

Nanoskopische Physik: Theorie und Experiment

Vortrag Halbleiter

Stefan Kölling

29.Juli 2005

Inhalt

- Wiederholung: Greens-Funktionen
- Bandstruktur im Tight-Binding-Modell
- Störstellenniveaus
- Oberflächenniveaus

Wiederholung: Greens-Funktionen

- Definition:

$$(E-H)G(E)=1 \text{ bzw. } (E - H(\vec{r}))G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$$

- Formal:

$$G(E) = \frac{1}{E-H} = \sum_n \frac{1}{E-H} |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n| = \sum_n \frac{|\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|}{E-E_n} = \sum_n \frac{|\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|}{E-E_n} + \int dn \frac{|\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|}{E-E_n}$$

$$\text{bzw. } G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \sum_n \frac{\Phi_n(\vec{r})\Phi_n^*(\vec{r}')}{E-E_n} + \int dn \frac{\Phi_n(\vec{r})\Phi_n^*(\vec{r}')}{E-E_n}$$

- $E_n \in \mathbb{R} \Rightarrow G(E)$ analytische Funktion
- An den Stellen der diskreten Eigenwerte hat $G(E)$ einen einfachen Pol
- Sonst definiere $G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \lim_{s \rightarrow 0} G(\vec{r}, \vec{r}'; E \pm is)$

Wiederholung: Greens-Funktionen

- $\lim_{y \rightarrow 0} \int dx \frac{1}{x \pm iy} = P \int dx \frac{1}{x} \mp i\pi \int dx \delta(x)$
- $\Rightarrow G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; E) = P \sum_n \frac{\Phi_n(\vec{r}) \Phi_n^*(\vec{r}')}{E - E_n} \mp i\pi \sum_n \delta(E - E_n) \Phi_n(\vec{r}) \Phi_n^*(\vec{r}')$
- Mit $\rho(\vec{r}; E) = \sum_n \delta(E - E_n) \Phi_n(\vec{r}) \Phi_n^*(\vec{r})$ die Zustandsdichte pro Volumen
- $N(E) = \int dr \rho(\vec{r}; E)$ die Zustandsdichte.
- Es gilt also $\rho(\vec{r}; E) = \mp \frac{1}{\pi} \Im(G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}; E))$
- $G^*(\vec{r}, \vec{r}'; E) = G(\vec{r}', \vec{r}; E)$; $G^a(\vec{r}, \vec{r}'; E) = [G^r(\vec{r}', \vec{r}; E)]^*$
- $\tilde{G}(\vec{r}, \vec{r}'; E) := G^r(\vec{r}, \vec{r}'; E) - G^a(\vec{r}, \vec{r}'; E) = -2\pi i \sum_n \Phi_n(\vec{r}) \Phi_n^*(\vec{r}') \delta(E - E_n)$
- $G(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \sum_n \frac{\Phi_n(\vec{r}) \Phi_n^*(\vec{r}')}{E - E_n} = \frac{i}{2\pi} \int d\epsilon \frac{\tilde{G}(\vec{r}, \vec{r}'; \epsilon)}{E - \epsilon}$

Wiederholung: Greens-Funktionen

- Für nichtentartete Zustände gilt:

$$\text{Res}(G(\vec{r}, \vec{r}'; E_n)) = \Phi_n(\vec{r})\Phi_n^*(\vec{r}')$$

- $|\Phi_n(\vec{r})| = \text{Res}(G(\vec{r}, \vec{r}; E_n))^{\frac{1}{2}}$

- Ist $G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$ bekannt so kann das inhomogene Problem $[E - H(\vec{r})]\Psi(\vec{r}) = f(\vec{r})$ gelöst werden durch

1. $\Psi(\vec{r}) = \int G(\vec{r}, \vec{r}'; E)f(\vec{r}')dr'$; falls $E \notin \{E_n\}$

2. $\Psi(\vec{r}) = \int G^{r,a}(\vec{r}, \vec{r}'; E)f(\vec{r}')dr' + \Phi(\vec{r})$; falls $E \in \{E_n\}$

Wiederholung: Greens-Funktionen

- Ist $H = H_0 + H_1$, so gilt $G_0(E) = (E - H_0)^{-1}$ und $G(E) = (E - H)^{-1}$.
- $G(E) = (E - H_0 - H_1)^{-1} = [(E - H_0)(1 - (E - H_0)^{-1}H_1)]^{-1} = [1 - (E - H_0)^{-1}H_1]^{-1}(E - H_0)^{-1} = [1 - G_0(E)H_1]^{-1}G_0(E)$
- $(1 - x)^{-1} = 1 + x + x^2 + \dots$
- $G = G_0 + G_0H_1G_0 + G_0H_1G_0H_1G_0 + \dots = G_0 + G_0H_1G$

$$\begin{array}{ccccccc}
 \mathbf{G} & & \mathbf{G_0} & & \mathbf{G_0H_1G_0} & & \mathbf{G_0H_1G_0H_1G_0} \\
 \underline{\underline{\quad}} & = & \underline{\quad} & + & \underline{\quad} & + & \underline{\quad} \\
 & & & & | & & | \quad | \\
 & & & & \mathbf{G_0} & & \mathbf{G_0} \quad \mathbf{H_1} \quad \mathbf{G_0}
 \end{array}$$
- T-Matrix $T(E)G_0(E) = H_1G(E)$
- $\Rightarrow G(E) = G_0(E) + G_0(E)T(E)G_0(E)$

