

# Zu $k \cdot p$ -Schrödingeroperatoren

Thomas Koprucki

Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades  
Doktor der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)  
am Fachbereich für Mathematik und Informatik  
der Freien Universität Berlin



April 2008

Datum der Disputation: **7. November 2008**

Gutachter:

**Prof. Dr. Herbert Gajewski**, Freie Universität Berlin und  
Weierstraß-Institut für angewandte  
Analysis und Stochastik, Berlin

**Priv.-Doz. Dr. Hans-Jürgen Wünsche**, Humboldt-Universität Berlin

# Vorwort

Diese Dissertation fasst Forschungsergebnisse zusammen, die ich während der letzten Jahre in der Forschungsgruppe *Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen* am *Weierstraß-Institut für angewandte Analysis und Stochastik* (WIAS) in Berlin erzielt habe. Wesentliche Resultate dieser Arbeit sind dabei im Rahmen meiner Tätigkeit innerhalb des DFG-Schwerpunktprogrammes 1095 *Analysis, Modellierung und Simulation von Mehrskalensystemen* entstanden. Teile dieser Arbeit gehen auf vier gemeinsame Veröffentlichungen [BKKR00, BHK03, KBB<sup>+</sup>05, KKF06] zurück, die insbesondere in der Zusammenarbeit mit Kollegen der Forschungsgruppe *Partielle Differentialgleichungen* entstanden sind. Im Rahmen meiner Tätigkeit sind die beiden Software-Pakete KPLIB und WIAS-QW, letzteres in Zusammenarbeit mit Dr. Uwe Bandelow, entstanden, die die Grundlage für die numerischen Berechnungen im Anwendungsteil dieser Arbeit waren.

**Danksagung** An erster Stelle möchte ich mich herzlich bei Prof. Dr. Herbert Gajewski dafür bedanken, dass er mich als einen seiner Doktoranden aufgenommen hat. Bei Priv.-Doz. Dr. Heinz-Jürgen Wünsche bedanke ich mich für die bereitwillige Übernahme des Koreferats.

Dr. Hans-Christoph Kaiser und Dr. Joachim Rehberg haben im Rahmen unserer Zusammenarbeit bei mir das Interesse an angewandter Analysis geweckt und mir Wege aufgezeigt, wie mathematische Resultate auch für ganz konkrete Anwendungsprobleme erzielt werden können. Dafür möchte ich ihnen danken. Dr. Jürgen Fuhrmann hat als Projektleiter und Antragsteller (zusammen mit Dr. Hans-Christoph Kaiser und Dr. Gunther Schmidt) im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogrammes die finanziellen und organisatorischen Voraussetzungen für diese Arbeit geschaffen. Mit ihm teile ich das Interesse an dem Entwurf und der Entwicklung wissenschaftlicher Software. Seine Art wissenschaftliche Software zu schreiben und insbesondere die von ihm federführend entwickelte Bibliothek PDELIB [FKL01] haben meine Herangehensweise an wissenschaftliche Software entscheidend geprägt. Dr. Uwe

Bandelow hat mich auf das Themengebiet der Modellierung und Simulation elektronischer Zustände mit  $kp$ -Schrödingeroperatoren aufmerksam gemacht. Seine Art und sein Wille reale Anwendungsprobleme zu behandeln und die guten Kontakte zu Partnerinstitutionen wie dem Ferdinand-Braun-Institut, dem Heinrich-Hertz-Institut und dem Max-Born-Institut waren sehr inspirierend für mich – herzlichen Dank. Für viele, oft kontroverse Diskussionen und seine Hilfsbereitschaft danke Dr. Klaus Gärtner. Dr. Jens Tomm vom Max-Born-Institut, Berlin, gilt mein Dank für die gute Zusammenarbeit zum Thema InAsSb-Multi-Quantum-Wells. Danken möchte ich auch all den vielen Mitarbeitern des WIAS zu denen ich während meiner Zeit enge persönliche Kontakte aufbauen konnte. Insgesamt denke ich gerne an die gute Arbeitatmosphäre im Institut zurück, sei es im Hinblick auf die Mitglieder der Fachgruppe Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen oder die Besetzung des WIAS-Rechenzentrums. Die Eingeweihten wissen es: Von zentraler Bedeutung für meine Arbeit der letzten Zeit waren außerdem die BahnCard 100 und natürlich die Steckdosen in der ICE-Flotte und im Atelier-Cafe in Wolfsburg.

Mein besonderer Dank schließlich gilt meiner Familie! Meinem Bruder, Prof. Dr. Waldemar Rohde für seine Vorbildfunktion und seine Unterstützung, die mich motiviert haben, ein Studium überhaupt zu beginnen. Britta Lasner, der Mutter meiner Töchter Nina und Vera, für ihre tiefe Liebe, ihre endlose Unterstützung und ihre ausdauernde Geduld. Und natürlich meinen Eltern Hedwig und Erwin Koprucki. Sie haben mir mein Studium erst möglich gemacht, sie haben mir gleichzeitig die Freiheit gelassen, meinen eigenen Weg zu finden. Leider konnten sie nur die Anfänge meiner beruflichen Entwicklung selbst miterleben. Ihnen widme ich diese Arbeit.

Wolfsburg, im April 2008

THOMAS KOPRUCKI

**Teile dieser Arbeit sind veröffentlicht in:**

- [1] U. BANDELOW, H.-C. KAISER, T. KOPRUCKI, J. REHBERG.  
Spectral properties of  $k \cdot p$  Schrödinger operators in one space dimension, *Numerical Functional Analysis and Optimization* 21 (2000) 379–409.
  
- [2] U. BANDELOW, R. HÜNLICH, T. KOPRUCKI.  
Simulation of Static and Dynamic Properties of Edge-Emitting Multiple-Quantum-Well Lasers. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 9 (2003) 798–806.
  
- [3] T. KOPRUCKI, M. BARO, U. BANDELOW, T. TIEN, F. WEIK, J. TOMM, M. GRAU, M.-C. AMANN.  
Electronic structure and optoelectronic properties of strained InAsSb/GaSb multiple quantum wells. *Applied Physics Letters*, 87 (2005) 181911/1–181911/3.
  
- [4] T. KOPRUCKI, H.-C. KAISER, J. FUHRMANN.  
Electronic states in semiconductor nanostructures and upscaling to semi-classical models. In A. Mielke, Editor, *Analysis, Modeling and Simulation of Multiscale Problems*, Springer Verlag, Heidelberg, 2006, pp. 365–394.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische Modelle</b>	<b>5</b>
2.1	Bandkantennahe Zustände in Halbleiter-Volumenkristallen . . .	5
2.1.1	Die $kp$ -Gleichung für Blochwellen . . . . .	7
2.1.2	Achtband $kp$ -Hamiltonian für bandkantennahe Zustände	9
2.1.3	Anomale Bandkrümmung . . . . .	11
2.1.4	Modifikation der Bandstruktur durch mechanische Ver- spannung . . . . .	12
2.1.5	Mischkristallsysteme . . . . .	12
2.2	Bandkantennahe Zustände in Halbleiter-Quantenschichten . . .	13
2.2.1	Enveloppenfunktionsapproximation der Wellenfunktion	14
2.2.2	$kp$ -Schrödinger-Operatoren für Quantenschichten . . .	15
2.2.3	Lokalisierte Zustände in Quantenschichten . . . . .	17
2.2.4	Spurious Solutions aufgrund anomaler Bandkrümmung	18
<b>3</b>	<b>Analysis</b>	<b>21</b>
3.1	Formulierung des Problems . . . . .	21
3.2	Der Konjugationsoperator $\Theta$ . . . . .	25
3.3	Allgemeine Eigenschaften von $kp$ -Schrödingeroperatoren . . .	26
3.4	Abschätzung der Bandlücke . . . . .	40

3.4.1	Mit $\Theta$ anti-kommutierende kp-Kopplung erster Ordnung	40
3.4.2	$\Theta$ -wachsende $k^2$ -Terme . . . . .	46
3.4.3	Bewertung der Abschätzung an einem signifikanten, exakt lösbaren Beispiel . . . . .	50
3.5	kp-Operatoren mit definitem Hauptteil . . . . .	54
3.6	Regularisierung der kp-Operatoren . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Numerische Approximation der Eigenwerte</b>	<b>59</b>
4.1	Vorbemerkungen . . . . .	60
4.2	Finite-Volumen-Schema . . . . .	61
<b>5</b>	<b>Achtbandmodell für kubische Materialien</b>	<b>65</b>
5.1	Mechanisch verspannte Quantenschichten . . . . .	65
5.2	Achtbandmodell für Volumenmaterialien . . . . .	67
5.3	Achtband-Modell für Quantenschichten . . . . .	70
5.4	Koeffizientenmatrizen der Normalform des Modells . . . . .	71
5.5	Abschätzung der Bandlücke . . . . .	73
5.5.1	Bedingungen für die Positivität der $k^2$ -Terme . . . . .	74
5.5.2	Größe der garantierten Bandlücke . . . . .	79
5.6	Vermeidung von Spurious Solutions durch Anpassung von $E_p$ .	82
5.6.1	Bewertung anhand von Multi-Quantum-Wells mit kleiner Bandlücke . . . . .	85
<b>6</b>	<b>Anwendungen</b>	<b>87</b>
6.1	Elektronische Zustände in verspannten Multi-Quantum-Wells .	87
6.1.1	Mini-Bänder in Multi-Quantum-Wells . . . . .	88
6.1.2	Bandstruktur . . . . .	90
6.1.3	Impulsmatrixelemente der Interband-Übergänge . . . . .	91
6.2	Upscaling auf halbklassische Zustandsgleichungen . . . . .	92



6.2.1	Drift-Diffusions-Gleichungen . . . . .	93
6.2.2	Effektive Bandkanten und Zustandsdichten . . . . .	95
6.2.3	Optischer Materialgewinn . . . . .	98
6.2.4	Spontane strahlende Rekombination . . . . .	100
<b>A</b>	<b>Luttinger–Kohn–Hamiltonian für schwere und leichte Löcher</b>	<b>103</b>
A.1	Einfluss mechanischer Verspannungen . . . . .	104
A.2	Koeffizientenmatrizen der Normalform . . . . .	105
<b>B</b>	<b>Eigenwerte der Spin-Bahn-Kopplungs-Matrix</b>	<b>107</b>
<b>C</b>	<b>Interpolation der Materialparameter</b>	<b>109</b>
C.1	Bandkantenverlauf . . . . .	109
C.2	Lineare Interpolation für quaternäre Legierungen des Typs $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$ . . . . .	110
C.3	Interpolation und Materialparameter für InGaAsP . . . . .	110
<b>D</b>	<b>Verfahren zur Lösung der algebraischen Eigenwertprobleme</b>	<b>112</b>
	<b>Zusammenfassung</b>	<b>115</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>117</b>



# Kapitel 1

## Einleitung

In dieser Arbeit wird das Eigenwertproblem für eine spezielle Klasse von eindimensionalen Multiband-Schrödingeroperatoren, die so genannten *kp-Schrödingeroperatoren*, betrachtet. Diese Operatoren können als Systeme aus  $d$  skalaren Schrödingeroperatoren aufgefasst werden, die über Differentialoperatoren erster und nullter Ordnung miteinander gekoppelt sind. Diese Matrix-Schrödingeroperatoren hängen von der skalaren räumlichen Variablen  $z$ , den Ableitungen in Richtung  $z$  und parametrisch vom so genannten *reduzierten Wellenvektor*  $k_{\parallel} = (k_x, k_y) \in \mathbb{R}^2$  ab. Sie sind etablierte Modelle zur Beschreibung der elektronischen Struktur von Halbleiter-Quantenschicht-Strukturen für Energien in der Nähe der Bandkanten. Aus den Lösungen des Eigenwertproblems der kp-Schrödingeroperatoren

$$H\left(k_{\parallel}, k_z = -i \frac{d}{dz}\right) F_n(z; k_{\parallel}) = E_n(k_{\parallel}) F_n(z; k_{\parallel})$$

ergibt sich über die Eigenwertkurven  $E_n(k_{\parallel})$  die Bandstruktur der Quantenschicht. Der Vektor der Eigenfunktionen  $F_n$  bzw. dessen  $d$  Komponenten  $F_{n,1}, \dots, F_{n,d}$ , die so genannten *Enveloppenfunktionen*, liefern eine Approximation der quantenmechanischen Wellenfunktion. Die Untersuchung der mathematischen Eigenschaften dieser *zweidimensionalen* Schar von *räumlich eindimensionalen* Eigenwertproblemen bzw. Multiband-Schrödingeroperatoren ist ein zentrales Anliegen dieser Arbeit.

*Halbleiter-Quantenschichten* sind Heterostrukturen, die aus einer Abfolge ebener Schichten unterschiedlicher Halbleitermaterialien bestehen. Solche Nanostrukturen können beispielsweise durch epitaktisches Wachstum hergestellt werden. Die Richtung senkrecht zu den Schichten wird daher auch als *Wachstumsrichtung* bezeichnet und im Folgenden in  $z$ -Richtung angenommen. Die

typischen Dicken der einzelnen Schichten liegen im Bereich von einigen Nanometern bis zu einigen Zehnanometern. Charakteristisch für diese Heterostrukturen ist das Auftreten quantenmechanischer Effekte wie die Ausbildung diskreter Energieniveaus aufgrund der Strukturgröße.

Diese quantenmechanischen Effekte werden zum Design moderner optoelektronischer Bauelemente, wie z. B. *Quantum-Well-Halbleiterlasern*, gezielt genutzt. Ein wichtiger Designparameter ist dabei die Bandlücke der Quantenschicht-Struktur die z. B. die Emissionswellenlänge des Lasers festlegt. Die betrachteten kp-Modelle erlauben die Berechnung dieser Größe in Abhängigkeit von der Zusammensetzung der beteiligten Halbleitermaterialien, den Dicken der Quantenschichten, sowie möglicherweise auftretenden mechanischen Verspannungen. Solche Berechnungen können als Grundlage zum so genannten *Bandgap-Engineering* dienen. Darüber hinaus gestatten die kp-Modelle die Berechnung der Impuls- bzw. Übergangsmatrixelemente der optischen Übergänge zwischen den einzelnen Energieniveaus. Zusammen mit der Bandstruktur können mit Hilfe dieser Übergangsmatrixelemente weitere Designparameter der Quantenschicht, wie z. B. der optische Gewinn, der Brechungsindex oder Rekombinationsraten berechnet werden. Da die Übergangsmatrixelemente sich aus den Wellenfunktionen ergeben, spricht man analog auch von *Wavefunction-Engineering*.

In der Literatur sind im Wesentlichen zwei Zugänge zu kp-Schrödingeroperatoren für Quantenschichten bekannt. Am weitesten verbreitet ist der so genannte *konventionelle* Zugang. Bei diesem werden von der kp-Theorie für Halbleiter-Kristalle ausgehend die kp-Schrödingeroperatoren für Heterostrukturen dadurch gewonnen, dass in den Volumen-Modellen die Komponente  $k_z$  des Wellenvektors in Wachstumsrichtung geeignet durch die Ableitung  $-id/dz$  ersetzt wird. Eine rigorose Theorie der Heterostrukturen nach Burt [Bur92, Bur98] führt in einem bestimmten Limes zu kp-Schrödingeroperatoren von derselben formalen Struktur wie beim *konventionellen* Zugang. Das ermöglicht es im Folgenden eine beide Zugänge umfassende Klasse von kp-Schrödingeroperatoren zu betrachten.

In dieser Arbeit finden sich neben einer Darstellung der Modellierung der elektronischen Zustände mit kp-Schrödingeroperatoren Beiträge zur Untersuchung derer analytischer Eigenschaften, zur numerischen Approximation der Eigenlösungen und zur Anwendung des Achtband-Modells auf Beispiele aus dem Bereich Halbleiter-Quantum-Well-Laser.

In Kapitel 2 werden die in dieser Arbeit benutzten physikalischen Modelle vorgestellt. Dazu findet sich eine Darstellung der Eigenschaften der elektronischen Bandstruktur von Halbleitermaterialien und deren Approximation mit-

tels der kp-Methode. Darauf aufbauend wird in die Modellierung der elektronischen Zustände in Halbleiter-Nanostrukturen wie Quantenschichten mittels der Enveloppenfunktionsapproximation eingeführt. Dieser Ansatz führt dann auf die in dieser Arbeit behandelten kp-Schrödingeroperatoren.

Kapitel 3 beschäftigt sich mit den Spektraleigenschaften der kp-Schrödingeroperatoren. Dabei werden einerseits die spektralen Eigenschaften der Operatoren für einen beliebigen aber fest vorgegebenen Wellenvektor  $k_{\parallel}$  untersucht. Dazu zählen die Untersuchung von Selbstadjungiertheit, Kompaktheit der Resolvente und Diskretheit des Spektrums, sowie der Nuklearität der Resolvente. Andererseits wird die Abhängigkeit dieser Eigenschaften vom Wellenvektor  $k_{\parallel}$  betrachtet. Speziell dazu gibt es Untersuchungen zu den analytischen Eigenschaften der Operatorenschar  $\{H(k_{\parallel})\}_{k_{\parallel}}$ , die auch ein in den Koeffizienten erster Ordnung regularisiertes Problem umfassen.

Aus physikalischer Sicht stellt sich die Frage nach der Existenz einer spektralen Lücke bei  $k_{\parallel} = 0$ , der *Bandlücke* der Quantenschicht, sowie nach der Erhaltung dieser Bandlücke für endliche Werte von  $k_{\parallel}$ . Hierbei besteht ein Zusammenhang mit dem Auftreten von so genannten *Spurious Solutions*. Bei den Spurious Solutions handelt es sich um unphysikalische Eigenlösungen des Eigenwertproblems die insbesondere in der Bandlücke auftreten können. Zu diesem Zwecke werden quantitative Abschätzungen der spektralen Lücke in den Daten des Problems unter Ausnutzung der Struktureigenschaften der Koeffizientenmatrizen hergeleitet.

In Kapitel 4 wird die numerische Approximation der Eigenwerte und Eigenfunktionen von kp-Schrödingeroperatoren betrachtet. Dazu wird das in der Bibliothek KPLIB implementierte Finite-Volumen-Schema zur Approximation der Eigenfunktionen zusammen mit einer blockorientierten Aufstellung der System- und Massenmatrix dargestellt. Anschliessend wird auf die Steuerung des iterativen Eigenwertlösers ARPACK [LMSY02] zur Berechnung der bandkantennahen Eigenlösungen eingegangen. KPLIB ist die Grundlage für den Simulator WIAS-QW [BK] zur Berechnung elektronischer Zustände in Multi-Quantum-Wells. WIAS-QW ist für die Berechnungen der in Kapitel 6 dargestellten konkreten Anwendungsbeispiele verwendet worden.

Das Kapitel 5 betrachtet den kp-Schrödingeroperator des häufig benutzten Achtband-Modells für Materialien vom Zinkblende-Typ unter Berücksichtigung eventuell auftretender mechanischer Verspannungen. Dazu findet sich eine Darstellung dieses Modells mit den in Kapitel 3 eingeführten Koeffizientenmatrizen. Diese Darstellung dient als Ausgangspunkt für die Herleitung konkreter Formeln für die Größe der Bandlücke auf Grundlage der in Kapitel 3 bewiesenen Bandlückenabschätzung. Des Weiteren wird der Frage einer

mit den in Kapitel 3 gemachten Voraussetzungen konsistenten Parameterwahl für dieses Modell nachgegangen und diskutiert, inwiefern dadurch Spurious Solutions bei der Anwendung des Achtband-Modells vermieden werden können. Darüber hinaus findet sich zu Beginn eine Darstellung der Modellierung mechanisch verspannter Quantenschichten, wobei insbesondere der technologisch wichtige Fall biaxialer Verspannung betrachtet wird.

Kapitel 6 widmet sich der Anwendung des Achtband-Modells zur Simulation realer Mehrfach-Quantenschichten. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Verwendung der Ergebnisse der quantenmechanischen  $kp$ -Rechnungen für die Bauteilsimulation von Halbleiterlasern. Die Untersuchungen werden am Beispiel einer mechanisch verspannten InGaAsP-MQW-Laserstruktur (Indiumgalliumarsenidphosphid Multi-Quantum-Well) durchgeführt, deren Emissionswellenlänge von  $1550\mu m$  auf den Bereich der optischen Faserkommunikation abgestimmt ist.

