 (1992)
- [98] P. Lugli, P. Bordone, E. Molinari, H. Rucker, A.M. de Paula, A.C. Maciel, J.F. Ryan und M. Shayegan, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B116 (1992)
- [99] N. Mori, K. Taniguchi und C. Hamaguchi, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B83 (1992)
- [100] J.K. Jain und S. Das Sarma, *Surface Science* **196**, 466 (1988)
- [101] K.W. Kim, M.A. Littlejohn, M.A. Strosio und G.J. Iafrate, *Semicon. Sci. Technol.* **7**, B49 (1992)

- [102] E.E. Mendez, E. Calleja und W.I. Wang, Phys. Rev. B **34**, 6026 (1986)
- [103] R. Diniz, J. Smoliner, E. Gornik, U. Meiners, H. Brugger, P. Wisniewski und T. Suski, Semicon. Sci. Technol. (1993)
- [104] G. Engels, Dissertation RWTH Aachen 1996
- [105] V.J. Goldman, D.C. Tsui und J.E. Cunningham, Phys. Rev. B **35**, 9387 (1986)
- [106] L. Eaves, E.S. Alves, T.J. Foster, M. Henini, O.H. Hughes, M.L. Leadbeater, F.W. Sheard, G.A. Toombs, K. Chan, A. Celeste, J.C. Portal, G. Hill und M.A. Pate, Physics and Technology of Submicron Structures, 74 Springer Berlin/Heidelberg 1988
- [107] V.J. Goldman, D.C. Tsui und J.E. Cunningham, Phys. Rev. B **36**, 7635 (1987)
- [108] J.H. Smet, C.G. Fonstad und Q. Hu, Appl. Phys. Lett. **63**, 2225 (1993)
- [109] Th. Schäpers, Dissertation RWTH Aachen Bericht des Forschungszentrums Jülich 2712 1993
- [110] I.S. Gradstein und I.M. Rhyzik Tafeln Bde 1+2, Verlag Harri Deutsch, Thun und Frankfurt 1981
- [111] M. Abramowitz und I. Stegun Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications New York 1964
- [112] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky und W.T. Vetterling, Numerical Recipes in Pascal, Cambridge University Press 1989
- [113] L.D. Landau und E.M. Lifschitz, Lehrbuch der theoretischen Physik Bd. 3-5,8-10, Akademie-Verlag Berlin
- [114] H. Haken, Quantenfeldtheorie des Festkörpers, B.G. Teubner Stuttgart 1973
- [115] W. Brenig Statistische Theorie der Wärme, Springer Berlin 1992

Danksagung

Mein herzlicher Dank gilt:

Herrn Prof. Dr. Lüth für die Möglichkeit, am Institut für Schicht- und Ionentechnik der KFA Jülich diese Arbeit anzufertigen

Herrn Dr. Th. Schäpers für die Durchsicht dieser Arbeit

Herrn Dr. A. Förster für die Betreuung

Herrn Dipl. Phys. G. Engels, Herrn Dipl. Phys. J. Kaufmann und Herrn Dipl. Phys. Th. Klocke für die freundschaftliche Zusammenarbeit und gegenseitige Hilfe

Herrn Ch. Krause und Herrn Dipl. Phys. M. Hollfelder für die Herstellung der MBE bzw. MOCVD-Schichten

Herrn Dipl. Ing. F.J. Schroeteler und Frau A. Pracht für die Unterstützung im Reinraum und Herrn Zillikens für die Metallisierungen

allen anderen Mitarbeitern für die freundliche Zusammenarbeit;

allen meinen Freunden, die mich und meine Launen in der Zeit, in der ich diese Arbeit angefertigt habe, ertragen haben

Jül-3291
Oktober 1996
ISSN 0944-2952