Bandstruktur im Tight-Binding-Modell

- Betrachte $H = \sum_l |l\rangle \epsilon_l \langle l| + \sum_{l,m} |l\rangle V_{lm} \langle m|$, wobei $|l\rangle$ ein atomähnliches Orbital ist.
- **Satz von Bloch:** periodisches Potential $U(\vec{r} + \vec{R}) = U(\vec{r})$ für alle Gittervektoren \vec{R} des Bravaisgitters:

$$\Psi_{nk}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{nk}(\vec{r}), \quad u_{nk}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{nk}(\vec{r})$$

mit n dem Bandindex.

- Wannier-Funktionen: $w_n(r - l) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikl} \Psi_{nk}(r)$.
- Bilden vollständigen Satz.
- Annahme: schwache WW zwischen Bändern
- Es gilt dann $\langle l|H|m\rangle = \epsilon_l \delta_{lm} + V_{lm}$

Bandstruktur im Tight-Binding-Modell

- Translationsinvarianz $\Rightarrow \epsilon_l = \epsilon_0$ und $V_{lm} = V_{l-m}$
- weitere Näherung: nächste Nachbar-Kopplung: $V_{ij} = V$; falls i, j nächste Nachbarn ; 0 sonst
- Dadurch erhalten wir $E(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + V \sum_l e^{i\mathbf{k}l}$ und somit

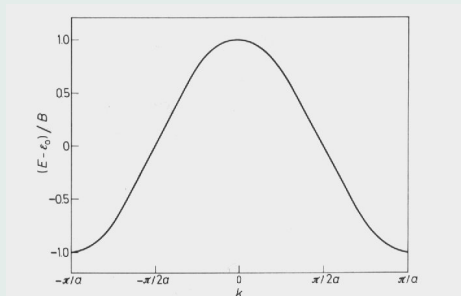
$$E(k) = \epsilon_0 + 2V \cos(ka) ; \text{1-D}$$

$$E(k) = \epsilon_0 + 2V [\cos(k_1 a) + \cos(k_2 a)] ; \text{2-D}$$

$$E(k) = \epsilon_0 + 2V [\cos(k_1 a) + \cos(k_2 a) + \cos(k_3 a)] ; \text{3-D}$$

(1)

wobei immer $-\frac{\pi}{a} < k_i < \frac{\pi}{a}$



Bandstruktur im Tight-Binding-Modell

- Greensfunktion für eindimensionales Gitter:

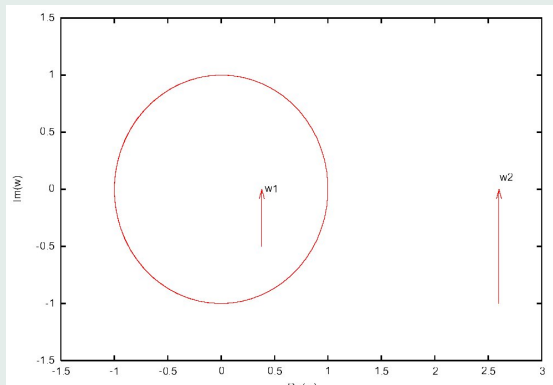
$$G(l, m; E) = \frac{L}{N2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk \frac{e^{ika(l-m)}}{E - \epsilon_0 - 2V \cos(ka)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\Phi \frac{e^{i\Phi(l-m)}}{E - \epsilon_0 - 2V \cos(\Phi)}$$