Dazu findet sich als erstes die Diskussion der Eigenschaften der elektronischen Struktur der InGaAsP-Multi-Quantum-Well-Struktur. Auf dieser Basis folgt das *Upscaling* mikroskopisch berechneter Größen wie Ladungsträgerdichten, optischem Gewinn oder strahlender Rekombination, auf halbklassische Zustandsgleichungen, wie sie in der Bauteilsimulation von Halbleiterlasern mit halbklassischen Modellen, z. B. mit WIAS-TeSCA, verwendet werden. Dies geschieht anhand der Beispiele Bandkantenzustandsdichte, Peak Gain und Rate der spontanen Rekombination. Dieser Modellierungsansatz ermöglicht es, Resultate aus  $kp$ -Rechnungen zur Parametrisierung von Drift-Diffusions-Modellen in der optisch aktiven Zone von Halbleiter-Lasern einzusetzen [BHK03]. Auf diese Weise können  $kp$ -Rechnungen zur Verbesserung der Modellierung und Simulation von Multi-Quantum-Well-basierten Halbleiter-Lasern beitragen.

# Kapitel 2

## Physikalische Modelle

Dieses Kapitel dient zur Darstellung der Modellierung elektronischer Zustände in Halbleiter-Quantenschichten mittels der  $kp$ -Methode. Dazu beginne ich mit der Beschreibung der bandkantennahen Zustände in Halbleiter-Volumenkristallen. Auf dieser Grundlage beschreiben ich dann die Modellierung der elektronischen Zustände in Halbleiter-Quantenschichten unter zusätzlicher Verwendung der Enveloppenfunktionsapproximation. Dabei zeigen ich Modellierungsfragen und Grenzen auf, die sich bei der Anwendung dieses Ansatzes ergeben. Dazu gehört insbesondere die Frage nach dem Auftreten von unphysikalischen Lösungen die als *Spurious Solutions* bezeichnet werden. Zum Schluss erläutere ich welche mathematischen Fragestellungen sich im Rahmen dieser Modelle ergeben, die für die Anwendung der Modelle von Bedeutung sind und die dann in den folgenden Kapiteln behandelt werden.

### 2.1 Bandkantennahe Zustände in Halbleiter-Volumenkristallen

Eine grundlegende Eigenschaft von Halbleiter-Volumenmaterialien ist, dass die Atome ein periodisches Bravais-Gitter bilden, das durch seine kristallographische Einheitszelle beschrieben wird, siehe Abb. 2.1 und [Car96]. Die elektronischen Zustände der Valenzelektronen in einem Halbleiter sind im

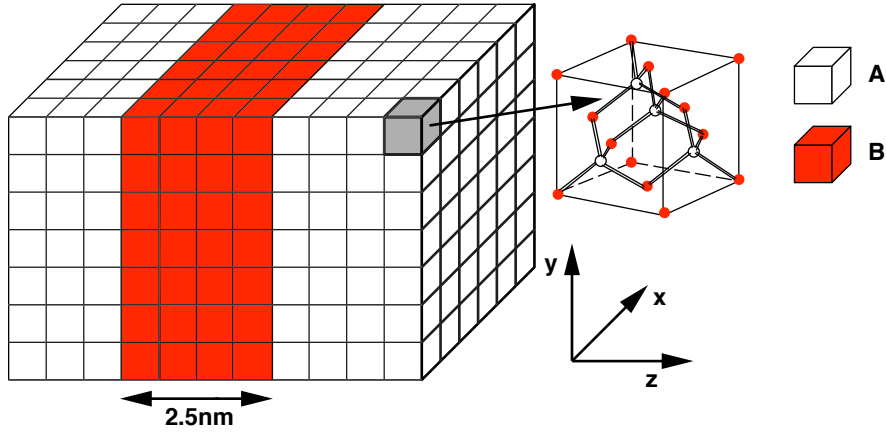


Abbildung 2.1: *Quantenschicht (Quantum-Well): eindimensionale Halbleiter-Nanostruktur, die aus den beiden Halbleitermaterialien A und B mit zwei ebenen Materialgrenzen besteht. Rechts ist die Einheitszelle eines binären Verbindungshalbleiters mit Zinkblende-Kristallstruktur wie Galliumarsenid vergrößert dargestellt.*

Wesentlichen gegeben durch die Lösungen des Eigenwertproblems für den Schrödinger-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V_{eff}(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

dabei bezeichnet  $m_0$  die Elektronenruhemasse,  $\hbar$  ist das Planck'sche Wirkungsquantum und  $V_{eff}$  ist das effektive Potential, das sich aus dem Potential der Ionenrümpfe (Atomkern und Rumpfelektronen) und der Meanfield-Wechselwirkung zwischen den Valenzelektronen zusammensetzt. Dieses Potential kann z. B. durch die empirische Pseudopotential-Methode (EPM) [CB66], [CC76], [Car96] gegeben sein. Alternativ können die elektronischen Zustände mittels der Dichtefunktionaltheorie durch Lösung von effektiven Einteilchen-Schrödinger-Gleichungen mit ebenfalls periodischem Potential bestimmt werden.

Aufgrund der Translationsinvarianz des gitterperiodischen Potentials haben die Eigenfunktionen des Schrödinger-Operators die Gestalt von *Blochwellen*

$$\Psi(\mathbf{r}; k) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u(\mathbf{r}; k), \quad (2.2)$$

die durch gitterperiodische Blochfunktionen  $u(\mathbf{r}; k)$  definiert werden, siehe Bloch-Theorem [Blo32]. Die Blochwellen sowie die gitterperiodischen Blochfunktionen hängen vom Vektor der Ortskoordinaten  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  und para-



metrisch vom Wellenvektor  $k = (k_x, k_y, k_z)$  ab. Die zugehörigen Eigenwertkurven  $E(k)$  hängen periodisch vom Wellenvektor  $k$  ab. Damit reicht es aus, die Betrachtungen auf die erste *Brillouin-Zone*, die Einheitszelle des periodischen Gitters im  $k$ -Raum, zu beschränken (reduziertes Zonenschema), siehe [Car96].

### 2.1.1 Die kp-Gleichung für Blochwellen

Der Blochwellen-Ansatz (2.2) führt auf ein Eigenwertproblem für die Blochfunktionen  $u(r; k)$ , siehe [Kan66, Kan82]. Unter Berücksichtigung des Spinfreiheitsgrades der Elektronen mittels zweikomponentiger Blochfunktionen führt dies auf die kp-Gleichung. Wir verwenden hier die Notation nach [Bah90]. Dann lautet diese:

$$Hu_n(r; k) = E_n(k)u_n(r; k) \quad (2.3)$$

mit dem Hamiltonian

$$H = H_0 + H_{k \cdot p} + H_k + H_{sb} + H_{ksb}$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V_{eff}(r), \quad H_{k \cdot p} = \frac{\hbar}{m_0}k \cdot p, \quad H_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0},$$

$$H_{sb} = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2}((\nabla V_{eff}) \times p) \cdot \sigma, \quad H_{ksb} = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2}((\nabla V_{eff}) \times k) \cdot \sigma.$$

Hier bezeichnet  $p$  den quantenmechanischen Impulsoperator definiert als  $p = -i\hbar\nabla$  und  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  ist der Vektor der *Pauli-Spinmatrizen*

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Die Teile  $H_{sb}$  und  $H_{ksb}$  des Hamiltonians beschreiben die Spin-Bahn-Wechselwirkung.

Die Eigenwertkurven  $E_n(k)$  sind die Energiebänder der Elektronen eines Halbleitermaterials. Sie beschreiben die erlaubten Zustände. Alle Eigenwertkurven zusammen bilden die *elektronische Bandstruktur*. Die zentrale Eigenschaft der Bandstruktur eines Halbleiters ist das Vorhandensein einer fundamentalen spektralen Lücke. Die Energiebänder unterhalb dieser Lücke werden als *Valenzbänder* bezeichnet, die oberhalb als *Leitungsbänder*. Für die meisten technologisch interessanten Materialien befindet sich das Maximum  $E_v$  der Valenzbänder am  $\Gamma$ -Punkt, dem Mittelpunkt der Brillouin-Zone an der Stelle

$k = 0$ . Für *direkte* Halbleitermaterialien wie Galliumarsenid (GaAs) befindet sich auch das Minimum der Leitungsbänder  $E_c$  am  $\Gamma$ -Punkt. Dagegen liegt dieses für *indirekte Halbleiter* wie Silizium ausserhalb des Zonenzentrums. Die Bandkanten  $E_c$  und  $E_v$  definieren die *Bandlücke*  $E_g = E_c - E_v$  eines Halbleiters. Abbildung 2.2 zeigt ein schematisches Banddiagramm.

Im thermodynamischen Gleichgewicht besetzen die Ladungsträger die Zustände in der Nähe der Bandkantenextrema. Dabei sind die Leitungsbänder von den sich im Kristall freibeweglichen Elektronen besetzt und die Valenzband-Zustände sind von den positiv geladenen Löchern besetzt. Deshalb ist es für viele Anwendungen auch ausreichend, die Beschreibung der Bandstruktur auf die bandkantennahen Zustände zu beschränken.

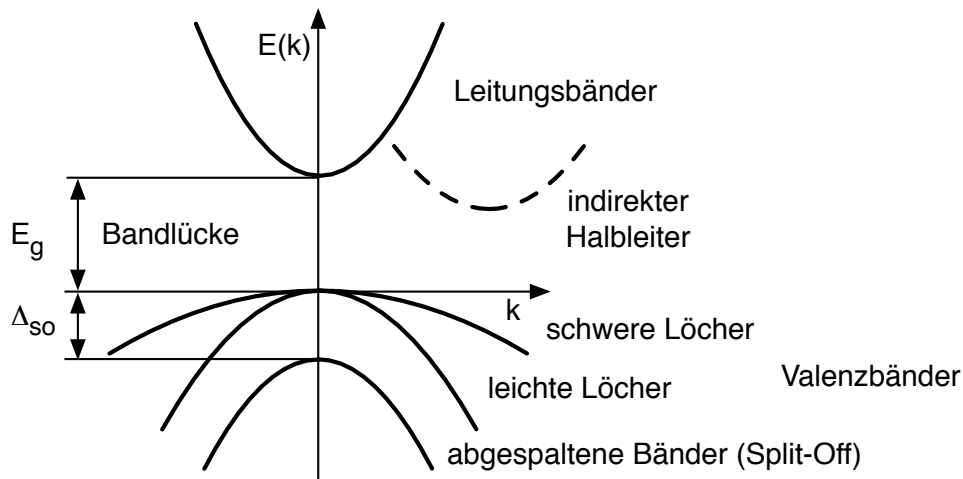


Abbildung 2.2: Schema der Bandstruktur in einem direkten Halbleiter bestehend aus dem untersten Leitungsband und den obersten drei Valenzbändern. Aufgrund der Kramers-Entartung (Spin-Entartung) ist jeder Zustand zweifach entartet. In indirekten Halbleitern befindet sich das Leitungsbandminimum ausserhalb des Zonenzentrums  $k=0$  wie durch die gestrichelte Linie angedeutet. In diesem Fall können in Abhängigkeit von der Symmetrie des Kristallgitters mehrere äquivalente Bandminima auftreten, z. B. Sechs bei Silizium.

## 2.1.2 Achtband kp-Hamiltonian für bandkantennahe Zustände

Unter der Voraussetzung, dass die Blochfunktionen am  $\Gamma$ -Punkt  $u_n^\Gamma(r) = u_n(r; k = 0)$  ein vollständiges Orthonormalsystem bilden, kann man jede Blochfunktion  $u_n(r; k)$  durch diese Lösungen darstellen:

$$u_n(r, k) = \sum_{n'} c_{n'}(k) u_{n'}^\Gamma(r). \quad (2.4)$$

Die ersten  $d$  bandkantennahen Zustände  $u_n$  mit den Indices  $n = 1, \dots, d$  bilden die Gruppe der *Klasse-A* Bänder. Alle übrigen Bänder bilden die Gruppe der *Klasse-B* Bänder. Da diese Zustände am  $\Gamma$ -Punkt energetisch von der Klasse-A entfernt sind, werden diese auch als die *entfernten Bänder* (remote bands) bezeichnet. Von diesen wird angenommen, dass sie nur einen kleinen Einfluss auf die bandkantennahen Zustände haben. Die typische Zahl von Klasse-A Bändern ist 1, 4, 6 oder 8 Bänder [Kan82, Bas88, Chu95, Bah90, MGO94]. Die Klasse-B Bänder befinden sich weit entfernt von den Bandkanten  $E_c$  und  $E_v$ . Daher liefern diese nur einen kleinen Beitrag zu einem Klasse-A Zustand  $u_n(r, k)$  in der Nähe des Zonenzentrums. Das legt die folgende Approximation nahe:

$$u_n(r, k) \approx \sum_{n'=1}^d c_{n'}(k) u_{n'}^\Gamma(r), \quad \text{für } n = 1, \dots, d. \quad (2.5)$$

Berücksichtigt man die Effekte, die von dem Einfluss der Klasse-B Zustände herrühren, störungstheoretisch mittels des Löwdin-Schemas, so erhält man ein nichtlineares Eigenwertproblem zur Bestimmung der Koeffizienten  $c_{n'}$  der Klasse-A Bänder, siehe [Kan66, Kan82]. Eine geeignete Linearisierung dieses Problems in der Nähe der Bandkanten liefert dann den zugehörigen Hamiltonian.

Im Folgenden werden wir den Fall von 8 Klasse-A Bändern betrachten. Diese bestehen aus dem untersten Leitungsband und den obersten 3 Valenzbändern, alle jeweils zweifach entartet, siehe Abbildung 2.2. Für Materialien mit Diamant- oder Zinkblende-Kristallstruktur wird der Raum der Klasse-A Bänder durch die Zustände  $S \uparrow, X \uparrow, Y \uparrow, Z \uparrow, S \downarrow, X \downarrow, Y \downarrow, Z \downarrow$  aufgespannt, wobei die Pfeile  $\uparrow$  und  $\downarrow$  jeweils die Spinrichtung (spin-up und spin-down) anzeigen. Mit der Schreibweise nach [EW96] lautet der Hamiltonian

$$H_{8 \times 8}(k) = \begin{pmatrix} K(k) + iG_z + E & \Gamma \\ \Gamma^* & K(k) - iG_z + E \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

wobei die kp-Matrizen gegeben sind durch

$$K(k) = \begin{pmatrix} Ak^2 & iP_0k_x & iP_0k_y & iP_0k_z \\ -iP_0k_x & Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_xk_y & Nk_xk_z \\ -iP_0k_y & Nk_xk_y & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_yk_z \\ -iP_0k_z & Nk_xk_z & Nk_yk_z & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

$$G_z = \frac{\Delta_{so}}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Gamma = \frac{\Delta_{so}}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & -1 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

$$E = \begin{pmatrix} E_g & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_{so}/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta_{so}/3 & -0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta_{so}/3 \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Da ihr Einfluss üblicher Weise vernachlässigt werden kann, sind diejenigen Matrixelemente weggelassen worden, die den Einfluss einer möglicherweise vorhandenen Abweichung von der Inversionssymmetrie des Kristallgitters über das Potential  $V_{eff}$  beschreiben und die, die den Einfluss der  $k$ -abhängigen Spin-Bahn-Wechselwirkung beschreiben, siehe [Kan82, Bah90].

Die Parameter des Hamiltonian sind die (parabolische) Leistungsbandmasse  $m_c$ , die Luttinger-Parameter  $\gamma_1^L, \gamma_2^L, \gamma_3^L$ , die die Massen der leichten und der schweren Löcher entlang verschiedener kristallographischer Richtungen beschreiben, die Größe der Bandlücke  $E_g$ , die Größe der Spin-Bahn-Aufspaltung  $\Delta_{so}$  und das Impulsmatrixelement  $P_0$ . Mit diesen Parametern werden die Koeffizienten des kp-Hamiltonians in (2.7) wie folgt definiert

$$L = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1^L + 4\gamma_2^L) + \frac{P_0^2}{E_g}, \quad M = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1^L - 2\gamma_2^L), \quad N = -6\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3^L + \frac{P_0^2}{E_g}, \quad (2.10)$$

$$A = \frac{\hbar^2}{2m_0} \cdot \frac{m_0}{m_c} - P_0^2 \frac{E_g + 2/3\Delta_{so}}{E_g(E_g + \Delta_{so})}. \quad (2.11)$$

$P_0$  ist proportional zum Impulsmatrixelement zwischen den Leitungsband- und Valenzband-Blochfunktionen  $S$  und  $X$  und definiert durch

$$P_0 \stackrel{def}{=} -i\frac{\hbar}{m_0}\langle S, p_x X \rangle. \quad (2.12)$$

Der Parameter  $P_0$  ist ein Maß für die Stärke der Kopplung zwischen den Leitungsbandern und den Valenzbandern. Er ist auch als optisches Matrix-

element bekannt, welches bei der Berechnung der Stärke von optischen Übergängen zwischen Valenz- und Leitungsbändern eine Rolle spielt. Es ist üblich, das optische Matrixelement als Energieparameter anzugeben:

$$E_p = \frac{2m_0}{\hbar^2} P_0^2. \quad (2.13)$$

Die Parameter  $E_g$ ,  $\Delta_{so}$ ,  $m_c$ ,  $\gamma_1^L$ ,  $\gamma_2^L$ ,  $\gamma_3^L$  und  $E_p$  können aus experimentell bestimmbaren Eigenschaften des jeweiligen Halbleitervolumenmaterials gewonnen werden. In diesem Sinne können kp-Hamiltonians als empirische Modelle zur Beschreibung der Bandstruktur in der Nähe der Bandkanten dienen. Es existiert eine umfangreiche Zusammenstellung [VMRM01] dieser Bandstruktur-Parameter für die 12 wichtigsten III-V Verbindungshalbleiter sowie für deren ternäre und quarternäre Legierungen.

In der Literatur sind auch vereinfachte kp-Hamiltonians gebräuchlich. Zu diesen zählt insbesondere der Vierband-Luttinger-Kohn-Hamiltonian für die schweren und leichten Löcher und Sechsband-Hamiltonians für die Valenzbänder [Bas88, Chu95, Car96]. Neben den kp-Hamiltonians für Materialien mit Diamant- oder Zinkblende-Kristallgitter sind auch Modelle für Halbleitermaterialien mit Wurtzit-Kristallstruktur wie z. B. Galliumnitrid eingeführt worden [CC96].

### 2.1.3 Anomale Bandkrümmung

Die reziproken Massen  $A$  und  $L$  auf der Diagonale des kp-Hamiltonians (2.6) hängen vom dem Verhältnis  $\zeta = E_p/E_g$  ab. Für Werte  $\zeta > \zeta_{krit}$  wechselt eine der Massen ihr Vorzeichen. Für große Wellenvektoren  $k$  parallel zu einer der Koordinatenachsen im  $k$ -Raum dominieren diese diagonalen  $k^2$ -Terme das Verhalten der Energiebänder. Das führt für  $\zeta > \zeta_{krit}$  zur Ausbildung einer anomalen Energiedispersion. So wird z. B. für  $A < 0$  die Krümmung der Leitungsbänder für große Wellenvektoren negativ, siehe Abbildung 2.5. Es ist bekannt, dass dieses Verhalten der Bandstruktur zum Auftreten von Spurious Solutions führen kann, wenn man die kp-Methode auf Heterostrukturen anwendet, siehe Abschnitt 2.2.4 und [For97, MGO94, Sol03].

### 2.1.4 Modifikation der Bandstruktur durch mechanische Verspannung

Zieht man einen Volumenkristall auseinander oder presst man diesen zusammen, so entsteht durch die Verzerrung des Kristallgitters eine mechanische Verspannung. Wird ein Halbleitermaterial mittels Epitaxiewachstum auf einem Substrat mit davon abweichender Gitterkonstante abgeschieden, z. B. Indiumgalliumarsenid auf Galliumarsenid, so entsteht eine mechanische Verspannung in der abgeschiedenen Schicht durch die Gitterfehlanpassung zwischen den beiden Kristallgittern.

Zum Einen führt diese mechanische Verspannung zu einer Verschiebung der Bandkanten  $E_c$ ,  $E_v$ , woraus eine Änderung der Bandlücke resultiert. Zum Anderen führt diese zu einer Aufspaltung der schweren und leichten Lochbänder am  $\Gamma$ -Punkt. Zudem hat die mechanische Verspannung einen Einfluss auf die Anisotropie des Effektivmassentensors und das *Warping* der Bandstruktur [CC92]. Als *Warping* bezeichnet man die Winkelabhängigkeit der Energie im  $k$ -Raum und damit das Abweichen der Isoenergieflächen von der Kugelform.

