

INHALTSVERZEICHNIS

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

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

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

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

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