- Substitution $w = e^{i\Phi}$ und $x := \frac{E - \epsilon_0}{2V}$

$$G(l, m; z) = \frac{-1}{2\pi i V} \oint dw \frac{w^{|l-m|}}{w^2 - 2xw + 1}$$

- Nullstellen der Gleichung $w^2 - 2xw + 1 = 0$

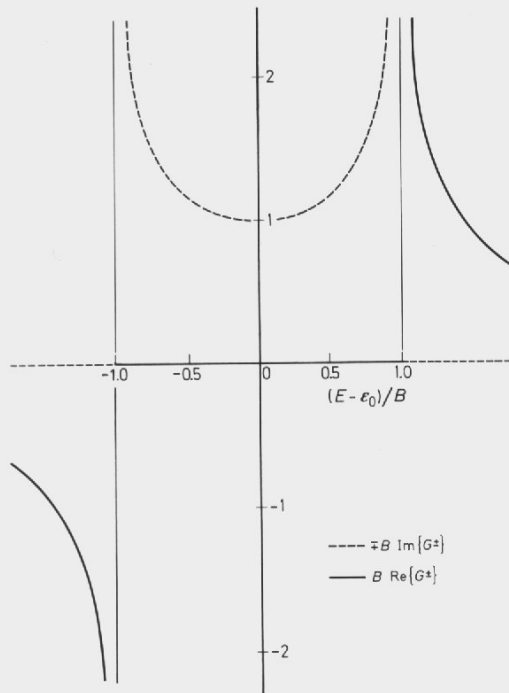
$$w_{1/2} = x \pm \sqrt{x^2 - 1}$$



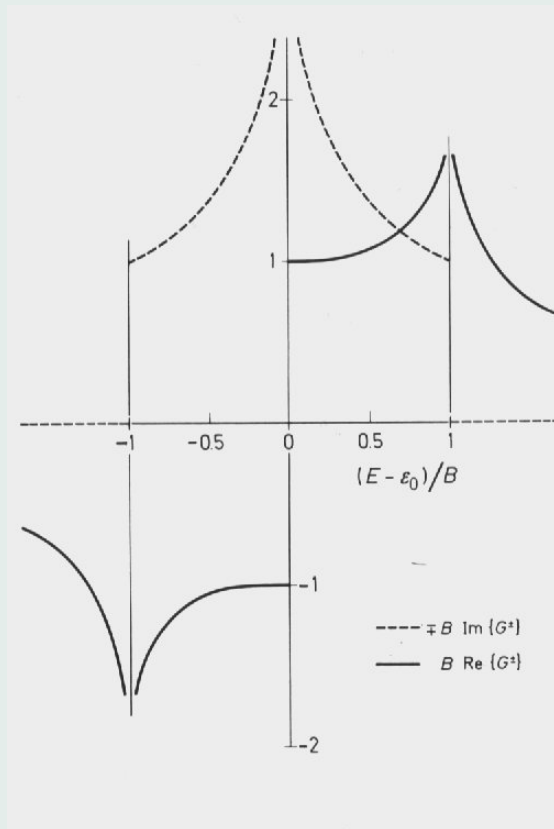
Bandstruktur im Tight-Binding-Modell

- Falls $x \in \{-\infty; -1) \cup (1; \infty\}$, so ist $|w_1| < 1$ und $|w_2| > 1$
 $\Rightarrow G(l, m; z) = \frac{w_1^{|l-m|}}{\sqrt{(E-\epsilon_0)^2 - 4V^2}}$
- Falls $-1 \leq x \leq 1 \Rightarrow$ Integral nicht definiert \Leftrightarrow kontinuierliches Spektrum
- $G^{r,a}(l, m; E) = \frac{\mp i}{\sqrt{4V^2 - (E-\epsilon_0)^2}} (x \mp i\sqrt{1-x^2})^{|l-m|}$
- Zustandsdichte $\rho(E) = \mp \Im(G^{r,a}(l, l; E)) = \frac{\Theta(V-|E-\epsilon_0|)}{\pi\sqrt{4V^2 - (E-\epsilon_0)^2}}$

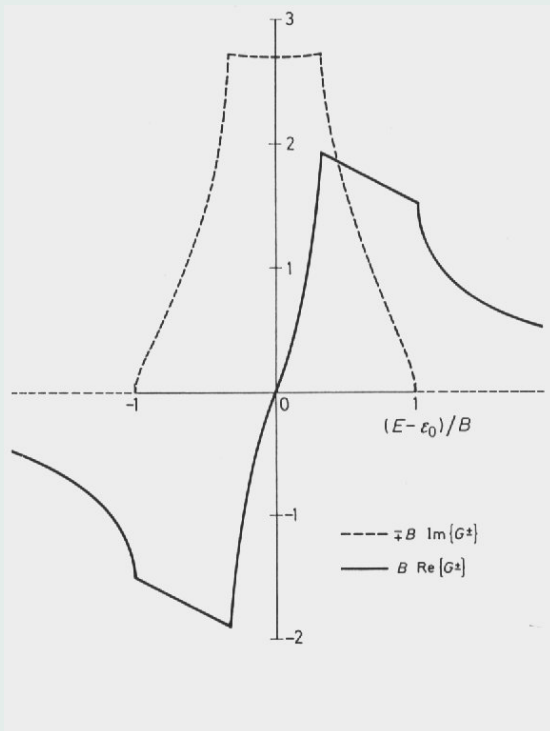
Bandstruktur im Tight-Binding-Modell



Bandstruktur im Tight-Binding-Modell



Bandstruktur im Tight-Binding-Modell



Störstellenniveaus

- Störstelle lokalisiert an $|l\rangle$. $H = H_{tb} + H_1$ mit $H_1 = |l\rangle\epsilon\langle l|$
- (δ -Potential)
-