Den Einfluss der mechanischen Verspannung auf die Bandstruktur kann man im Rahmen der kp-Methode durch Ergänzung des kp-Hamiltonians um die vom Verzerrungstensor  $\varepsilon$  abhängige Pikus-Bir-Deformationswechselwirkungsmatrix  $D(\varepsilon)$  gegeben durch Deformationspotentiale näherungsweise berücksichtigen [CC92, EW96].

### 2.1.5 Mischkristallsysteme

Unsere bisherigen Überlegungen beziehen sich auf Elementhalbleiter wie Silizium oder binäre Verbindungshalbleiter wie Galliumarsenid oder Indiumphosphid (InP), bei denen von einer idealen periodischen Anordnung der Atome im Kristallgitter, beschrieben durch die Einheitszelle, ausgegangen werden kann. Mischkristalle sind Legierungen binärer Verbindungshalbleiter. Sie sind technologisch von besonderem Interesse, da sich durch gezieltes Legieren Eigenschaften maßschneidern lassen. So kann in ternären Legierungen wie  $In_{1-x}Ga_xAs$  die Größe der Bandlücke zwischen den Werten der beiden binären Bestandteile in Abhängigkeit vom Molenbruch  $x$  beliebig eingestellt werden. In quarternären Materialsystemen wie  $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$  kann in gewissen Grenzen zusätzlich noch die Gitterkonstante und damit die mechanische Verspannung kontrolliert werden. Insbesondere lassen sich mittels Epitaxieverfahren Schichten mit vorgegeben Molenbrüchen in hoher Qualität herstellen. Streng genommen ist für diese Materialien unsere Arbeits-

hypothese eines periodischen Kristallgitters verletzt. Trotzdem kann man diese Materialien bis zu einem gewissen Grad mit ähnlichen Methoden unter Benutzung der so genannten *Virtual Crystal Approximation*, d.h. eines gedachten Ersatzkristalls, behandeln.

Im Rahmen der  $kp$ -Methode werden zur Beschreibung der Bandstruktur in Mischkristallen die gleichen Hamiltonians benutzt wie die für die zugehörigen binären Verbindungshalbleiter. Die Parameter des Mischkristalls werden dabei durch Interpolation der Parameter seiner binären Bestandteile gewonnen. Oft liefert eine lineare Interpolation in Abhängigkeit vom Molenbruch eine ausreichende Näherung. Für einige Parameter wie zum Beispiel die Bandlücke  $E_g$  müssen für die Interpolation zusätzlich legierungsabhängige Bowing-Parameter berücksichtigt werden. Alle dafür benötigten Daten findet man zum Beispiel in [VMRM01]. Diese Bowing-Parameter können insbesondere durch Anpassung an experimentelle Daten gewonnen werden. Dies unterstreicht nochmals die Bedeutung der  $kp$ -Hamiltonians zur empirischen Bandstruktur-Modellierung.

## 2.2 Bandkantennahe Zustände in Halbleiter-Quantenschichten

Bisher haben wir die Modellierung der Bandstruktur für Volumenmaterialien mit  $kp$ -Hamiltonians diskutiert. Nun wollen wir diesen Ansatz auf Halbleiter-Quantenschichten die so genannten *Quantum-Wells* (QW) und Mehrfach-Quantenschichten die so genannten *Multi-Quantum-Wells* (MQW) (siehe Abb. 2.3) oder so genannte Doppelbarrieren-Strukturen ausdehnen [Sin93, Bas88, Chu95]. Bei diesen Heterostrukturen ist die Translationsinvarianz verletzt und das mikroskopische Potential  $V_{eff}$  kann nicht mehr in alle Raumrichtungen als periodisch angenommen werden. Dennoch ist die Heterostruktur ein kristalliner Festkörper und die Atome sind näherungsweise in einem Bravis-Gitter angeordnet. Das mikroskopische Potential besteht aus zwei Anteilen: einer oszillatorischen Komponente, die dem Potential der Ionenrümpfe zugeordnet ist, und einer global schwach variierenden Komponente, die die Zusammensetzung der Heterostruktur aus unterschiedlichen Volumenmaterialien widerspiegelt, siehe Abb. 2.4.

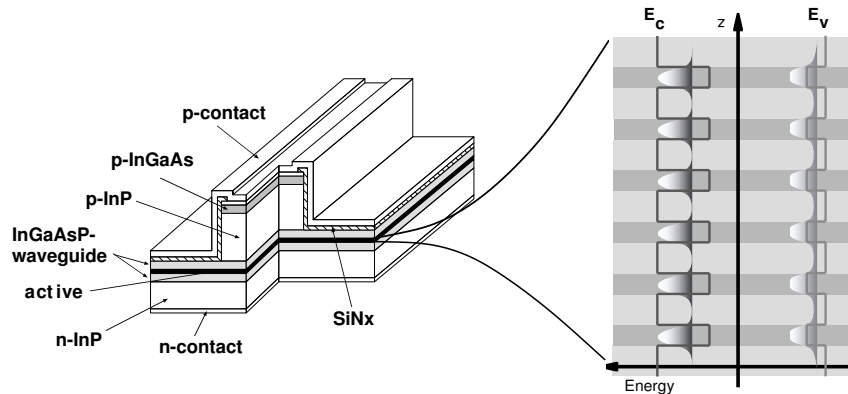


Abbildung 2.3: Schema einer SMQW Laserdiode des HHI, Berlin. Löcher injiziert durch den p-Kontakt und Elektronen injiziert durch den n-Kontakt rekombinieren in der optisch aktiven Zone. Die optisch aktive Zone besteht aus sechs Quantenschichten (Quantum-Wells) und ist rechts vergrößert dargestellt.  $E_c$  und  $E_v$  sind jeweils die Bandkantenprofile für die Elektronen und Löcher. Die Lokalisierung der Elektronen und Löcher in den Quantenschichten ist angedeutet.

## 2.2.1 Envelopenfunktionsapproximation der Wellenfunktion

Die offensichtliche Zweiskalen-Natur des mikroskopischen Potentials und der zugehörigen mikroskopischen Wellenfunktion legt es nahe, dieses Problem als Mehrskalen-Problem zu behandeln. Nach ersten heuristischen Ansätzen für diese Fragestellung von Bastard [Bas88], wurden die ersten rigorosen Ansätze durch Burt [Bur92, Bur94] unternommen, der gezeigt hat, dass es möglich ist eine Theorie für den *schwach variierenden* Anteil der Wellenfunktion, der *Envelopenfunktion*, in Termen der atomistischen Skale herzuleiten. Dieser Ansatz führt auf kp-Hamiltonians für die Envelopenfunktionen.

Für Quantenschichten bleibt das Kristallgitter in den lateralen Raumrichtungen  $r_{\parallel} = (x, y)$ , senkrecht zur Wachstumsrichtung  $z$ , periodisch. Diese Wahl des Koordinatensystems entspricht mittels Epitaxiewachstum auf [001] orientierten Substraten abgeschiedenen Quantenschichten. Wie bei der kp-Theorie für Volumenmaterialien approximieren wir die elektronischen Zustände in der Quantenschicht durch die  $d$  gitterperiodischen Zonenzentrums-Blochfunktionen  $u_n^{\Gamma}(r)$ ,  $n = 1, \dots, d$ , der Klasse-A. Dazu ersetzen wird jedoch



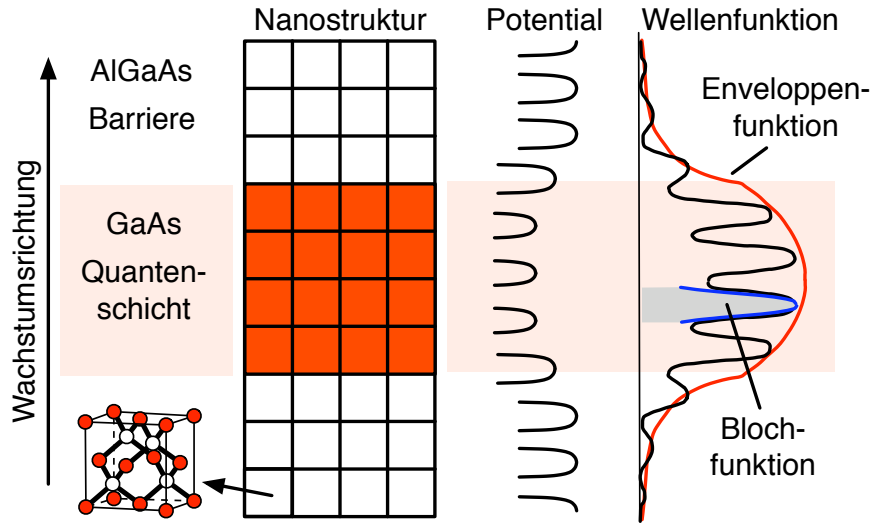


Abbildung 2.4: Schematische Darstellung des mikroskopischen Potentials und der Approximation der atomistischen Wellenfunktion durch gitterperiodische Blochfunktionen und schwach variierende Enveloppenfunktionen am Beispiel einer zwischen zwei Barrieren eingeschlossenen Halbleiter-Quantenschicht.

die Koeffizienten  $c_n$  aus (2.5) durch die Enveloppenfunktionen  $F_n(z; k_{\parallel})$ , die vom reduzierten Wellenvektor  $k_{\parallel} = (k_x, k_y)$  abhängen:

$$\Psi(r; k_{\parallel}) = \exp(ik_{\parallel}r_{\parallel}) \sum_{n=1}^d F_n(z; k_{\parallel}) u_n^{\Gamma}(r). \quad (2.14)$$

Dieser Ansatz läßt sich auch auf zweidimensionale Nanostrukturen wie Quantendrähte (Quantum Wires) und dreidimensionale Nanostrukturen wie Quantenpunkte (Quantum Dots) übertragen.

## 2.2.2 $kp$ -Schrödinger-Operatoren für Quantenschichten

Nach Burt [Bur92, Bur94, Bur98] ist der Vektor der Enveloppenfunktionen  $F = (F_1, \dots, F_d)^T$  für einen gegebenen reduzierten Wellenvektor  $k_{\parallel}$  die Lösung des Eigenwertproblems

$$H(k_{\parallel}, -i\frac{\partial}{\partial z})F(z; k_{\parallel}) = E(k_{\parallel})F(z; k_{\parallel}). \quad (2.15)$$

(2.15) beschreibt eine zweidimensionale Schar räumlich eindimensionaler Eigenwertprobleme die vom Scharparameter  $k_{\parallel}$  abhängen. Diese liefert eine

Beschreibung der In-plane-Bandstruktur der Quantenschicht. Beispiele dazu finden sich in Kapitel 6.

In großer Entfernung zum Übergang zwischen den beiden Materialien stimmt der Schrödinger-Operator  $H$  formal mit dem Volumen-Hamiltonian (mit der Ersetzung  $k_z \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial z}$ ) verschoben um die Valenzbandkante  $E_v$  überein [Bur92, Bur94]. Deshalb geht der Bandkanten-Offset  $\Delta E_v$  zwischen zwei Materialien als zusätzlicher Parameter ein. Der Bandkanten-Offset ist für viele Materialübergänge verfügbar [VdW89, Kri91, VMRM01]. Zu seiner Berechnung wird häufig auch die so genannte *Model Solid*-Theorie verwendet, die sich insbesondere zur Interpolation des Bandkanten-Offsets bei ternären oder quarternären Mischkristallen eignet, siehe Anhang C. In der Übergangszone zwischen zwei Materialien treten nichtlokale Effekte auf, die zu einer Kopplung der Zustände entlang des Übergangs führen [Bur92, Bur94]. Eine Approximation dieser nichtlokalen Wechselwirkung durch Übergangsbedingungen für die Enveloppenfunktionen ist für viele Anwendungen ausreichend.

Man muss sich allerdings bewusst sein, dass der Burt-Forman-Ansatz wesentlich auf der Annahme beruht, dass die gleichen Blochfunktionen in allen Materialschichten verwendet werden. Folglich hat das Impulsmatrixelement  $P_0$  für alle Materialien den selben Wert. Wie zu erwarten ist, variieren die experimentell gemessenen Werte für  $P_0$  gegeben durch das optische Matrixelement  $E_p$  (2.13) jedoch. Daher sind aufgrund der damit verbundenen Ortsabhängigkeit von  $P_0$  zusätzliche Übergangsbedingungen für die Enveloppenfunktionen notwendig.

Somit liegt folgende allgemeine Struktur des Schrödinger-Operators nahe:

- In jeder Materialschicht wird der Schrödinger-Operator von einem Volumenhamiltonian wie (2.6) abgeleitet. Daraus resultiert in jeder Materialschicht ein System gekoppelter Schrödingeroperatoren.
- An den Materialgrenzen wird die Stetigkeit der Enveloppenfunktionen und des Stromvektors, siehe Bemerkung 3.10 auf Seite 35, gefordert.
- Wenn sich das optische Matrixelement  $E_p$  nur wenig zwischen den beiden Materialien unterscheidet, kann man einen durch geeignete Mittelung bestimmten Effektivwert verwenden. Ansonsten muss man die Kopplung entlang der Materialgrenze zwischen den Enveloppenfunktionen die zu den Blochfunktionen  $S$  zugeordnet sind und denen der Blochfunktionen X,Y,Z zugeordneten mittels zusätzlicher Übergangsbedingungen definieren [For97, Bur98, PFFD01, RAE<sup>+</sup>02, MTPP05].

Die bestehenden Modelle von diesem Typ lassen sich grob in zwei Klassen einteilen, nämlich in die *konventionellen* und die nach Burt-Foreman. Die *konventionellen* kp-Schrödingeroperatoren wurden aus den Volumen-Hamiltonians durch die formale Ersetzung  $k_z \rightarrow -i\frac{\partial}{\partial z}$  gewonnen, siehe z. B. [Bas88]. Dieser Ansatz muss ebenso durch Kopplungsbedingungen zwischen den Enveloppen an der Materialgrenze ergänzt werden. Diese Übergangsbedingungen wurden dabei mittels des so genannten *Operator Orderings* implizit eingebaut. Unter Operator Ordering versteht man eine Ersetzungsregel für Terme der Form  $Ak_z^2$  und  $Ak_z$ . Für die Terme zweiter Ordnung wird das BenDaniel-Duke Operator Ordering gegeben durch  $Ak_z^2\Psi \rightarrow -\partial_z(A(z)\partial_z\Psi)$  angewendet. Für die Terme erster Ordnung wird die heuristische Symmetrierungsregel  $Ak_z\Psi \rightarrow -\frac{i}{2}[A(z)\partial_z\Psi + \partial_z(A(z)\Psi)]$  benutzt [Bas88]. Die resultierenden Übergangsbedingungen unterscheiden sich von denen nach Burt-Foreman. Dies betrifft insbesondere das Operator Ordering der nichtdiagonalen Kopplungsterme, siehe z. B. [For93]. Für einen Vergleich der verschiedenen Übergangsbedingungen siehe [For93, MGO94].

### 2.2.3 Lokalisierte Zustände in Quantenschichten

Eine Quantenschichtstruktur (Quantum Well) besteht im wesentlichen aus drei Materialschichten: der eigentlichen Quantenschicht, die zwischen zwei Barrieren eingebettet ist. Dabei sind das Quantenschichtmaterial und das Barrierenmaterial so gewählt, dass die sich ergebenden Bandkantenprofile  $E_v(z)$  und  $E_c(v)$  einen Potentialtrog sowohl für die Löcher als auch für die Elektronen bilden, siehe Abbildung 2.3. Der gebildete Potentialtrog führt zu einer Lokalisierung der Ladungsträger im Bereich der Quantenschicht. Dieser Effekt wird als Carrier Confinement bezeichnet. Daher werden Quantenschichten auch als Quantengraben oder Quantentröge bezeichnet. Ein weiteres zentrales Merkmal von Quantenschichten ist das Auftreten diskreter Energieniveaus aufgrund der Längenquantisierung verursacht durch deren geringer Dicke. Typische Dicken liegen im Bereich von  $2 - 20 \text{ nm}$ . Durch die Wiederholung von Quantenschichten entstehen Mehrfach-Quantenschichten (Multi-Quantum-Wells), siehe Abbildung 2.3. Im Folgenden werden wir QW als Abkürzung für Quantum-Wells, d.h. Einzelquantenschicht-Strukturen, und MQW für Multi-Quantum-Wells verwenden.

Die Möglichkeit, Ladungsträger in Quantenschichten zu lokalisieren, wird in MQW-Laserdioden gezielt ausgenutzt, um die Zustandsdichte und den optischen Gewinn in der optisch aktiven Zone des Lasers zu erhöhen. Die lokalisierten Ladungsträger werden durch die gebundenen Zustände des zugehörigen kp-Schrödingeroperators beschrieben. Diese sind durch den diskreten

Teil des Spektrums charakterisiert. Die gebundenen Zustände fallen in den Barrieren exponentiell ab. Deshalb kann man eine Finite Domain Approximation verwenden, bei der künstlich ein hinreichend großes Simulationsgebiet  $\Omega$  herausgeschnitten wird und homogene Dirichlet (Hard Wall) oder Neumann (Soft Wall) Randbedingungen benutzt werden.

## 2.2.4 Spurious Solutions aufgrund anomaler Bandkrümmung

Es ist bekannt [For97, Sol03], dass wenn das mit der Bandlücke  $E_g$  gewichtete optische Matricelement  $\zeta = E_p/E_g$  einen kritischen Wert  $\zeta_{krit}$  überschreitet, aufgrund der daraus resultierenden anomalen Bandkrümmung, siehe Kapitel 2.1.3, unphysikalische Lösungen als Eigenfunktionen des kp-Schrödingeroperators auftauchen. Diese werden als *Spurious Solutions* bezeichnet und sind im Fourierraum um einen großen Wert von  $k_z$  konzentriert, der typischerweise außerhalb der ersten Brillouin-Zone liegt. Somit sind diese räumlich stark oszillierend obwohl deren Einhüllende der Form eines gebundenen Zustandes in der Quantenschicht ähneln kann [Sol03]. Die Spurious Solutions sind Artefakte des Modells und können das gesamte Spektrum verschmutzen und sogar als Lösungen zu Energien in der Bandlücke auftreten [For97, Sol03].

Es gibt verschiedene Wege diese Schwierigkeiten zu überwinden. An dieser Stelle wollen wir drei Vorschläge nennen, nämlich:

- Geeignetes Reskalieren der Valenz-Leitungsband-Kopplung zur Erreichung von  $\zeta < \zeta_{krit}$ .
- Anpassen eines neuen Satzes von Volumen-Bandstruktur-Parametern unter der Nebenbedingung  $\zeta < \zeta_{krit}$ .
- Approximation der Eigenfunktionen in Funktionenräumen, die  $k_z < k_{krit}$  garantieren, wobei  $k_{krit}$  der kritische Wellenvektor ist, für den die Krümmung der Bandstruktur ihr Vorzeichen wechselt.

Stier [Sti01] hat einen in diesem Sinne konformen Bandstruktur-Parametersatz durch Anfitten des Hamiltonian an die reale Bandstruktur auf einem größeren Teil der Brillouin-Zone ( $\approx 20\%$ ) als des üblicher Weise benutzten Zonenzentrums bestimmt. Diese Effektivparameter erfüllen die in Voraussetzung 3.2 in Kapitel 3.1 geforderten Bedingungen, die sicherstellen, dass keine Bandlücken-Lösungen auftreten.

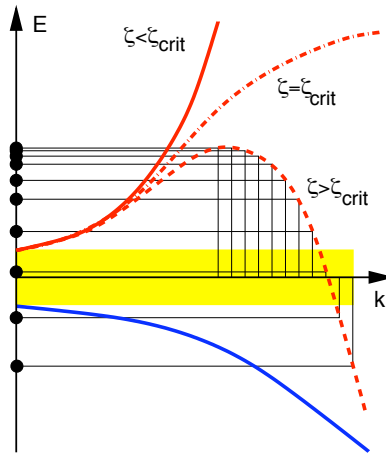


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung der Krümmung der Energiebänder in Abhängigkeit vom Verhältnis  $\zeta = E_p/E_g$ . Für den Fall  $\zeta > \zeta_{krit}$  wechselt die Krümmung für große Wellenvektoren  $k$  ihr Vorzeichen und wird somit anomal. Im Falle von Heterostrukturen führt dieses Verhalten zu einer Verschmutzung des Spektrums durch unphysikalische Lösungen, die als Spurious Solutions bezeichnet werden. Diese können sogar als Lösungen zu Energien in der Bandlücke auftreten.

Wir haben einen konformen Parametersatz durch Reskalierung erhalten, siehe Kapitel 5.6.



# Kapitel 3

## Analysis

Dieses Kapitel definiert die kp-Schrödingeroperatoren mathematisch als Operatoren zwischen den Sobolev-Räumen  $W_0^{1,2}$  und  $W_0^{-1,2}$ . Auf dieser Formulierung aufbauend, werden deren Eigenschaften eingehend untersucht.

### 3.1 Formulierung des Problems

Ziel dieses Abschnitts ist es, den kp-Schrödingeroperator mathematisch präzise als Operator zwischen geeigneten Funktionenräumen zu definieren. Dies wird für die einzelnen Anteile des Operators getrennt geschehen, da wir im Folgenden die resultierenden Operatoren in ihrer Relation zueinander untersuchen wollen.

Mit  $L^2$  bezeichnen wir den Raum der quadratintegriblen Funktionen auf dem endlichen Intervall  $\Omega = (x_0, x_{L+1})$  mit Funktionswerten in  $\mathbb{C}^d$ , ausgestattet mit der Standardnorm. Dieses Intervall beschreibt das in Abschnitt 2.2.3 diskutierte Simulationsgebiet.

Mit  $W_0^{1,2}(\Omega; \mathbb{C}^d)$  oder kurz  $W_0^{1,2}$  bezeichnen wir den Sobolev-Raum der Funktionen auf dem Intervall  $\Omega$  mit Funktionswerten in  $\mathbb{C}^d$ , die eine quadratintegrible (verallgemeinerte) Ableitung besitzen und an beiden Enden des Intervalls homogene Dirichlet Randbedingungen erfüllen. Wir betrachten  $W_0^{1,2}$  ausgestattet mit der Norm

$$\|\psi\|_{W_0^{1,2}} = \sqrt{\int_{\Omega} \left\| \frac{d\psi}{dx}(x) \right\|_{\mathbb{C}^d}^2 dx}, \quad (3.1)$$

wobei mit  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{C}^d}$  die kanonische Bilinearform auf  $\mathbb{C}^d$  bezeichnet wird und mit  $\|\cdot\|_{\mathbb{C}^d}$  deren zugeordnete Norm. Mit  $W_0^{-1,2}$  bezeichnen wir den Dualraum von  $W_0^{1,2}$ , d. h. den Raum der Antilinearformen auf  $W_0^{1,2}$ . Mit  $\langle \cdot, \cdot \rangle := \langle \cdot, \cdot \rangle_{W_0^{-1,2}, W_0^{1,2}}$  bezeichnen wir die duale Paarung beider Räume, die das Skalarprodukt auf  $L^2$  erweitert, vgl. z. B. [Ber78]. Für die  $L^2$ -Norm sowie die Norm (3.1) zusammen mit der induzierten Norm auf  $W_0^{-1,2}$  gilt die folgende Interpolationsungleichung:

$$\|\psi\|_{L^2} \leq \|\psi\|_{W_0^{1,2}}^{\frac{1}{2}} \|\psi\|_{W_0^{-1,2}}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.2)$$

$\mathcal{B}(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$  bezeichnet den Banachraum der beschränkten linearen Operatoren, die den Banachraum  $\mathcal{X}$  in den Banachraum  $\mathcal{Y}$  abbilden. Seine induzierte Norm ist definiert durch

$$\|A\|_{\mathcal{B}(\mathcal{X}, \mathcal{Y})} = \sup_{X \in \mathcal{X}, \|X\|_{\mathcal{X}} = 1} \|AX\|_{\mathcal{Y}}.$$

Für  $\mathcal{B}(\mathcal{X}, \mathcal{X})$  verwenden wir als Kurzform  $\mathcal{B}(\mathcal{X})$ . Falls  $\mathcal{X}$  ein separabler Banachraum ist, dann bezeichnen wir mit  $L^\infty(\Omega, \mathcal{X})$  den Raum der Lebesgue-messbaren, wesentlich beschränkten Funktionen mit Funktionswerten in  $\mathcal{X}$  ausgestattet mit der Norm

$$\|f\|_{L^\infty(\Omega, \mathcal{X})} = \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} \|f(x)\|_{\mathcal{X}}.$$

Die Koeffizienten des Schrödingeroperators haben die folgenden Eigenschaften:

**Voraussetzung 3.1.** *Alle Koeffizienten sind wesentlich beschränkte Funktionen, d. h.*

$$m_j \in L^\infty(\Omega, \mathbb{R}), \quad e_j \in L^\infty(\Omega, \mathbb{R}), \quad j = 1, \dots, d,$$

$$\begin{aligned} M_\alpha &\in L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d)), & \alpha &\in \{0, 1, 2\}, \\ U_\alpha &\in L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d)), & \alpha &\in \{1, 2\}, \\ U_{\alpha\beta} &\in L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d)), & \alpha, \beta &\in \{1, 2\}, \\ v &\in L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d)). \end{aligned}$$



**Voraussetzung 3.2.** Die Menge der Bandindices ist eine disjunkte Vereinigung  $\{1, \dots, d\} = D_+ \cup D_-$  der Leitungs- und Valenzbänder, d. h.

$$\begin{aligned} \min_{j \in D_+} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} m_j(x) &> 0, & \max_{j \in D_-} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} m_j(x) &< 0, \\ \min_{j \in D_+} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} e_j(x) &> 0, & \max_{j \in D_-} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} e_j(x) &< 0. \end{aligned}$$

$D_+$  oder  $D_-$  können leer sein.

**Voraussetzung 3.3.** Für fast alle  $x \in \Omega$  und alle  $\alpha, \beta \in \{1, 2\}$  sind die Operatoren  $U_\alpha(x)$ ,  $U_{\alpha\beta}(x)$ , und  $v(x)$  selbstadjungiert über  $\mathbb{C}^d$ .

**Voraussetzung 3.4.** Es gibt eine endliche, disjunkte Zerlegung

$$x_0 < x_1 < \dots < x_L < x_{L+1} \quad (3.3)$$

des Intervalls  $\Omega = (x_0, x_{L+1})$ , so dass die Funktionen  $m_j$ ,  $j = 1, \dots, d$ , und  $M_\alpha$ ,  $\alpha = 0, 1, 2$ , jeweils genau einen Wert  $\widehat{m}_{j,l}$  und  $\widehat{M}_{\alpha,l}$  auf jedem der Teilintervalle  $[x_l, x_{l+1})$  annehmen.

Für kp-Schrödingeroperatoren, die sowohl Valenz- als auch Leitungsbande beschreiben, haben die Indexmengen  $D_+$  und  $D_-$  eine physikalische Bedeutung: bei den Indices aus  $D_-$  zugeordneten Klasse-A Bändern handelt es sich um Valenzbänder und bei denen aus  $D_+$  um Leitungsbande. Die Voraussetzung 3.2 bedeutet in diesem Fall, dass das Maximum der effektiven Valenzbandkanten strikt negativ und das Minimum der effektiven Leitungsbandkanten strikt positiv ist. Idealerweise befindet sich die Mitte der effektiven Bandlücke der Quantenschicht am Nullpunkt.

**Definition 3.5.** Wir definieren die verschiedenen Teile des kp-Schrödingeroperators als Operatoren von  $W_0^{1,2}$  nach  $W_0^{-1,2}$ , d. h. im Sinne von Formen. Wir beginnen mit dem Differentialoperator zweiter Ordnung

$$\langle H\varphi, \psi \rangle = \sum_{j=1}^d \int_{\Omega} m_j \frac{d\varphi_j}{dx} \frac{d\bar{\psi}_j}{dx} dx. \quad (3.4)$$

Die Differentialoperatoren erster Ordnung definieren wir als

$$\begin{aligned} \langle A_\alpha \varphi, \psi \rangle &= \int_{\Omega} \left\langle M_\alpha(x) \frac{d\varphi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} \\ &+ \left\langle M_\alpha^*(x) \varphi(x), \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx, \quad \alpha = 0, 1, 2, \end{aligned} \quad (3.5)$$

und die Differentialoperatoren nullter Ordnung als

$$\langle B_\alpha \varphi, \psi \rangle = \int_\Omega \langle U_\alpha(x) \varphi(x), \psi(x) \rangle_{\mathbb{C}^d} dx, \quad \alpha = 1, 2, \quad (3.6)$$

$$\langle B_{\alpha\beta} \varphi, \psi \rangle = \int_\Omega \langle U_{\alpha\beta}(x) \varphi(x), \psi(x) \rangle_{\mathbb{C}^d} dx, \quad \alpha, \beta = 1, 2, \quad (3.7)$$

$$\langle V \varphi, \psi \rangle = \sum_{j=1}^d \int_\Omega \langle v(x) \varphi(x), \psi(x) \rangle_{\mathbb{C}^d} dx, \quad (3.8)$$

$$\langle E \varphi, \psi \rangle = \sum_{j=1}^d \int_\Omega e_j \varphi_j(x) \bar{\psi}_j(x) dx, \quad (3.9)$$

wobei die Funktionen  $\varphi$  und  $\psi$  aus  $W_0^{1,2}$  sind. Der  $kp$ -Schrödingeroperator ist definiert durch

$$H_{\mathbf{k}} = H + T_{\mathbf{k}}, \quad (3.10a)$$

$$T_{\mathbf{k}} = A_0 + \sum_{\alpha=1,2} k_\alpha A_\alpha + \sum_{\alpha=1,2} k_\alpha B_\alpha + \sum_{\alpha,\beta=1,2} k_\alpha k_\beta B_{\alpha\beta} + V + E, \quad (3.10b)$$

wobei  $\mathbf{k} = (k_1, k_2) \in \mathbb{C}^2$  der reduzierte Wellenvektor ist.

Die Terme in (3.10) können physikalisch interpretiert werden:

- $E$  repräsentiert die Basisenergien der beteiligten Klasse-A-Bänder und ggf. Anteile der Confinement-Potentiale, die durch die Heterostruktur gegeben sind.
- $V$  beinhaltet ggf. weitere Confinement-Potentiale, den Einfluss von mechanischer Verspannung der Materialien und ggf. die Spin-Bahn-Wechselwirkung, vgl. z. B. Anhang A.1 oder Kapitel 5.3.
- Die Operatoren

$$A_0 + \sum_{\alpha=1,2} k_\alpha B_\alpha \quad \text{und} \quad H + \sum_{\alpha=1,2} k_\alpha A_\alpha + \sum_{\alpha,\beta=1,2} k_\alpha k_\beta B_{\alpha\beta}$$

beschreiben jeweils die  $kp$ -Wechselwirkungen erster und zweiter Ordnung. Sie repräsentieren, z. B. im Achtband-Modell für Materialien mit Diamant- oder Zinkblende-Kristallstruktur, jeweils die Interband- und Intra-Bandkopplung.

In Abschnitt 3.3 werden wir allgemeine Eigenschaften der Operatorfamilie  $\{H_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k} \in \mathbb{C}^2}$  beweisen. Insbesondere sagt Theorem 3.8 aus, dass die spektralen Eigenschaften von  $\{H_{\mathbf{k}}\}$  analytisch von  $\mathbf{k}$  abhängen. Auf  $W_0^{-1,2}$  sind die Operatoren  $H_{\mathbf{k}}$  nicht selbstadjungiert. Jedoch ist für  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  die Einschränkung  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  ein selbstadjungierter Operator auf  $L^2$ , vgl. Theorem 3.9. Leider verhalten sich die Operatoren  $H_{\mathbf{k}}$  im  $L^2$ -Kontext wesentlich irregulärer als über  $W_0^{-1,2}$ . Insbesondere hängt der Definitionsbereich von  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  im Allgemeinen von  $\mathbf{k}$  ab, vgl. Theorem 3.9 und Theorem 3.11. Aussagen zur Abhängigkeit der spektralen Eigenschaften von  $\mathbf{k}$  in dieser Situation finden sich in Theorem 3.12. Zudem kann man mit Hilfe der Voraussetzungen 3.16 und 3.17 bzw. 3.16 und 3.22 jeweils quantitative Abschätzungen für die spektrale Lücke in den Daten des Problems gewinnen, vgl. Theorem 3.18 und Theorem 3.24. Abschnitt 3.6 befasst sich mit einer Regularisierung der kp-Schrödingeroperatoren, für die die globale Existenz der Eigenwertkurven bewiesen werden kann, wobei asymptotisch die spektralen Eigenschaften der  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  erhalten bleiben, vgl. Theorem 3.32.

## 3.2 Der Konjugationsoperator $\Theta$

Zentrales Mittel für die Untersuchung der Spektraleigenschaften ist die Aufspaltung des im allgemeinen indefiniten kp-Schrödingeroperators (3.10) in einen von  $\mathbf{k}$  unabhängigen Hauptteil  $H$ , der bei Null eine spektrale Lücke aufweist, und die Bandwechselwirkungen  $T_{\mathbf{k}}$ . Durch Spiegelung des Hauptteils  $H$  an der Mitte der Bandlücke erhält man einen elliptischen Operator. Dazu führen wir auf  $\mathbb{C}^d$  den Konjugationsoperator  $\tilde{\Theta}$  ein:

$$\tilde{\Theta}(c_1, \dots, c_d) = (r_1 c_1, \dots, r_d c_d), \quad r_j = \begin{cases} 1 & \text{für } j \in D_+, \\ -1 & \text{für } j \in D_-. \end{cases} \quad (3.11)$$

Dieser induziert den Konjugationsoperator  $\Theta : W_0^{-1,2} \longrightarrow W_0^{-1,2}$ . Die Einschränkungen von  $\Theta$  auf  $L^2$  und  $W_0^{1,2}$  bezeichnen wir ebenfalls mit  $\Theta$ . Einige Eigenschaften von  $\Theta$ , die sich einfach nachrechnen lassen, sind:

- i)  $\Theta$  ist auf jedem der Räume  $W_0^{1,2}$ ,  $L^2$  und  $W_0^{-1,2}$  eine idempotente Isometrie.
- ii) Für alle  $\psi \in W_0^{-1,2}$  und  $\varphi \in W_0^{1,2}$  gilt

$$\langle \Theta\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, \Theta\varphi \rangle.$$

Insbesondere ist  $\Theta$  auf  $L^2$  die Differenz zweier Orthogonalprojektionen und deshalb selbstadjungiert.

iii)  $\Theta$  kommutiert mit den Operatoren  $H$  und  $E$  aus Definition 3.5.

Für  $D_- = \emptyset$  ist  $\tilde{\Theta}$  der Identitätsoperator auf  $\mathbb{C}^d$  und die induzierten Operatoren  $\Theta$  sind dann die Identitätsoperatoren auf  $W_0^{-1,2}$ ,  $L^2$  und  $W_0^{1,2}$ . Wir führen für diese Identitätsoperatoren keine besondere Notation ein, sondern schreiben dann  $\mathbb{1}_{W_0^{-1,2}}$ ,  $\mathbb{1}_{L^2}$  und  $\mathbb{1}_{W_0^{1,2}}$ .

Mit Hilfe des Konjugationsoperators können wir den kp-Schrödingeroperator  $H_{\mathbf{k}}$  (3.10) folgendermaßen in seine Interband- und Intraband-Anteile zerlegen

$$H_{\mathbf{k}} = H_{\mathbf{k},inter} + H_{\mathbf{k},intra} \quad (3.12)$$

mit

$$H_{\mathbf{k},inter} = \frac{1}{2}(H_{\mathbf{k}} - \Theta H_{\mathbf{k}} \Theta) \quad \text{und} \quad H_{\mathbf{k},intra} = \frac{1}{2}(H_{\mathbf{k}} + \Theta H_{\mathbf{k}} \Theta). \quad (3.13)$$

### 3.3 Allgemeine Eigenschaften von kp-Schrödingeroperatoren

Im Allgemeinen werden wir die kp-Schrödingeroperatoren und deren Teile im Hilbertraum  $W_0^{-1,2}$  betrachten. Als erstes stellen wir zwei Lemmata vor und beweisen diese mit Methoden, mit denen viele unserer Resultate zu den kp-Schrödingeroperatoren bewiesen werden können.

**Lemma 3.6.** *Für jedes  $\xi \in \mathbb{R}$  liefert der Operator  $H + i\xi$  einen topologischen Isomorphismus zwischen  $W_0^{1,2}$  und  $W_0^{-1,2}$ , oder mit anderen Worten,  $W_0^{1,2}$  ist der Definitionsbereich von  $H + i\xi$ .  $H$  hat eine kompakte Resolvente in  $\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{-1,2})$  und deshalb ein reines Punktspektrum, vgl. Kato [Kat84, III.6.29]. Zudem gelten die Abschätzungen*

$$\sup_{\xi \in \mathbb{R}} \|H(H + i\xi)^{-1}\|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{-1,2})} \leq \frac{\max_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} < \infty, \quad (3.14)$$

und

$$\begin{aligned} & \| (H + i\xi)^{-1} \|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{-1,2})} \\ & \leq \frac{1}{|\xi|} \left( 1 + \frac{\max_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} \right), \quad 0 \neq \xi \in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

*Beweis.* Betrachten wir die dem Operator  $\Theta(H + i\xi)$  zugeordnete quadratische Form

$$\psi \longmapsto \langle \Theta(H + i\xi)\psi, \psi \rangle = \sum_{j=1}^d \int_{\Omega} |m_j| \left| \frac{d\psi_j}{dx} \right|^2 dx + i\xi \langle \Theta\psi, \psi \rangle_{L^2}. \quad (3.16)$$

Für diese Form erhält man als Abschätzung von unten

$$|\langle \Theta(H + i\xi)\psi, \psi \rangle| \geq \|\psi\|_{W_0^{1,2}}^2 \min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|.$$

Das impliziert, dass die Form  $W_0^{1,2}$ -elliptisch ist und ihre Elliptizitätskonstante nicht kleiner als  $\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|$  ist. Daraus folgt nach dem Lax–Milgram Lemma die Surjektivität von  $\Theta(H + i\xi)$  und es gilt die folgende Abschätzung für die Resolvente entlang der imaginären Achse:

$$\begin{aligned} \| (H + i\xi)^{-1} \|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{1,2})} &= \| \Theta(H + i\xi)^{-1} \|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{1,2})} \\ &\leq \frac{1}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Das beweist, dass  $(H + i\xi) : W_0^{1,2} \rightarrow W_0^{-1,2}$  ein topologischer Isomorphismus ist.

Die Einbettungen  $W_0^{1,2} \hookrightarrow L^2$  und  $L^2 \hookrightarrow W_0^{-1,2}$  sind jeweils kompakt. Damit existiert eine kompakte Einbettung von  $W_0^{1,2}$  in  $W_0^{-1,2}$ . Daraus folgt die Kompaktheit der Resolvente von  $H$  in  $\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{-1,2})$ .