$$\begin{aligned}T &= H_1 + H_1 G_0 H_1 + H_1 G_0 H_1 G_0 H_1 + \dots \\&= |l\rangle\epsilon\langle l| + |l\rangle\epsilon\langle l|G_0|l\rangle\epsilon\langle l| + \dots \\&= |l\rangle\epsilon[1 + \epsilon G_0(l,l) + (\epsilon G_0(l,l))^2 + \dots]\langle l| \\&= |l\rangle\frac{\epsilon}{1 - \epsilon G_0(l,l)}\langle l|\end{aligned}$$

(2)

- $G = G_0 + G_0 T G_0 = G_0 + G_0 |l\rangle\frac{\epsilon}{1 - \epsilon G_0(l,l)}\langle l| G_0$
- Pol von G $\Leftrightarrow G_0(l,l; E_p) = \frac{1}{\epsilon}$
- E_p ausserhalb des Bandes von H !

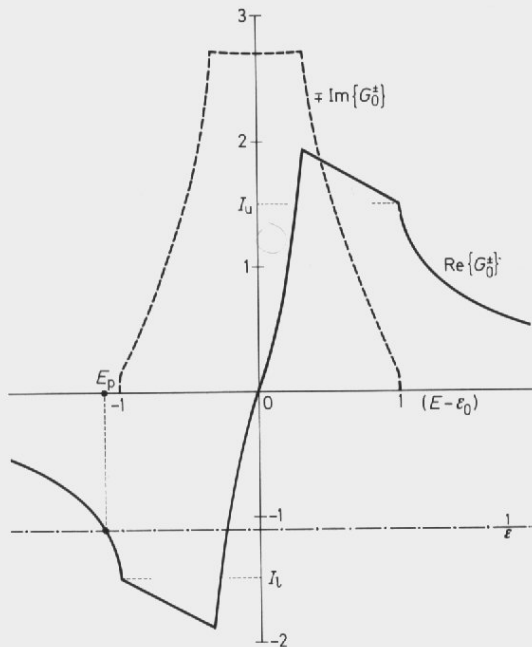
Störstellenniveaus

3 dimensionaler Fall:

$I_l := \text{Res}(G_0(l, l; E_l))$ und $I_u := \text{Res}(G_0(l, l; E_u))$ sind endlich, $\frac{dG_0}{dE} < 0$
und $G(E) \rightarrow 0$ wenn $E \rightarrow \infty$

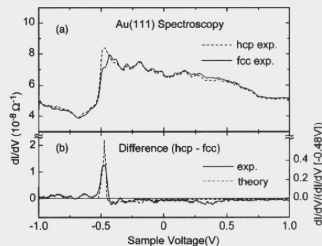
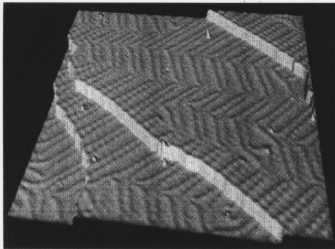
1. $\epsilon^{-1} < I_l < 0$. $G_0(l, l, E_p) = \frac{1}{\epsilon}$ hat keine Lösung
2. $I_l < \epsilon < 0$. genau eine Lösung, unterhalb der unteren Bandkante
3. $0 < I_u^{-1} < \epsilon$. genau eine Lösung, über der oberen Bandkante

Störstellenniveaus



Oberflächenniveaus

- Oberflächenzustände $\Leftrightarrow \Theta$ -Potential an der Kante (wird hier durch ein δ -Potential dargestellt)
- Separation in ein 2-D und ein 1-D Problem
- gebundene Zustände von $H = H_{tb} + H_1$ in einer Dimension.
- $\epsilon \cdot G_0 = 1$.
- Zustandsdichte hat $\frac{1}{\sqrt{E}}$ Divergenz
- führt zu divergentem G_0
- Immer ein Bindungszustand.
- auf dem Bild sieht man die 2-D Oberflächenzustandsdicht mit Diskontinuität



Quellen

- E.N.Economou, Green's Functions in Quantum Physics, Springer Verlag (fast alle Bilder)
- W.Chen, V.Madhavan, T.Janneala and M.F.Crommie, Scanning Tunneling Microscopy Observation of an Electronic Superlattice at the Surface of Clean Gold, Physical Review Letters (1998) Volume 80 Number 7 (für das letzte Bild)