Die Abschätzung (3.14) folgert man durch Kombination der Abschätzung für die Resolvente (3.17) mit der Ungleichung

$$\|H\|_{\mathcal{B}(W_0^{1,2}, W_0^{-1,2})} \leq \max_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |m_j(x)|. \quad (3.18)$$

(3.15) erhält man aus (3.14) und der Abschätzung

$$\begin{aligned} \|(H + i\xi)^{-1}\|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{-1,2})} &= \frac{1}{|\xi|} \|i\xi(H + i\xi)^{-1}\|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{-1,2})} \\ &\leq \frac{1}{|\xi|} \left(1 + \|H(H + i\xi)^{-1}\|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{-1,2})}\right). \end{aligned}$$

□

**Lemma 3.7.** *Die Operatoren  $A_\alpha$ ,  $\alpha \in \{0, 1, 2\}$ ,  $B_\alpha$ ,  $B_{\alpha\beta}$ ,  $\alpha, \beta \in \{1, 2\}$ ,  $V$  und  $E$  (vgl. Definition 3.5) in  $W_0^{-1,2}$  sind relativ beschränkt bezüglich  $H$  und ihre Relativschranken sind Null.*

*Beweis.* Wir beginnen mit den Operatoren erster Ordnung. Sei  $\varphi$  ein beliebiges Element aus  $W_0^{1,2}$ , dem Definitionsbereich von  $H$ :

$$\begin{aligned} \|A_\alpha \varphi\|_{W_0^{-1,2}} &= \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} |\langle A_\alpha \varphi, \psi \rangle| \\ &= \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} \left| \int_{\Omega} \left\langle M_\alpha(x) \frac{d\varphi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Omega} \left\langle M_\alpha^*(x) \varphi(x), \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \right|. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Wenn  $\widehat{M}_{\alpha,l}$  den konstanten Wert der Funktion  $M_\alpha$  auf dem Intervall  $[x_l, x_{l+1})$  (vgl. Voraussetzung 3.4) bezeichnet, dann können wir das erste Integral mittels partieller Integration folgendermaßen umschreiben:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left\langle M_\alpha(x) \frac{d\varphi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx &= - \int_{\Omega} \left\langle M_\alpha(x) \varphi(x), \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \\ &\quad + \sum_{l=1}^L \left\langle (\widehat{M}_{\alpha,l-1} - \widehat{M}_{\alpha,l}) \varphi(x_l), \psi(x_l) \right\rangle_{\mathbb{C}^d}. \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass die rechte Seite von (3.19) nicht größer ist als

$$\begin{aligned} & \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} \left| \int_{\Omega} \left\langle (M_{\alpha}^*(x) - M_{\alpha}(x))\varphi(x), \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \right| \\ & \quad + \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} \left| \sum_{l=1}^L \left\langle (\widehat{M}_{\alpha,l-1} - \widehat{M}_{\alpha,l})\varphi(x_l), \psi(x_l) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} \right|. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Der erste Term kann mittels der Interpolationsungleichung (3.2) folgendermaßen weiter abgeschätzt werden:

$$\begin{aligned} & \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} \left| \int_{\Omega} \left\langle (M_{\alpha}^*(x) - M_{\alpha}(x))\varphi(x), \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \right| \\ & \leq 2\|M_{\alpha}\|_{L^{\infty}(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \|\varphi\|_{L^2} \\ & \leq 2\|M_{\alpha}\|_{L^{\infty}(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \|\varphi\|_{W_0^{1,2}}^{\frac{1}{2}} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Unter Benutzung von (3.17) erhält man die Abschätzung

$$\|\varphi\|_{W_0^{1,2}}^{\frac{1}{2}} \leq \sqrt{\frac{1}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}} \|H\varphi\|_{W_0^{-1,2}}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.22)$$

Mit Hilfe der Youngschen Ungleichung können wir nun die rechte Seite von (3.21) für alle  $\delta > 0$  nach oben abschätzen durch

$$\delta \|H\varphi\|_{W_0^{-1,2}} + \frac{1}{\delta} \frac{\|M_{\alpha}\|_{L^{\infty}(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}^2}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}}.$$

Sei mit  $C(\overline{\Omega}; \mathbb{C}^d)$  der Raum der  $\mathbb{C}^d$ -wertigen, stetigen Funktionen über  $\overline{\Omega}$  bezeichnet. Elementare Rechnungen zeigen, dass die Einbettungskonstante von  $W_0^{1,2}$  nach  $C(\overline{\Omega}; \mathbb{C}^d)$  die Zahl  $\sqrt{\frac{|\Omega|}{2}}$  nicht überschreitet. Unter Verwendung dieser Eigenschaft lässt sich nachvollziehen, dass der zweite Term von (3.20) nicht größer ist als

$$\begin{aligned} & \sum_{l=1}^L \|\widehat{M}_{\alpha,l-1} - \widehat{M}_{\alpha,l}\|_{\mathcal{B}(\mathbb{C}^d)} \|\varphi\|_{C(\overline{\Omega}; \mathbb{C}^d)} \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} \|\psi\|_{C([0,\hat{x}]; \mathbb{C}^d)} \\ & \leq \sqrt{\frac{|\Omega|}{2}} \|\varphi\|_{C(\overline{\Omega}; \mathbb{C}^d)} \sum_{l=1}^L \|\widehat{M}_{\alpha,l-1} - \widehat{M}_{\alpha,l}\|_{\mathcal{B}(\mathbb{C}^d)}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Mit Hilfe der Abschätzung

$$\|\varphi\|_{C(\bar{\Omega}; \mathbb{C}^d)} \leq \sqrt{2} \|\varphi\|_{W_0^{1,2}}^{\frac{1}{2}} \|\varphi\|_{L^2}^{\frac{1}{2}}$$

und der Interpolationsungleichung (3.2) zur Abschätzung der  $L^2$ -Norm können wir die linke Seite von (3.23) weiter abschätzen und erfahren auf diese Weise, dass der zweite Term in (3.20) nicht größer ist als

$$\begin{aligned} & |\Omega|^{\frac{1}{2}} \|\varphi\|_{W_0^{1,2}}^{\frac{3}{4}} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}}^{\frac{1}{4}} \sum_{l=1}^L \|\widehat{M}_{\alpha,l-1} - \widehat{M}_{\alpha,l}\|_{\mathcal{B}(\mathbb{C}^d)} \\ & \leq |\Omega|^{\frac{1}{2}} \min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|^{-\frac{3}{4}} \|H\varphi\|_{W_0^{-1,2}}^{\frac{3}{4}} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}}^{\frac{1}{4}} \sum_{l=1}^L \|\widehat{M}_{\alpha,l-1} - \widehat{M}_{\alpha,l}\|_{\mathcal{B}(\mathbb{C}^d)} \\ & \leq \frac{3}{4} \delta \|H\varphi\|_{W_0^{-1,2}} + \frac{|\Omega|^2}{4\delta^3} \frac{\left(\sum_{l=1}^L \|\widehat{M}_{\alpha,l-1} - \widehat{M}_{\alpha,l}\|_{\mathcal{B}(\mathbb{C}^d)}\right)^4}{\left(\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|\right)^3} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}}, \end{aligned}$$

für alle  $\delta > 0$ , (Youngsche Ungleichung). Also haben wir bewiesen, dass die Operateureile erster Ordnung  $A_\alpha$  von  $H_{\mathbf{k}}$  relativ beschränkt sind bezüglich des Operateureils zweiter Ordnung  $H$  und dass die zugehörigen Konstanten beliebig klein gewählt werden können.

Jetzt zeigen wir das Gleiche für die Anteile nullter Ordnung von  $H_{\mathbf{k}}$ :

$$\begin{aligned} \|B_\alpha \varphi\|_{W_0^{-1,2}} &= \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} |\langle B_\alpha \varphi, \psi \rangle| \\ &= \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} \left| \int_{\Omega} \langle U_\alpha(x) \varphi(x), \psi(x) \rangle_{\mathbb{C}^d} dx \right| \\ &\leq \|U_\alpha\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \|\varphi\|_{L^2} \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} \|\psi\|_{L^2}. \quad (3.24) \end{aligned}$$

Die Einbettungskonstante von  $W_0^{1,2}$  nach  $L^2$  ist gleich  $|\Omega|/\pi$ . Daher kann man den letzten Faktor in (3.24) mit dieser Zahl abschätzen. Unter Benutzung der



Interpolationsungleichung (3.2), der Abschätzung (3.22) und der Youngschen Ungleichung kann (3.24) folgendermaßen weiter abgeschätzt werden:

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{|\Omega|}{\pi} \|U_\alpha\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \|\varphi\|_{W_0^{1,2}}^{\frac{1}{2}} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}}^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \frac{|\Omega|}{\pi} \|U_\alpha\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \sqrt{\frac{1}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}} \|H\varphi\|_{W_0^{-1,2}}^{\frac{1}{2}} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}}^{\frac{1}{2}} \\
&\leq \frac{\delta}{2} \|H\varphi\|_{W_0^{-1,2}} + \frac{|\Omega|^2}{2\pi^2\delta} \frac{\|U_\alpha\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}^2}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}},
\end{aligned}$$

wobei  $\delta$  eine beliebige positive Zahl ist. Auf die gleiche Weise zeigt man

$$\|B_{\alpha\beta} \varphi\|_{W_0^{-1,2}} \leq \frac{\delta}{2} \|H\varphi\|_{W_0^{-1,2}} + \frac{|\Omega|^2}{2\pi^2\delta} \frac{\|U_{\alpha\beta}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}^2}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}},$$

$$\|V\varphi\|_{W_0^{-1,2}} \leq \frac{\delta}{2} \|H\varphi\|_{W_0^{-1,2}} + \frac{|\Omega|^2}{2\pi^2\delta} \frac{\|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}^2}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}}$$

und

$$\|E\varphi\|_{W_0^{-1,2}} \leq \frac{\delta}{2} \|H\varphi\|_{W_0^{-1,2}} + \frac{|\Omega|^2}{2\pi^2\delta} \frac{\left(\max_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |e_j|\right)^2}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} \|\varphi\|_{W_0^{-1,2}}.$$

□

Auf Grundlage dieser Lemmata können wir jetzt folgende Aussagen über den  $\text{kp}$ -Schrödingeroperator (3.10a) aus Definition 3.5 beweisen:

**Theorem 3.8.** i) Für jedes  $\mathbf{k} \in \mathbb{C}^2$  hat der Operator  $H_{\mathbf{k}}$  aus Definition 3.5 den gleichen Definitionsbereich wie  $H$ , nämlich  $W_0^{1,2}$ , und alle diese Operatoren von  $W_0^{1,2}$  nach  $W_0^{-1,2}$  sind beschränkt.

ii) Für alle  $\psi \in W_0^{1,2}$  ist die Abbildung

$$\mathbb{C}^2 \ni \mathbf{k} \longmapsto H_{\mathbf{k}}\psi$$

analytisch. Deshalb ist für jede eindimensionale komplexe analytische Untermannigfaltigkeit  $\mathcal{S}$  aus  $\mathbb{C}^2$  die Operatorfamilie  $\{H_{\mathbf{k}}\}_{\{\mathbf{k} \in \mathcal{S}\}}$  eine holomorphe Operatorfamilie vom Typ (A), vgl. Kato [Kat84, VII.2].

iii) Sei für festes  $\mathbf{k} \in \mathbb{C}^2$  und für

$$b < \frac{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}{\max_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}$$

eine Konstante  $a = a(\mathbf{k}, b)$  gegeben, so dass für alle  $\psi \in W_0^{1,2} = \operatorname{dom}(H)$  gilt:

$$\|T_{\mathbf{k}}\psi\|_{W_0^{-1,2}} \leq a \|\psi\|_{W_0^{-1,2}} + b \|H\psi\|_{W_0^{-1,2}}.$$

(Nach Lemma 3.7 existiert ein solches  $a$  für jedes positive  $b$ .) Wenn  $\xi \in \mathbb{R}$

$$|\xi| > \frac{a \left( 1 + \frac{\max_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} \right)}{1 - b \frac{\max_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}} \quad (3.25)$$

erfüllt, dann gehört  $i\xi$  zur Resolventenmenge von  $H_{\mathbf{k}}$ .

Zudem ist die Resolvente von  $H_{\mathbf{k}}$  kompakt. Infolgedessen, vgl. Kato [Kat84, III.6.29], besteht das Spektrum von  $H_{\mathbf{k}}$  nur aus höchstens abzählbar vielen Eigenwerten mit endlicher Vielfachheit, welche keinen Häufungspunkt im Endlichen besitzen.

*Beweis.* (i) Die erste Aussage folgt aus Lemma 3.7 und einem wohlbekanntem Störungstheorem für relativ beschränkte Operatoren, vgl. Kato [Kat84, IV.1.1].

(ii) Es ist ausreichend zu beweisen, dass für alle  $k_{\alpha} \in \mathbb{C}$  und für alle  $\psi \in W_0^{1,2}$  die beiden Abbildungen

$$\mathbb{C} \ni k_{\beta} \longmapsto H_{(k_{\alpha}, k_{\beta})}\psi \quad \text{und} \quad \mathbb{C} \ni k_{\beta} \longmapsto H_{(k_{\beta}, k_{\alpha})}\psi \quad (3.26)$$

schwach analytisch in  $W_0^{-1,2}$  sind. Das impliziert nach Kato [Kat84, III.1.37], dass die Abbildungen sogar stark analytisch sind. Nun liefert Hartog's Theorem [Hör66, 2.2.8] die Analytizität der Abbildungen  $\mathbf{k} \mapsto H_{\mathbf{k}}\psi$ .

Die schwache Analytizität der in (3.26) eingeführten Abbildungen folgt direkt aus der Definition 3.5 der Operatorfamilie  $H_{\mathbf{k}}$ .

(iii) Die Bedingung (3.25) ist äquivalent zu der Ungleichung

$$\frac{a}{|\xi|} \left( 1 + \frac{\max_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} \right) + b \frac{\max_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} < 1.$$

Aus den Abschätzungen (3.14) und (3.15) folgt, dass für alle  $\xi \in \mathbb{R}$ , die der Bedingung (3.25) genügen, die Ungleichung

$$a \|(H - i\xi)^{-1}\|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{-1,2})} + b \|H(H - i\xi)^{-1}\|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{-1,2})} < 1$$

gilt. Nun folgen die Behauptungen aus einem wohlbekannten Stabilitätstheorem, vgl. Kato [Kat84, IV.3.17].  $\square$

Theorem 3.8 sagt insbesondere aus, dass die Spektraleigenschaften des Operators  $H_{\mathbf{k}}$  in der Tat analytisch von  $\mathbf{k}$  abhängen, oder mit anderen Worten, die Theoreme 1.7, 1.8, 1.9 aus [Kat84, VII.1] sind auf unsere Situation anwendbar.

Nun betrachten wir die Einschränkung des Operators  $H_{\mathbf{k}}$  auf den Raum  $L^2$ .

**Theorem 3.9.** i) *Für jeden Vektor  $\mathbf{k} = (k_1, k_2) \in \mathbb{R}^2$  ist der Operator  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  selbstadjungiert und hat eine kompakte Resolvente. Infolgedessen existiert eine Orthonormalbasis aus Eigenfunktionen in  $L^2$ .*

ii) *Unter Verwendung der Bezeichnungen aus Voraussetzung 3.4 kann der Definitionsbereich von  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  wie folgt beschrieben werden:*

$$\begin{aligned} \operatorname{dom}(H_{\mathbf{k}}|_{L^2}) = W_0^{1,2} \cap \left\{ \varphi \mid \varphi|_{(x_l, x_{l+1})} \in W^{2,2}((x_l, x_{l+1})) \text{ für } l = 0, \dots, L, \right. \\ \left. \widehat{m}_l \lim_{\substack{x \rightarrow x_l \\ x > x_l}} \frac{d\varphi}{dx}(x) - \widehat{m}_{l-1} \lim_{\substack{x \rightarrow x_l \\ x < x_l}} \frac{d\varphi}{dx}(x) + (\widehat{M}_{0,l}^* - \widehat{M}_{0,l-1}^*)\varphi(x_l) \right. \\ \left. + \sum_{\alpha=1,2} k_\alpha (\widehat{M}_{\alpha,l}^* - \widehat{M}_{\alpha,l-1}^*)\varphi(x_l) = 0, \text{ für } l = 1, \dots, L \right\}. \quad (3.27) \end{aligned}$$

iii) *Das Spektrum von  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  ist das Gleiche wie das von  $H_{\mathbf{k}}$ . Somit hängt dieses lokal analytisch von  $\mathbf{k}$  ab, wie in Theorem 3.8 angegeben.*

iv) *Die Resolvente von  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  ist nuklear.*

v) *Für jedes  $\mathbf{k} \in \mathbb{C}^2$  ist die geometrische Vielfachheit der Eigenwerte höchstens  $d$ . Falls  $\mathbf{k}$  aus  $\mathbb{R}^2$  ist, stimmt die geometrische mit der algebraischen Vielfachheit der Eigenwerte überein.*

*Beweis.* (i) Aus Punkt iii) von Theorem 3.8 folgt die Existenz einer reellen Zahl  $\delta = \delta(\mathbf{k})$ , so dass

$$(H_{\mathbf{k}} + i\delta) : W_0^{1,2} \longrightarrow W_0^{-1,2} \quad (3.28)$$

ein topologischer Isomorphismus ist. Die Einschränkung von  $H_{\mathbf{k}} + i\delta$  auf  $L^2$  bleibt eine Surjektion. Aus dieser Eigenschaft und der Symmetrie von  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  für  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  folgt die behauptete Selbstadjungiertheit von  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$ , vgl. [AG81, IV.46 Satz 2]. Die Kompaktheit der Resolvente folgt aus der Isomorphie der Abbildung (3.28) und der Kompaktheit der Einbettung  $W_0^{1,2} \hookrightarrow L^2$ . Die Existenz einer Orthonormalbasis in  $L^2$  folgt aus einem klassischen Strukturtheorem für kompakte, selbstadjungierte Operatoren [AG81, V.61].

(ii)  $\varphi \in W^{2,2}((x_l, x_{l+1}))$  impliziert die Hölderstetigkeit der Ableitung  $\frac{d\varphi}{dx} \in C^\gamma([x_l, x_{l+1}])$ ,  $\gamma < 1/2$ , vgl. [EG92, Kap. 4.5, Th. 3]. Somit existieren die in (3.27) vorkommenden Grenzwerte. Die Behauptung folgt durch partielle Integration im distributionellen Sinne.

(iii) Spektralpunkte von  $H_{\mathbf{k}}$  und  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  müssen Eigenwerte sein. Zudem ist jede Eigenfunktion von  $H_{\mathbf{k}}$  auch Eigenfunktion für  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  und damit aus  $L^2$ .

(iv) Wenn  $\lambda$  ein Punkt aus der Resolventenmenge von  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  ist, dann ist  $\|(H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1}\|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{1,2})}$  endlich, vgl. Theorem 3.8 und Punkt (iii) des gegenwärtigen Theorems. Seien mit  $\mathbb{1}_{(W_0^{1,2} \hookrightarrow L^2)}$  und  $\mathbb{1}_{(L^2 \hookrightarrow W_0^{-1,2})}$  die Einbettungsoperatoren bezeichnet, und  $\|\cdot\|_1$  und  $\|\cdot\|_2$  jeweils die nukleare bzw. die Hilbert–Schmidt–Norm. Dann können wir die Nuklearnorm der Resolvente folgendermaßen abschätzen:

$$\begin{aligned} & \|(H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1}\|_1 \\ & \leq \|\mathbb{1}_{(W_0^{1,2} \hookrightarrow L^2)}\|_2 \|(H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1}\|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{1,2})} \|\mathbb{1}_{(L^2 \hookrightarrow W_0^{-1,2})}\|_2 < \infty. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Man beachte dabei, dass  $\mathbb{1}_{(W_0^{1,2} \hookrightarrow L^2)}$  und  $\mathbb{1}_{(L^2 \hookrightarrow W_0^{-1,2})} = \mathbb{1}_{(W_0^{1,2} \hookrightarrow L^2)}^*$  Hilbert–Schmidt–Operatoren sind, vgl. [Ber78, I Th. 3.2].

(v) Sei  $\lambda$  ein beliebiger Eigenwert des Operators  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  und seien  $\psi_1, \dots, \psi_{d+1}$  die zu  $\lambda$  zugehörigen Eigenfunktionen. Wir werden im Folgenden zeigen, dass diese Eigenfunktionen linear abhängig sind. Zu diesem Zweck schreiben wir jede der Gleichungen

$$(H_{\mathbf{k}} - \lambda)\psi_j = 0, \quad j = 1, \dots, d+1$$

in der üblichen Weise als System erster Ordnung um. Da die  $d+1$  Vektoren der Anfangswerte  $(x_0, \frac{d\psi_1}{dx}(x_0)), \dots, (x_0, \frac{d\psi_{d+1}}{dx}(x_0))$  aus  $\mathbb{C}^{2d}$  für dieses

System linear abhängig sein müssen, genügen sie einer linearen Relation. Es ist bekannt [Naj68, §6.3], dass die  $\mathbb{C}^{2d}$ -wertigen Funktionen  $(\psi_1, \frac{d\psi_1}{dx}), \dots, (\psi_{d+1}, \frac{d\psi_{d+1}}{dx})$  auf dem gesamten Intervall  $(x_0, x_1]$  derselben linearen Relation genügen und dass insbesondere diese Relation für die Vektoren

$$\left(\psi_1(x_1), \lim_{\substack{x \rightarrow x_1 \\ x < x_1}} \frac{d\psi_1}{dx}(x)\right), \dots, \left(\psi_{d+1}(x_1), \lim_{\substack{x \rightarrow x_1 \\ x < x_1}} \frac{d\psi_{d+1}}{dx}(x)\right)$$

gilt. Nun kann man zeigen, dass die den Definitionsbereich beschreibenden Übergangsbedingungen (3.27) zur Folge haben, dass diese lineare Relation auch für den Anfangsvektor des nächsten Intervalls  $[x_1, x_2)$  gilt. Dieses Argument lässt sich für die restlichen Teilintervalle wiederholen.

Wenn  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$ , dann ist  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  selbstadjungiert und infolgedessen stimmen die geometrischen und algebraischen Eigenräume überein [Kat84, V.3.5].  $\square$

**Bemerkung 3.10.** *Nach Punkt iii) von Theorem 3.9 ist für Funktionen  $\varphi$  aus dem Definitionsbereich von  $H_{\mathbf{k}}|_{L^2}$  (3.27) die Stetigkeit des Vektors*

$$m \frac{d}{dx} \varphi(x) - \left(M_0^* + \sum_{\alpha=1,2} k_{\alpha} M_{\alpha}^*\right) \varphi(x) \quad (3.30)$$

*beim Übergang zwischen zwei Materialien garantiert. Auf diese Weise kommt es zu einer Kopplung der Zustände an der Materialgrenze, s. Abschnitt 2.2.2.*

Leider stellt sich heraus, dass sich die Operatoren  $H_{\mathbf{k}}$  im  $L^2$ -Kontext sehr viel irregulärer verhalten als über  $W_0^{-1,2}$ . Wir fassen diese Eigenschaften in folgendem Theorem zusammen:

**Theorem 3.11.** i) *Sei*

$$\mathcal{D}_L = \text{dom}(H|_{L^2}) \cap \left\{ \psi \mid \psi(x_l) = 0, l = 1, \dots, L \right\}.$$

*Für alle  $\mathbf{k} \in \mathbb{C}^2$  gibt es die folgende Zerlegung*

$$\text{dom}(H_{\mathbf{k}}|_{L^2}) = \mathcal{D}_L \oplus X_{\mathbf{k}},$$

*wobei  $X_{\mathbf{k}} \subset W_0^{1,2}$  ein Vektorraum der Dimension  $dL$  ist, der von  $\mathbf{k}$  abhängt.*

ii) *Eingeschränkt auf den Unterraum  $\mathcal{D}_L$  sind die Operatoren  $A_\alpha$  aus Definition 3.5 relativ beschränkt hinsichtlich des Operators  $H|_{L^2}$  und die Relativschranken sind Null; genauer gesagt, gilt für jedes  $\varphi \in \mathcal{D}_L$ :*

$$\begin{aligned} \|A_\alpha \varphi\|_{L^2} &\leq \frac{\|M_\alpha - M_\alpha^*\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}}{\sqrt{\min_{j=1, \dots, d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}} \gamma_H \|H\varphi\|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \|\varphi\|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \\ &\leq \delta \|H\varphi\|_{L^2} + \frac{1}{4\delta} \frac{\|M_\alpha - M_\alpha^*\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}^2}{\min_{j=1, \dots, d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} \gamma_H^2 \|\varphi\|_{L^2}, \end{aligned}$$

wobei  $\delta$  eine positive Zahl und  $\gamma_H$  eine positive Interpolationskonstante ist, vgl. (3.32).

iii) *Auf  $\operatorname{dom}(H|_{L^2})$  kann man jedoch keine Relativschranken für  $A_\alpha|_{L^2}$  bezüglich  $H|_{L^2}$  finden.*

*Beweis.* (i) Die Behauptung folgt direkt aus Punkt ii) in Theorem 3.9.

(ii) Wenn  $\varphi \in \mathcal{D}_L$ , dann gilt

$$\begin{aligned} \|A_\alpha \varphi\|_{L^2} &= \sup_{\substack{\psi \in W_0^{1,2} \\ \|\psi\|_{L^2} = 1}} |\langle A_\alpha \varphi, \psi \rangle| \\ &= \sup_{\substack{\psi \in W_0^{1,2} \\ \|\psi\|_{L^2} = 1}} \left| \int_\Omega \left\langle M_\alpha(x) \frac{d\varphi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} + \left\langle M_\alpha^*(x) \varphi(x), \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \right| \\ &= \sup_{\substack{\psi \in W_0^{1,2} \\ \|\psi\|_{L^2} = 1}} \left| \int_\Omega \left\langle (M_\alpha(x) - M_\alpha^*(x)) \frac{d\varphi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \right| \\ &= \left\| (M_\alpha(x) - M_\alpha^*(x)) \frac{d\varphi}{dx} \right\|_{L^2} \leq \|M_\alpha - M_\alpha^*\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \left\| \frac{d\varphi}{dx} \right\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Wir fahren fort mit weiteren Abschätzungen:

$$\begin{aligned} \left\| \frac{d\varphi}{dx} \right\|_{L^2} &\leq \sqrt{\frac{\int_\Omega \langle m(x) \frac{d\varphi}{dx}(x), \Theta \frac{d\varphi}{dx}(x) \rangle_{\mathbb{C}^d} dx}{\min_{j=1, \dots, d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}} \\ &= \sqrt{\frac{\langle |H| \varphi, \varphi \rangle_{L^2}}{\min_{j=1, \dots, d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}} = \frac{\| |H|^{\frac{1}{2}} \varphi \|_{L^2}}{\sqrt{\min_{j=1, \dots, d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}}. \quad (3.31) \end{aligned}$$

$|H| = \Theta H$  ist ein strikt positiver, selbstadjungierter Operator. Damit können wir die Wurzel  $|H|^{1/2}$  von  $|H|$  definieren für die gilt  $|H| = (|H|^{1/2})^2$ . Nun können wir mit Hilfe eines bekannten Interpolationsresultates [Paz83, §2 Th. 6.10] wie folgt fortfahren:

$$\|(\Theta H)^{\frac{1}{2}}\varphi\|_{L^2} \leq \gamma_H \|\Theta H\varphi\|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \|\varphi\|_{L^2}^{\frac{1}{2}} = \gamma_H \|H\varphi\|_{L^2}^{\frac{1}{2}} \|\varphi\|_{L^2}^{\frac{1}{2}}, \quad (3.32)$$

wobei  $\gamma_H$  die zugehörige (endliche, positive) Interpolationskonstante ist. Durch Zusammensetzen der Ungleichungen und Anwendung der Youngschen Ungleichung folgt die Behauptung.

(iii) Aus dem ersten Punkt des Theorems folgt, dass es Elemente in  $\text{dom}(H|_{L^2})$  gibt, die nicht zu  $\mathcal{D}_L$  gehören. Da jedes  $\psi \in \text{dom}(H|_{L^2}) \subset W_0^{1,2}$  stetig ist, springen die Funktionen  $M_\alpha\psi$  an den Sprungstellen von  $M_\alpha$ , an denen  $\psi$  nicht verschwindet. Daraus folgt, dass die distributionelle Ableitung solcher Funktionen  $M_\alpha\psi$  in einer der Sprungstellen Dirac-Maße enthält, was verhindert, dass  $\frac{d}{dx}(M_\alpha\psi)$  eine endliche  $L^2$ -Norm besitzt.  $\square$

Als nächstes wollen wir die Operatoren  $H_{\mathbf{k}}$  auf  $L^2$  in ihrer Abhängigkeit vom Wellenvektor  $\mathbf{k} \in \mathbb{C}^2$  betrachten. Nach Theorem 3.9 ist  $\text{dom}(H_{\mathbf{k}}|_{L^2})$  für den Fall nicht-konstanter Koeffizientenfunktionen  $M_1$  und  $M_2$  — und das ist der allgemeine Fall, den wir betrachten wollen — *abhängig* vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$ . Damit ist für die Operatorenfamilie  $\{H_{\mathbf{k}}|_{L^2}\}_{\mathbf{k} \in \mathbb{C}^2}$ , im Gegensatz zur Situation auf  $W_0^{-1,2}$ , vgl. Theorem 3.8, das Konzept der *holomorphen Familien von Typ (A)* nicht anwendbar. Es gilt jedoch das Folgende:

**Theorem 3.12.** *Für jede eindimensionale komplexe analytische Untermannigfaltigkeit  $\mathcal{S} \in \mathbb{C}^2$  ist die Familie  $\{H_{\mathbf{k}}|_{L^2}\}_{\mathbf{k} \in \mathcal{S}}$  eine analytische Operatorfamilie im Sinne von Kato [Kat84, VII.1.2].*

*Beweis.* Aus der Definition folgt, dass  $\{H_{\mathbf{k}}|_{L^2}\}_{\mathbf{k} \in \mathcal{S}}$  eine analytische Operatorfamilie ist, dann und nur dann, wenn  $\{\Theta H_{\mathbf{k}}|_{L^2}\}_{\mathbf{k} \in \mathcal{S}}$  eine ist. Wir zeigen dies, indem wir beweisen, dass die zugehörigen Formen eine so genannte *(a)-analytische-Familie von Formen* bilden, siehe [Kat84, VII.4.2]. Dazu müssen wir zeigen, dass die zu den Operatoren  $\Theta H_{\mathbf{k}}$  assoziierten quadratischen Formen

- einen von  $\mathbf{k}$  unabhängigen Definitionsbereich haben, nämlich  $W_0^{1,2}$ ,
- auf diesem Definitionsbereich sektoriell und abgeschlossen sind und

- analytisch von  $\mathbf{k}$  abhängen, d. h. dass für jedes  $\psi$  aus dem Definitionsbereich der Form die Abbildung  $\mathbb{C}^2 \ni \mathbf{k} \mapsto \langle \Theta H_{\mathbf{k}} \psi, \psi \rangle$  holomorph ist.

Dazu betrachten wir als erstes die dem Operator  $\Theta H = |H|$  zugeordnete Form

$$\mathfrak{h}[\psi] = \langle \Theta H \psi, \psi \rangle.$$

Es ist einfach zu sehen, dass der Definitionsbereich dieser Form  $W_0^{1,2}$  ist und dass sie auf diesem Raum abgeschlossen ist. Sie ist außerdem sektoriell, da sie die Form eines positiven selbstadjungierten Operators ist. Nun genügt es nach Kato [Kat84, VII Th.4.8] zu wissen:

**Proposition 3.13.** *Die Formen  $\langle \Theta T_{\mathbf{k}} \cdot, \cdot \rangle$ , vgl. Definition 3.5, sind relativ beschränkt bezüglich der dem Operator  $\Theta H = |H|$  zugeordneten Form  $\mathfrak{h}$ . Die  $\mathfrak{h}$ -Schranke ist gleich Null.*

Wir zeigen, dass die den  $\Theta$ -transformierten Operatoren  $\Theta A_\alpha$ ,  $\Theta B_\alpha$ ,  $\Theta B_{\alpha,\beta}$ ,  $\Theta V$  und  $\Theta E$  zugeordneten Formen relativ beschränkt sind bezüglich  $\mathfrak{h}$  und dass die Relativschranken beliebig klein gewählt werden können. Für die den Operatoren nullter Ordnung  $\Theta B_\alpha$ ,  $\Theta B_{\alpha,\beta}$ ,  $\Theta V$  und  $\Theta E$  zugeordneten Formen ist dies offensichtlich, da diese sogar auf  $L^2$  beschränkt sind. Also bleibt übrig, die Aussage für die den Operatoren erster Ordnung  $\Theta A_\alpha$  zugeordneten Formen  $\mathfrak{t}_\alpha$  zu beweisen. Für  $\psi \in W_0^{1,2}$  ist

$$\mathfrak{t}_\alpha[\psi] = \int_{\Omega} \left\langle \tilde{\Theta} M_\alpha(x) \frac{d\psi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} + \left\langle \tilde{\Theta} M_\alpha^*(x) \psi(x), \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx,$$

wobei  $\tilde{\Theta} : \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$  der Konjugationsoperator aus (3.11) ist. Es gilt

$$\begin{aligned} \|\tilde{\Theta} M_\alpha\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} &= \|M_\alpha\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \\ &= \|M_\alpha^*\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} = \|\tilde{\Theta} M_\alpha^*\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}. \end{aligned}$$

Nun können wir  $\mathfrak{t}_\alpha[\psi]$  folgendermaßen abschätzen:

$$\begin{aligned} |\mathfrak{t}_\alpha[\psi]| &\leq \left( \|\tilde{\Theta} M_\alpha\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} + \|\tilde{\Theta} M_\alpha^*\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \right) \left\| \frac{d\psi}{dx} \right\|_{L^2} \|\psi\|_{L^2} \\ &\leq 2 \|M_\alpha\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \sqrt{\frac{\langle \Theta H \psi, \psi \rangle_{L^2}}{\min_{j=1, \dots, d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}} \|\psi\|_{L^2}. \end{aligned}$$



Nach Anwendung der Youngschen Ungleichung erhalten wir für alle  $0 < \delta$  die Abschätzung

$$|\mathfrak{t}_\alpha[\psi]| \leq \delta \mathfrak{h}[\psi] + \frac{1}{\delta} \|M_\alpha\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}^2 \frac{1}{\min_{j=1, \dots, d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|} \|\psi\|_{L^2}^2, \quad (3.33)$$

d. h. die gesuchte Relativbeschränktheit der Formen  $\mathfrak{t}_\alpha$ .

Die analytische Abhängigkeit der Formen  $\langle \Theta T_{\mathbf{k}}, \cdot \rangle$  von  $\mathbf{k}$  folgt nun unmittelbar, vgl. Kato [Kat84, VII.1.1 und VII.3.1] für Details.  $\square$

Theorem 3.12 hat hinsichtlich der Abhängigkeit des Spektrums vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$  weitreichende Konsequenzen, nämlich:

**Korollar 3.14.** *Eine geschlossene Kurve, die zwei Teile des Spektrums von  $H_{\mathbf{k}}$  für  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$  voneinander trennt, trennt auch die zugehörigen Teile des Spektrums von  $H_{\mathbf{k}}$  für  $\mathbf{k}$  aus einer geeigneten Umgebung von  $\mathbf{k}_0$  voneinander, vgl. Kato [Kat84, Th. VII.1.7].*

**Korollar 3.15.** *Jedes endliche System von Eigenwerten von  $H_{\mathbf{k}}$  besteht aus Kurven einer oder mehrerer analytischer Funktionen, welche höchstens algebraische Singularitäten besitzen. Dasselbe gilt für die zugehörigen Eigenprojektionen und Eigennilpotenzen, vgl. Kato [Kat84, Th. VII.1.8].*

Nach wie vor bleibt die Frage nach der globalen Existenz der Eigenwert-Zweige (und der Eigenfunktions-Zweige) offen. Bisher ist es mir nicht, gelungen dieses zu beweisen. Die Gründe dafür sind die Folgenden:

Auf  $W_0^{-1,2}$ , wo das Problem zuerst betrachtet wurde, sind die Operatoren nicht selbstadjungiert, folglich sind Resultate zur globalen Existenz nicht zu erwarten. Auf  $L^2$  ist die Operatorfamilie  $\{H_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k}}$  weder eine holomorphe Familie vom Typ (A), vgl. Kato [Kat84, VII.2], noch eine holomorphe Familie vom Typ (B), vgl. Kato [Kat84, VII.4]. Das Typ-(A)-Konzept ist wegen des vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$  abhängigen Definitionsbereichs nicht anwendbar. Das Typ-(B)-Konzept lässt sich nicht anwenden, da die Operatoren auf  $L^2$  nicht halbbeschränkt sind und sie daher nicht mittels des Formenkalküls definiert werden können. Wendet man die Transformation  $\Theta$  auf  $H_{\mathbf{k}}$  an, so erhält man zwar eine Familie sektorieller, aber essentiell nicht-selbstadjungierter Operatoren.

Also bleibt unter den Voraussetzungen 3.1–3.4 im allgemeinen Fall die Frage offen, ob die Eigenwertkurven in der endlichen Ebene Singularitäten besitzen können. Es ist jedoch möglich, durch Modifizieren einzelner Voraussetzungen

jeweils schärfere Aussagen hinsichtlich der Abhängigkeit des Spektrums vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$  zu beweisen.

Dazu werden wir in Kapitel 3.5 die Voraussetzung 3.2 dahingehend verschärfen, dass wir  $kp$ -Schrödingeroperatoren betrachten, die einen definiten Hauptteil besitzen. In diesem Fall sind die Operatoren halbbeschränkt und das Typ-(B)-Konzept lässt sich anwenden. Ein zweiter Weg zu schärferen Resultaten ist die Modifikation der Voraussetzung 3.4 mit dem Ziel, einen vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$  unabhängigen Definitionsbereich zu erhalten, um dann das Typ-(A)-Konzept anwenden zu können. Dazu werden wir in Kapitel 3.6 approximierende  $kp$ -Schrödingeroperatoren betrachten, bei denen die springenden, stückweise konstanten Koeffizientenfunktionen  $M_\alpha$ ,  $\alpha = 0, 1, 2$  durch geglättete Funktionen ersetzt sind.

## 3.4 Abschätzung der Bandlücke

Aus dem Blickwinkel der Berechnung der elektronischen Struktur sind folgende Fragen von besonderem Interesse: Unter welchen Bedingungen kann die spektrale Lücke zwischen dem positiven und dem negativen Teil des Hauptteils  $H$  auch als Bandlücke im Spektrum von  $H_{\mathbf{k}}$  gefunden werden? Wie kann die Größe dieser Bandlücke in Abhängigkeit von  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  und den Daten des Problems abgeschätzt werden? Wie groß ist diese Spektrallücke im Vergleich zu der durch die Lücke zwischen dem negativen und dem positiven Teil des Bandkantenoperators  $E$  gegebenen Bandlücke?

Diese Fragestellungen haben auch einen direkten Bezug zum Problem der Spurious-Modes bei der Bandstrukturechnung.

Die in Proposition 3.13 bewiesene Relativbeschränktheit der Bandkopplungen  $T_{\mathbf{k}}$  bezüglich des Hauptteils  $H$  im Formensinne ermöglicht uns, diese Fragestellungen zu behandeln.

### 3.4.1 Mit $\Theta$ anti-kommutierende $kp$ -Kopplung erster Ordnung

In Übereinstimmung mit der physikalischen Situation, vgl. z. B. [Bah90, CC96, EW96], formulieren wir neben den Voraussetzungen 3.1–3.4 die folgenden zusätzlichen Voraussetzungen an die Koeffizienten des  $kp$ -Operators:

**Voraussetzung 3.16.** Für fast alle  $x \in \Omega$  seien für die Koeffizientenmatrizen  $M_0(x)$ ,  $U_1(x)$  und  $U_2(x)$  folgende Anti-Kommutator-Relationen mit  $\tilde{\Theta}$  erfüllt:

$$M_0(x)\tilde{\Theta} = -\tilde{\Theta}M_0(x), \quad (3.34)$$

$$U_\alpha(x)\tilde{\Theta} = -\tilde{\Theta}U_\alpha(x), \quad \alpha \in \{1, 2\}. \quad (3.35)$$

**Voraussetzung 3.17.** Für fast alle  $x \in \Omega$  seien die Koeffizientenmatrizen  $\tilde{\Theta}U_{\alpha\alpha}(x)$ ,  $\alpha \in \{1, 2\}$  (siehe Seite 22), nichtnegative Operatoren über  $\mathbb{C}^d$ .

Die Voraussetzung 3.16 bedeutet, dass die Intra-Band-Anteile der Koeffizientenmatrizen

$$M_{0,intra} = \frac{1}{2}(M_0 + \Theta M_0 \Theta) \quad \text{und} \quad U_{\alpha,intra} = \frac{1}{2}(U_\alpha + \Theta U_\alpha \Theta), \quad \alpha = 1, 2$$

verschwinden. Die Koeffizientenmatrizen  $M_0$ ,  $U_1$  und  $U_2$  beschreiben die Anteile der Bandkopplung  $T_{\mathbf{k}}$ , die im zugeordneten Hamiltonian für Volumenmaterialien linear von den Komponenten des Wellenvektors abhängen. Daher beschreiben diese die kp-Kopplung in erster Ordnung in  $k$ . Diese Eigenschaft wird von dem üblichen Achtband-Hamiltonian (2.6) und dem diesem zugeordneten kp-Schrödingeroperator erfüllt, siehe Kapitel 5. Die Bedingung an  $M_0$  schränkt dabei das Operator Ordering der Terme erster Ordnung nicht ein. D. h. es sind sowohl symmetrisches bzw. konventionelles Operator Ordering ( $M_0$  schiefadjungiert) als auch asymmetrische Varianten [For97, Bur98, PFFD01, RAE<sup>+</sup>02, MTPP05] (siehe auch Abschnitt 2.2.2) zugelassen.

**Theorem 3.18.** Wir betrachten die Operatoren aus Definition 3.5. Seien die Voraussetzungen 3.1–3.4, 3.16 und 3.17 erfüllt. Sei  $\mu$  der unterste Eigenwert von  $|H|$ ,

$$e \stackrel{\text{def}}{=} \min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |e_j(x)| \geq \|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}, \quad (3.36)$$

und sei  $\lambda$  so gewählt, dass

$$|\lambda| \leq e - \|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}. \quad (3.37)$$

Wir führen die folgende Abkürzung ein

$$M \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\max_{\alpha=1,2} \|M_\alpha\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}^2}{\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}. \quad (3.38)$$

Falls der Wellenvektor  $\mathbf{k} = (k_1, k_2) \in \mathbb{R}^2$

$$|k_1| + |k_2| \leq \sqrt{\frac{\mu}{M}} \quad (3.39a)$$

und

$$\begin{aligned} 0 < \gamma(\mathbf{k}) &\stackrel{\text{def}}{=} \mu - 2 \left( |k_1| + |k_2| \right) \sqrt{\mu M} \\ &\quad - |k_1| |k_2| \left( \|U_{12}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} + \|U_{21}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \right) \\ &\quad + k_1^2 \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} \inf \operatorname{spec} \left( \tilde{\Theta} U_{11}(x) \right) \\ &\quad + k_2^2 \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} \inf \operatorname{spec} \left( \tilde{\Theta} U_{22}(x) \right) \\ &\quad - \|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} + e - |\lambda|, \end{aligned} \quad (3.39b)$$

erfüllt, dann gehört  $\lambda$  zur Resolventenmenge von  $H_{\mathbf{k}}$  und es gilt

$$\left\| (H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1} \right\| \leq \frac{1}{\gamma(\mathbf{k})}. \quad (3.40)$$

Daraus folgt, dass der Kreis um  $\lambda$  mit Radius  $\gamma(\mathbf{k})$ , d. h. die Menge

$$K_{\gamma(\mathbf{k})}(\lambda) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \xi \in \mathbb{C} : |\xi - \lambda| < \gamma(\mathbf{k}) \right\}, \quad (3.41)$$

in der Resolventenmenge von  $H_{\mathbf{k}}$  enthalten ist.

*Beweis.* Als erstes kann man leicht nachrechnen, dass  $\lambda \in \mathbb{R}$  dann und nur dann in der Resolventenmenge von  $H_{\mathbf{k}}$  liegt, wenn 0 in der Resolventenmenge von  $\Theta H_{\mathbf{k}} - \lambda \Theta$  liegt. Als nächstes impliziert Proposition 3.13: Wenn

$$\xi \in \mathbb{C}, \quad \Re \xi < 0, \quad |\xi| \text{ ausreichend groß}, \quad (3.42)$$

dann liegt  $\xi$  in der Resolventenmenge von  $\Theta H_{\mathbf{k}}$ , vgl. Kato [Kat84, VI Th.3.4]. Somit reicht es aus zu beweisen, vgl. Kato [Kat84, V Th.3.2], dass für Wellenvektoren  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$ , die den Bedingungen (3.39) genügen, die linke komplexe Halbebene  $\{\xi \in \mathbb{C} : \Re \xi \leq 0\} \subset \mathbb{C}$  nicht im Abschluss des numerischen Wertebereichs  $W$  von  $\Theta H_{\mathbf{k}} - \lambda \Theta$ , definiert als

$$W(\mathbf{k}) = \left\{ \left\langle (\Theta H_{\mathbf{k}} - \lambda \Theta) \psi, \psi \right\rangle : \psi \in \operatorname{dom} \mathfrak{h} = W_0^{1,2} \text{ mit } \|\psi\|_{L^2} = 1 \right\},$$

enthalten ist. Dieses werden wir im Folgenden zeigen, indem wir den Realteil von  $\langle (\Theta H_{\mathbf{k}} - \lambda \Theta) \psi, \psi \rangle$  nach unten abschätzen. Es gilt

$$\begin{aligned} \langle (\Theta H_{\mathbf{k}} - \lambda \Theta) \psi, \psi \rangle &= \mathfrak{h}[\psi] + \mathfrak{t}_0[\psi] + \sum_{\alpha=1,2} k_{\alpha} \mathfrak{t}_{\alpha}[\psi] \\ &+ \sum_{\alpha=1,2} k_{\alpha} \langle \Theta B_{\alpha} \psi, \psi \rangle + \sum_{\alpha,\beta=1,2} k_{\alpha} k_{\beta} \langle \Theta B_{\alpha\beta} \psi, \psi \rangle \\ &+ \langle \Theta V \psi, \psi \rangle + \langle \Theta E \psi, \psi \rangle - \langle \lambda \Theta \psi, \psi \rangle. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Als erstes betrachten wir den Term  $\mathfrak{t}_0[\psi]$  erster Ordnung. Aus der Bedingung (3.34) an die Koeffizientenmatrix  $M_0$  folgt  $\tilde{\Theta} M_0^* = -M_0^* \tilde{\Theta}$ . Damit kann man die folgenden Umformungen nachrechnen:

$$\begin{aligned} \mathfrak{t}_0[\psi] &= \int_{\Omega} \left\langle \tilde{\Theta} M_0(x) \frac{d\psi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} + \left\langle \tilde{\Theta} M_0^*(x) \psi(x), \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \\ &= \int_{\Omega} \left\langle \tilde{\Theta} M_0(x) \frac{d\psi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} - \left\langle M_0^*(x) \tilde{\Theta} \psi(x), \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \\ &= \int_{\Omega} \left\langle \tilde{\Theta} M_0(x) \frac{d\psi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} - \left\langle \psi(x), \tilde{\Theta} M_0(x) \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \\ &= \int_{\Omega} \left\langle \tilde{\Theta} M_0(x) \frac{d\psi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx - \overline{\int_{\Omega} \left\langle \tilde{\Theta} M_0(x) \frac{d\psi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx}. \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass der Term  $\mathfrak{t}_0[\psi]$  rein imaginär ist. Die Anti-Kommutator-Relation (3.35) ermöglicht auf die gleiche Weise folgende Umformungen:

$$\begin{aligned} \left\langle \tilde{\Theta} U_{\alpha}(x) \psi(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} &= - \left\langle U_{\alpha}(x) \tilde{\Theta} \psi(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} \\ &= - \left\langle \psi(x), \tilde{\Theta} U_{\alpha} \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} \\ &= - \overline{\left\langle \tilde{\Theta} U_{\alpha}(x) \psi(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d}}. \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass die Terme  $\langle \Theta B_{\alpha} \psi, \psi \rangle$ ,  $\alpha = 1, 2$  ebenfalls rein imaginär sind.

Unter Berücksichtigung der Relativschranke (3.33) für  $\mathfrak{t}_{\alpha}[\psi]$ ,  $\alpha = 1, 2$  und offensichtlichen Abschätzungen für die Operatoren  $B_{12}$ ,  $B_{21}$ ,  $\Theta B_{11}$ ,  $\Theta B_{22}$ ,

$\Theta V$ ,  $|E|$  und  $\lambda\Theta$  erhält man damit für jedes  $\psi \in \text{dom } \mathfrak{h} = W_0^{1,2}$  mit  $\|\psi\|_{L^2} = 1$ :

$$\begin{aligned}
& \Re \langle (\Theta H_{\mathbf{k}} - \lambda\Theta)\psi, \psi \rangle \\
& \geq \mathfrak{h}[\psi] - \delta(|k_1| + |k_2|)\mathfrak{h}[\psi] - \frac{1}{\delta}(|k_1| + |k_2|)M \\
& \quad - |k_1||k_2| \left( \|U_{12}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} + \|U_{21}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \right) \\
& \quad + k_1^2 \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} \inf \operatorname{spec}(\tilde{\Theta}U_{11}(x)) \\
& \quad + k_2^2 \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} \inf \operatorname{spec}(\tilde{\Theta}U_{22}(x)) \\
& \quad - \|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} + e - |\lambda|,
\end{aligned} \tag{3.44}$$

mit einem beliebigen  $\delta$  aus  $(0, \infty)$ . Sei jetzt  $\delta > 0$  beliebig aber fest gewählt. Wir wollen als nächstes  $\mathfrak{h}[\psi]$  in (3.44) durch  $\mu$ , den untersten Eigenwert von  $|H|$ , ersetzen, ohne dabei jedoch die rechte Seite zu vergrößern. Dazu muss man die Nichtnegativität von

$$1 - \delta(|k_1| + |k_2|)$$

sicherstellen, also fordern, dass

$$|k_1| + |k_2| \leq 1/\delta$$

gilt. Die  $\delta$ -abhängigen Terme in (3.44) haben aufgrund des negativen Vorzeichens die Eigenschaft, die Spektrallücke  $e$  zu verkleinern. Nun wollen wir deren Wirkung minimieren, indem wir  $\delta > 0$  so wählen, dass die Funktion

$$(0, \infty) \ni \delta \longmapsto -\mu\delta - \frac{M}{\delta},$$

ihren maximal möglichen Wert annimmt; das maximierende  $\delta$  ist

$$\delta_{max} = \sqrt{\frac{M}{\mu}}.$$

Somit erhalten wir für Wellenvektoren  $\mathbf{k}$ , für die  $|k_1| + |k_2| \leq 1/\delta_{max}$  gilt, d. h. die der Bedingung (3.39a) genügen, die Abschätzung

$$\Re \left( \mathfrak{h}[\psi] + \sum_{\alpha=1,2} k_\alpha t_\alpha[\psi] \right) \geq \mu - 2 \left( |k_1| + |k_2| \right) \sqrt{\mu M}. \tag{3.45}$$

Kombiniert man diese Abschätzung mit (3.44) so folgt schließlich

$$\Re \langle (\Theta H_{\mathbf{k}} - \lambda \Theta) \psi, \psi \rangle \geq \gamma(\mathbf{k}), \quad (3.46)$$

wiederum vorausgesetzt  $\mathbf{k}$  erfüllt  $|k_1| + |k_2| \leq 1/\delta_{max}$ , d. h. (3.39a).

Folglich impliziert (3.39), dass der numerische Wertebereich  $W(\mathbf{k})$  von  $\Theta H_{\mathbf{k}} - \lambda \Theta$  in der Halbebene

$$\{\xi \in \mathbb{C} : 0 < \gamma(\mathbf{k}) \leq \Re \xi\}$$

enthalten ist. Daraus folgt, dass wie gefordert der Abschluss des numerischen Wertebereichs von  $\Theta H_{\mathbf{k}} - \lambda \Theta$  nicht in der linken komplexen Halbebene enthalten ist.  $\square$

**Bemerkung 3.19.** *Unter Benutzung von (3.39a) und der Tatsache, dass die rechte Seite von (3.45) nicht kleiner ist als  $-\mu$ , kann man die Bedingung (3.39b) zu der folgenden schärferen vereinfachen:*

$$\begin{aligned} 0 < & -\mu + e - |\lambda| - \|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \\ & - |k_1| |k_2| \left( \|U_{12}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} + \|U_{21}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \right) \\ & + k_1^2 \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} \inf \operatorname{spec} \left( \tilde{\Theta} U_{11}(x) \right) \\ & + k_2^2 \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} \inf \operatorname{spec} \left( \tilde{\Theta} U_{22}(x) \right). \end{aligned} \quad (3.47)$$

*In vielen physikalisch interessanten Fällen, vgl. z. B. [Bah90, CC96, EW96] gilt*

$$e > \mu + \|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}, \quad (3.48)$$

*also*

$$0 < -\mu + e - |\lambda| - \|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}, \quad (3.49)$$

*zumindest für kleine  $\lambda$ . Zusammen mit (3.47) ist damit die Existenz einer Bandlücke zumindest in einer Nähe des Zonenentrums  $\mathbf{k} = 0$  sichergestellt.*

**Bemerkung 3.20.** *Man kann leicht nachprüfen, dass die Menge der  $\mathbf{k}$ 's, die durch die Bedingungen (3.39) oder (3.39a) und (3.47) definiert ist, die folgenden Eigenschaften hat: Wenn  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$  eine der Bedingungen erfüllt, dann tut dies auch  $-\mathbf{k}$ . Die Bedingung (3.39a) definiert eine konvexe Menge, während (3.39b) dies nicht tut. Im Allgemeinen ist (3.39b) sogar nicht radial in  $\mathbf{k}$ . Falls jedoch (3.49) gilt, dann ist die Bedingung (3.47) radial, aber im Allgemeinen nicht konvex.*

**Bemerkung 3.21.** *Der unterste Eigenwert  $\mu$  von  $|H|$ , kann in Termen der Daten des Problems abgeschätzt werden:*

$$\min_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)| \leq \frac{\mu}{\mu_0} \leq \max_{j=1,\dots,d} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |m_j(x)|, \quad (3.50)$$

wobei  $\mu_0 = \pi^2/|\Omega|^2$  der unterste Eigenwert des Laplaceoperators  $-d^2/dx^2$  mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen auf  $\Omega$  ist.

### 3.4.2 $\Theta$ -wachsende $k^2$ -Terme

Im Beweis von Theorem 3.18 haben wir gesehen, dass der Realteil der Form  $\mathfrak{h}_{\mathbf{k}}[\psi] = \langle (\Theta H_{\mathbf{k}} - \lambda \Theta) \psi, \psi \rangle$  für die Abschätzung der Spektrallücke entscheidend ist, vgl. z. B. (3.44). Betrachtet man die Herleitung von (3.44) noch mal genauer, so kann man nachprüfen, dass Anteile der Form  $\mathfrak{h}_{\mathbf{k}}$ , die einen positiven Realteil besitzen, sich günstig auf die Größe der Bandlücke auswirken, da sie diese nicht verkleinern.

Dieser Idee folgend wollen wir nun eine Bedingung an die Koeffizientenmatrizen der  $k^2$ -Terme formulieren, die die Nichtnegativität des Realteils der zugeordneten Form sicherstellt. Dazu wird die Voraussetzung 3.17, die ausschließlich die Matrizen  $U_{11}$  und  $U_{22}$  betrachtet, die sich auf die Koordinatenachsen in der  $\mathbf{k}$ -Ebene beziehen, ersetzt durch eine Bedingung, die alle Matrizen  $U_{\alpha\beta}$ ,  $\alpha, \beta = 1, 2$  berücksichtigt. Diese neue Bedingung erlaubt dabei zusätzlich den Beweis von Resultaten, die analog zu Theorem 3.18 sind, aber uniforme Schranken für die Bandlücke liefern, die nur vom Betrag des Wellenvektors  $\mathbf{k}$  abhängen, aber nicht von seiner Richtung.

Zu diesem Zweck ersetzen wir die Voraussetzung 3.17 durch

**Voraussetzung 3.22.** *Es gelte für alle  $\eta \in [0, 2\pi)$  und für fast alle  $x \in \Omega$*

$$\inf \operatorname{spec} \left( \Re(\tilde{\Theta} U_{\eta}(x)) \right) = \frac{1}{2} \inf \operatorname{spec} \left( \tilde{\Theta} U_{\eta}(x) + U_{\eta}(x) \tilde{\Theta} \right) \geq \nu \geq 0, \quad (3.51)$$

mit

$$U_{\eta}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \cos^2 \eta U_{11}(x) + \sin^2 \eta U_{22}(x) + \sin \eta \cos \eta (U_{12}(x) + U_{21}(x)). \quad (3.52)$$

Voraussetzung 3.22 impliziert, wie wir im Folgenden sehen werden, dass der Bandkopplungsoperator der Ordnung  $k^2$

$$B_{\mathbf{k}^2} = \sum_{\alpha, \beta=1,2} k_{\alpha} k_{\beta} B_{\alpha\beta}$$



$\Theta$ -wachsend ist, d. h.

$$\Re(\Theta B_{\mathbf{k}^2}) \geq 0.$$

Aus physikalischer Sicht ist Voraussetzung 3.22 sehr sinnvoll, denn diese sichert das erwartete Krümmungsverhalten der durch Eigenwertkurven von  $B_{\mathbf{k}^2}$  gegebenen lateralen Bandstruktur. So bedeutet diese für Modelle mit gekoppelten Valenz- und Leitungsbändern [Bah90, EW96], dass die so gegebene laterale Bandstruktur für die Leitungsbänder eine positive Krümmung und für die Valenzbänder eine negative Krümmung aufweist. Für reine Valenzbandmodelle [CC96] oder reine Leitungsbändmodelle, d. h.  $\tilde{\Theta} = \mathbb{1}_{\mathbb{C}^d}$ , bedeutet diese, dass die Krümmung dieser lateralen Bandstruktur das gleiche Vorzeichen hat wie die effektiven Massen  $m_i$ , d. h. positiv gekrümmt ist. Diese Voraussetzungen sind insbesondere für die Standardmodelle bei direkten Halbleitermaterialien erfüllt, vgl. Kapitel 5.3 und Anhang A.

Bevor wir das Theorem formulieren, wollen wir noch einmal die Bedingung (3.39b) in Theorem 3.18 für den Fall  $\mathbf{k} = 0$  betrachten. Dann lautet diese

$$0 < \gamma = \mu - \|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} + e - |\lambda|.$$

Aus Theorem 3.18 folgt damit, dass das Intervall  $(-\gamma_0, \gamma_0)$  mit

$$\gamma_0 = \mu - \|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} + e$$

zur Resolventenmenge von  $H_{\mathbf{k}}$  gehört und damit die Größe der Bandlücke bei  $k = 0$  definiert ist. Physikalisch würde man erwarten, dass die Bandlücke bei  $k = 0$  der spektralen Lücke  $(-e, e)$  des Bandkantenoperators (siehe (3.36)) entspricht. Das folgt aber aus der obigen Bedingung nur wenn  $\mu \geq \|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}$  ist oder die durch die Potentialmatrix  $v$  beschriebenen Bandkopplungen verschwinden. Für Achtband-Modelle, wie das in Kapitel 5 näher betrachtete, beinhaltet  $v$  unter anderem die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Liegt nun die (halbe) Bandlücke eines Materials in der Größenordnung der Spin-Bahn-Aufspaltung, so kann es sogar passieren, dass  $\|v\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} > e$  ist und die durch die Bedingung gesicherte Bandlücke nur noch sehr klein ist, evtl. sogar verschwindet. Im Falle des Achtband-Modells kann man nachrechnen, dass der Anteil der Spin-Bahn-Wechselwirkung in  $v$  im oben eingeführten Sinne ebenfalls  $\Theta$ -wachsend ist und damit der Realteil der zugeordneten Form nicht negativ ist. Damit würde dieser Anteil aus der  $L^\infty$ -Norm von  $v$  im Rahmen der Bandlückenabschätzung herausfallen. In diesem Sinne formulieren wir die folgende

**Voraussetzung 3.23.** Für fast alle  $x \in \Omega$  existiert eine Zerlegung der Potentialmatrix  $v(x)$  in ihren  $\Theta$ -wachsenden Anteil  $v_{\Theta^+}(x)$  und den Rest  $v_{\Theta^-}(x)$ :

$$v(x) = v_{\Theta^+}(x) + v_{\Theta^-}(x). \quad (3.53)$$

$v_{\Theta^+}(x)$  erfülle für fast alle  $x \in \Omega$  die Bedingung

$$\inf \operatorname{spec} \left( \Re(\tilde{\Theta} v_{\Theta^+}(x)) \right) = \frac{1}{2} \inf \operatorname{spec} \left( \tilde{\Theta} v_{\Theta^+}(x) + v_{\Theta^+}(x) \tilde{\Theta} \right) \geq \nu_{\Theta} \geq 0. \quad (3.54)$$

Ist dies nicht möglich, dann sei  $v_{\Theta^+}$  definiert als  $v_{\Theta^+} \stackrel{\text{def}}{=} 0$ .

Mit diesen Voraussetzungen formulieren wir das folgende

**Theorem 3.24.** Seien die Voraussetzungen 3.1–3.4, 3.16 und 3.22, sowie  $\mu$ ,  $e$  und  $M$  wie in Theorem 3.18 definiert. Sei  $v$  wie in Voraussetzung 3.23 angegeben in die Teile  $v_{\Theta^+}$  und  $v_{\Theta^-}$  aufgespalten. Sei  $\lambda$  so gewählt, dass

$$|\lambda| \leq e - \|v_{\Theta^-}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}. \quad (3.55)$$

Wenn

$$\mathbf{k} = (k \cos \eta, k \sin \eta), \quad \eta \in [0, 2\pi), \quad k \geq 0, \quad (3.56a)$$

$$k \leq f_1(\delta) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\delta \sqrt{2}} \quad (3.56b)$$

erfüllt ist und ferner

$$0 < \gamma_{\text{rad}}(k) \stackrel{\text{def}}{=} \mu - k \sqrt{2} \left( \mu \delta + \frac{M}{\delta} \right) + k^2 \nu - \|v_{\Theta^-}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} + e - |\lambda|, \quad (3.56c)$$

für irgendein  $\delta > 0$  gilt, dann gehört  $\lambda$  auch zu der Resolventenmenge von  $H_{\mathbf{k}}$  und es gilt

$$\|(H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1}\| \leq \frac{1}{\gamma_{\text{rad}}(k)}. \quad (3.57)$$

Daraus folgt, dass der Kreis um  $\lambda$  mit Radius  $\gamma_{\text{rad}}(\mathbf{k})$ , d. h. die Menge

$$K_{\gamma_{\text{rad}}(\mathbf{k})}(\lambda) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \xi \in \mathbb{C} : |\xi - \lambda| < \gamma_{\text{rad}}(\mathbf{k}) \right\}, \quad (3.58)$$

in der Resolventenmenge von  $H_{\mathbf{k}}$  enthalten ist.

*Beweis.* Der Beweis von Theorem 3.24 ist analog zu dem von Theorem 3.18. Dabei verwende man die Abschätzungen

$$|k_1| + |k_2| = k(|\cos \eta| + |\sin \eta|) \leq k\sqrt{2}$$

und

$$\sum_{\alpha, \beta=1,2} k_\alpha k_\beta \Re \langle \Theta B_{\alpha\beta} \psi, \psi \rangle = \frac{k^2}{2} \int_{\Omega} \left\langle (\tilde{\Theta} U_\eta + U_\eta \tilde{\Theta}) \psi(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \geq k^2 \nu,$$

sowie die Abschätzung

$$\begin{aligned} \Re \langle \Theta V \psi, \psi \rangle &= \int_{\Omega} \Re \left\langle \tilde{\Theta} v(x) \psi(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \\ &= \int_{\Omega} \Re \left\langle (\tilde{\Theta}(v_{\Theta^+}(x) + v_{\Theta^-}(x))) \psi(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left\langle (\tilde{\Theta} v_{\Theta^+}(x) + v_{\Theta^+}(x) \tilde{\Theta}) \psi(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} \\ &\quad + \Re \int_{\Omega} \left\langle \tilde{\Theta} v_{\Theta^-}(x) \psi(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} \\ &\geq -\|v_{\Theta^-}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}. \end{aligned}$$

□

**Bemerkung 3.25.** Der Nutzen von Theorem 3.24 hängt von der geeigneten Wahl der Variablen  $\delta$  in (3.56) ab. Um den maximalen  $k$ -Bereich zu erhalten, muss man

$$\max_{\delta > 0} \min_{l=1,2} f_l(\delta), \quad (3.59)$$

lösen, wobei  $f_1$  und  $f_2$  jeweils die durch (3.56b) und (3.56c) implizierten Einschränkungen sind. Da  $f_1$  eine fallende Funktion ist, muss man den kleinstmöglichen Wert  $\delta = \delta_{opt}$  finden, so dass gilt

$$f_1(\delta_{opt}) = f_2(\delta_{opt}). \quad (3.60)$$

Dies kann man erreichen, indem man explizit  $f_2$  bestimmt und analysiert. Wenn man den Term  $k^2 \nu$  in (3.56c) vernachlässigt, lautet diese Bedingung

$$k < f_2(\delta) = \frac{\mu + e - \|v_{\Theta^-}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} - |\lambda|}{\sqrt{2} \left( \delta \mu + \frac{M}{\delta} \right)}. \quad (3.61)$$

Für

$$\delta_{opt} = \sqrt{\frac{M}{e - |\lambda| - \|v_{\Theta-}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}}} \quad (3.62)$$

erhält man eine einzelne Bedingung für  $k$ , die nicht mehr von  $\mu$  abhängt:

$$0 \leq k < \sqrt{\frac{e - |\lambda| - \|v_{\Theta-}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))}}{2M}}. \quad (3.63)$$

Für einige Wahlen von  $\delta$  kann man die Bedingungen (3.56) vereinfachen.

**Bemerkung 3.26.** *Verfährt man in derselben Weise wie im Beweis von Theorem 3.18 und in Bemerkung 3.19, so erhält man in der Situation von Theorem 3.24 für  $\delta = \delta_{max} = \sqrt{M/\mu}$  eine einzelne Bedingung für  $k$ , die nur von  $\mu$  und  $M$  abhängt:*

$$0 \leq k \leq \sqrt{\frac{\mu}{2M}}, \quad (3.64)$$

da die zweite Bedingung

$$0 < k^2\nu + e - |\lambda| - \|v_{\Theta-}\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \quad (3.65)$$

immer erfüllt ist, vgl. (3.55) und (3.51).

### 3.4.3 Bewertung der Abschätzung an einem signifikanten, exakt lösbaeren Beispiel

Im Folgenden wollen wir die durch die Abschätzung (3.63) gesicherte Bandlücke mit der tatsächlichen Bandlücke eines exakt lösbaeren Vierbandproblems vergleichen. Dieses Vierband-Modell bildet die physikalische Situation von zwei Valenzbändern und zwei Leitungsbändern nach, deren Kopplung durch Differentialoperatoren 1. Ordnung gegeben ist. Die Bandkopplung wird aber keine Interband-Anteile enthalten, sondern die Terme erster Ordnung beschreiben ausschließlich interne Wechselwirkungen innerhalb der Valenzbänder bzw. innerhalb der Leitungsbänder. Das Beispiel eignet sich daher speziell zur Bewertung der Bandlückenabschätzung für diesen Typ von Bandwechselwirkung. Zur Konstruktion des Beispielpblems werden wir zunächst ein skalares Modellproblem und ein darauf aufbauendes Zweiband-Modell behandeln.

**Beispiel 3.27** (Skalarer Hamiltonian mit Impulskopplung). *Wir betrachten den skalaren Hamiltonian*

$$H_k = -\frac{d^2}{dx^2} + ik\frac{d}{dx}, \quad k \in \mathbb{R} \quad (3.66)$$

auf dem Intervall  $\Omega = (0, L)$  mit homogenen Dirichlet Randbedingungen.

Die Eigenwerte und Eigenfunktionen sind gegeben durch

$$E_n = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 - \frac{k^2}{4}, \quad \psi_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \exp\left(i\frac{kx}{2}\right). \quad (3.67)$$

**Beispiel 3.28** (Zweiband-Modell). *Wir betrachten das Zweiband-Modell gegeben durch*

$$H_2(\alpha) = \begin{pmatrix} -\frac{d^2}{dx^2} & \alpha\frac{d}{dx} \\ -\alpha\frac{d}{dx} & -\frac{d^2}{dx^2} \end{pmatrix} \quad (3.68)$$

auf dem Intervall  $\Omega = (0, L)$  mit homogenen Dirichlet Randbedingungen.

Zur Bestimmung der Eigenwerte und Eigenfunktionen bringen wir diesen Hamiltonian durch die unitäre Transformation mit der Matrix

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} \quad (3.69)$$

auf Diagonalgestalt:

$$H' = T^{-1}HT = \begin{pmatrix} -\frac{d^2}{dx^2} + i\alpha\frac{d}{dx} & 0 \\ 0 & -\frac{d^2}{dx^2} - i\alpha\frac{d}{dx} \end{pmatrix}. \quad (3.70)$$

Die Eigenfunktionen und Eigenwerte des transformierten Operators  $H'$  sind gegeben durch (siehe (3.67))

$$\Psi'_{1,n} = \left( \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \exp\left(i\frac{\alpha x}{2}\right), 0 \right)^T, \quad (3.71)$$

$$\Psi'_{2,n} = \left( 0, \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \exp\left(-i\frac{\alpha x}{2}\right) \right)^T, \quad (3.72)$$

$$E_{1/2,n}(\alpha) = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 - \frac{\alpha^2}{4}. \quad (3.73)$$

Die Eigenfunktionen des ursprünglichen Operators erhält man durch Rücktransformation mittels  $\Psi = T\Psi'$ :

$$\Psi_{1,n} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{i\frac{\alpha}{2}x} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad (3.74)$$

$$\Psi_{2,n} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-i\frac{\alpha}{2}x} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.75)$$

O.B.d.A. kann man die Basis auch rein reell wählen, z. B.

$$\Psi_{1,n} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}x\right) \\ -\sin\left(\frac{\alpha}{2}x\right) \end{pmatrix}, \quad (3.76)$$

$$\Psi_{2,n} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \begin{pmatrix} \sin\left(\frac{\alpha}{2}x\right) \\ \cos\left(\frac{\alpha}{2}x\right) \end{pmatrix}. \quad (3.77)$$

Auf Basis dieses Zweiband-Modells konstruieren wir nun ein Vierband-Modell, indem wir das Zweiband-Modell jeweils für den Leitungsbandanteil und den Valenzbandanteil verwenden.

**Beispiel 3.29** (Vierband-Modell). *Wir betrachten den Matrix-Schrödingeroperator bestehend aus zwei Leitungsbändern und zwei Valenzbändern, gegeben durch den Hamiltonian*

$$H_k = \begin{pmatrix} H_2(\alpha') + \frac{E_g}{2} I_2 & 0 \\ 0 & -(H_2(\alpha') + \frac{E_g}{2} I_2) \end{pmatrix} \quad (3.78)$$

mit

$$\alpha' = \alpha(k_1 + k_2) = \alpha(k \cos \eta + k \sin \eta) \quad (3.79)$$

auf dem Intervall  $\Omega = (0, L)$  mit homogenen Dirichlet Randbedingungen.  $H_2$  bezeichnet den Zweiband-Hamiltonian (3.68) und  $E_g$  ist die Bandlücke.

Die zweifach entarteten Eigenwertkurven des gekoppelten Modells (3.78) sind gegeben durch

$$E_{\pm,n}(k_1, k_2) = \pm \left[ \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2 - \frac{\alpha^2(k_1 + k_2)^2}{4} + \frac{E_g}{2} \right]. \quad (3.80)$$

Nun wollen wir den exakten Verlauf der Bandlücke, gegeben durch das offene Intervall  $Gap(k) = (E_{-,1}(k), E_{+,1}(k))$ , mit dem Ergebnis der Abschätzung der Bandlücke vergleichen. Dazu benötigen wir eine Darstellung des Modells

mit den Koeffizientenmatrizen  $m, e$  und  $M_1$  und  $M_2$ . Diese sind gegeben durch

$$m = (1, 1, -1, -1), \quad (3.81)$$

$$e = \frac{E_g}{2}(1, 1, -1, -1), \quad (3.82)$$

$$M_1 = M_2 = \frac{\alpha}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.83)$$

Für die Bandlückenabschätzung benötigt man die Größe der Bandlücke  $e$  und  $M$ , siehe (3.36) und (3.38). Diese berechnen sich für unsere Koeffizientenmatrizen zu

$$e = \frac{E_g}{2}, \quad (3.84)$$

$$M = \frac{\alpha^2}{4}. \quad (3.85)$$

Aus der Abschätzung der Bandlücke ergibt sich, dass diejenigen  $\lambda$  für die

$$-\frac{\alpha^2}{2}k^2 + \frac{E_g}{2} > |\lambda| \quad (3.86)$$

gilt zur Resolventenmenge und damit zur Bandlücke gehören. Damit ist die Bandlücke gegeben durch das Intervall

$$Gap_{approx}(k) = \left(-\frac{E_g}{2} + \frac{\alpha^2}{2}k^2, -\frac{\alpha^2}{2}k^2 + \frac{E_g}{2}\right). \quad (3.87)$$

Vergleicht man nun die tatsächliche Bandlücke mit der Abschätzung, so erhält man für die Differenz zwischen den Randwerten der Intervalle für  $k_1 = k_2 = \frac{k}{\sqrt{2}}$ :

$$\Delta\lambda = |\lambda_{max}^{approx} - \lambda_{max}| = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 = \mu. \quad (3.88)$$

D. h. die Abschätzung liefert in Bezug auf die Abhängigkeit der Grenzen der Bandlücke von  $k$  genau das gleiche qualitative Verhalten (sogar mit der gleichen Krümmung wie im exakten Fall). Allerdings sind die Kurven um die Konstante  $\Delta\lambda = \mu$ , die Grundzustandsenergie des Hauptteils, verschoben. Dass so eine Verschiebung auftritt, ist auch zu erwarten, da wir diese Energie ja gerade benutzt haben, um die Terme 1. Ordnung zu kontrollieren, siehe Beweis von Theorem 3.18, Seite 44. Damit kann man die Abschätzung der

Bandlücke in Bezug auf ihre Abhängigkeit vom Wellenvektor  $k$  als scharf bezeichnen.

### 3.5 kp–Operatoren mit definitem Hauptteil

Die Hierarchie der kp–Hamiltonians in der Festkörperphysik umfasst mit den  $4 \times 4$  und  $6 \times 6$  Hamiltonians, vgl. [Car96, CKI94, Chu95, For93, MGO94, CC96, Sin93] sowie Anhang A, kp–Operatoren mit positiv oder negativ definitem Hauptteil. In Hinblick auf Voraussetzung 3.2 bedeutet dies jeweils  $D_- = \emptyset$  oder  $D_- = \{1, \dots, d\}$ . O.B.d.A. nehmen wir in diesem Abschnitt  $D_- = \emptyset$  an, d. h.

$$\min_{j \in \{1, \dots, d\}} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} m_j(x) > 0, \quad \min_{j \in \{1, \dots, d\}} \operatorname{ess\,inf}_{x \in \Omega} e_j(x) > 0. \quad (3.89)$$

Die Konjugationsoperatoren  $\Theta$  und  $\tilde{\Theta}$ , vgl. (3.11), die wir zu Beginn von Abschnitt 3.3 eingeführt haben, sind dann jeweils auf  $L^2$  und  $\mathbb{C}^d$  die Identitätsoperatoren. In diesem Fall ist der Hauptteil von  $H_{\mathbf{k}}$ , der Operator  $H$ , vgl. Definition 3.5, definit. Damit sind die zugehörigen Formen halbbeschränkt und wir erhalten schärfere Resultate bezüglich des Verhaltens der Eigenwerte und der Eigenvektoren in Abhängigkeit vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$ . Natürlich gelten weiterhin die fundamentalen Resultate aus Abschnitt 3.3 und insbesondere die Formabschätzungen (3.33).

**Theorem 3.30.** *Unter den Voraussetzungen 3.1, 3.3, 3.4 und (3.89) existieren die Eigenwertkurven und die Eigenfunktionskurven auf allen eindimensionalen analytischen Untermannigfaltigkeiten  $\mathcal{S}$  aus  $\mathbb{R}^2$  und sie sind reell holomorph auf  $\mathcal{S}$ .*

*Beweis.* Aus der Formabschätzung (3.33) ergibt sich, dass jede Familie  $\{H_{\mathbf{k}}\}_{\mathbf{k} \in \mathcal{S}}$  eine holomorphe Familie von Typ (B) ist. Daraus folgt unmittelbar die Behauptung, vgl. Kato [Kat84, VII.4].  $\square$

### 3.6 Regularisierung der kp–Operatoren

In diesem Abschnitt werden wir auch Koeffizientenfunktionen  $M_\alpha$ ,  $\alpha = 0, 1, 2$  zulassen, die nicht die Voraussetzung 3.4 erfüllen, d. h. die nicht stückweise konstant sind. Es wird gezeigt, wie man *approximierende* kp–Operatoren definieren kann, die nicht die unzufriedenstellenden Eigenschaften besitzen,



die wir in Theorem 3.11 festgestellt haben, und für die die Eigenwertkurven global existieren. Ziel dabei ist eine Operatorfamilie zu erhalten, deren Definitionsbereich auf  $L^2$  im Gegensatz zu (3.27) unabhängig vom Wellenvektor  $\mathbf{k}$  ist. Die Idee ist, die springenden Koeffizientenfunktionen  $M_\alpha$  durch eine Folge von geglätteten Funktionen zu ersetzen, die in  $L^p([\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d)])$  gegen die ursprüngliche Koeffizientenfunktion konvergieren. Dann zeigen wir, dass die Folge der Resolventen des so regularisierten Operators gegen die Resolvente des ursprünglichen Operators in der Nuklearnorm konvergiert. Das bedeutet insbesondere, dass die spektralen Eigenschaften asymptotisch erhalten bleiben. Wir beginnen, indem wir ein vorbereitendes Lemma beweisen:

**Lemma 3.31.** *Seien  $\{M_\alpha^{(n)}\}_{n \in \mathbb{N}}$ ,  $\alpha = 0, 1, 2$ , gleichmäßig beschränkte Folgen von stetig-differenzierbaren Funktionen auf  $\bar{\Omega}$  mit Werten in  $\mathcal{B}(\mathbb{C}^d)$ . Wenn jede dieser Folgen punktweise fast überall gegen eine  $L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))$ -Funktion  $M_\alpha$  konvergiert, dann konvergiert diese nach dem Lebesgue'schen Majorantensatz in jedem  $L^p(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))$  für  $1 \leq p < \infty$ , und es gilt:*

i) *Das Bild der Operatoren  $A_\alpha^{(n)}$  definiert durch die Funktionen  $M_\alpha^{(n)}$ , vgl. Definition 3.5, ist in  $L^2$  enthalten.*

ii) *Es gilt  $A_\alpha^{(n)} \rightarrow A_\alpha$  in  $\mathcal{B}(W_0^{1,2}, W_0^{-1,2})$  für  $n \rightarrow \infty$ .*

iii) *Für jedes  $\mathbf{k} \in \mathbb{C}^2$  und jeden Punkt  $\lambda$  aus der Resolventenmenge des Operators  $H_{\mathbf{k}}$  gibt es ein  $n_0$ , so dass für alle  $n > n_0$  der Punkt  $\lambda$  auch zur Resolventenmenge der Operatoren  $H_{\mathbf{k}}^{(n)}$  gehört. Darüber hinaus gilt*

$$\left(H_{\mathbf{k}}^{(n)} - \lambda\right)^{-1} \longrightarrow \left(H_{\mathbf{k}} - \lambda\right)^{-1} \quad \text{in } \mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{1,2}). \quad (3.90)$$

iv) *Die Konvergenz in (3.90) ist lokal gleichmäßig in  $\mathbf{k}$  und  $\lambda$ , genauer gesagt: wenn  $K \subset \mathbb{C}^2$  und  $\Lambda \subset \mathbb{C}$  kompakt sind und*

$$\Lambda \cap \left( \bigcup_{\mathbf{k} \in K} \text{spec}(H_{\mathbf{k}}) \right) = \emptyset, \quad (3.91)$$

*dann gibt es ein ganzzahliges  $n_0 > 0$ , so dass für jedes  $n > n_0$  kein Punkt  $\lambda$  aus  $\Lambda$  zu einem der Spektren der Operatoren  $H_{\mathbf{k}}^{(n)}$  für  $\mathbf{k} \in K$  gehört. Zudem ist die Konvergenz (3.90) gleichmäßig in  $k \in K$  und  $\lambda \in \Lambda$ .*

*Beweis.* (i) Die Funktionen  $M_\alpha^{(n)}$  sind stetig-differenzierbar. Damit kann man den zweiten Term in der Definition (3.5) des Operators partiell integrieren.

(ii) Sei  $\varphi$  aus  $W_0^{1,2}$ . Nach (3.5) erhalt man

$$\begin{aligned} \|(A_\alpha^{(n)} - A_\alpha)\varphi\|_{W_0^{-1,2}} &= \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} \langle (A_\alpha^{(n)} - A_\alpha)\varphi, \psi \rangle \\ &= \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} \int_\Omega \left\langle \left( M_\alpha^{(n)}(x) - M_\alpha(x) \right) \frac{d\varphi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} \\ &\quad + \left\langle \left( M_\alpha^{(n)}(x) - M_\alpha(x) \right)^* \varphi(x), \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx. \end{aligned}$$

Fur  $p > 2$  konnen wir diesen Ausdruck mittels der Holderschen Ungleichung weiter abschatzen:

$$\begin{aligned} &\leq \|M_\alpha^{(n)} - M_\alpha\|_{L^p(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \sup_{\|\psi\|_{W_0^{1,2}}=1} \left( \left\| \frac{d\varphi}{dx} \right\|_{L^2} \|\psi\|_{L^{\frac{2p}{p-2}}} + \|\varphi\|_{L^{\frac{2p}{p-2}}} \left\| \frac{d\psi}{dx} \right\|_{L^2} \right) \\ &\leq 2 \|\mathbb{1}\|_{\mathcal{B}(W_0^{1,2}, L^{\frac{2p}{p-2}})} \|M_\alpha^{(n)} - M_\alpha\|_{L^p(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \|\varphi\|_{W_0^{1,2}}. \end{aligned}$$

Die Behauptung folgt aus der Konvergenz  $M_\alpha^{(n)} \rightarrow M_\alpha$  in  $L^p(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))$ .

(iii) Sei  $\mathbf{k}$  aus  $\mathbb{C}^2$  und sei  $\lambda$  aus der Resolventenmenge von  $H_{\mathbf{k}}$ . Nach (3.10) gilt

$$H_{\mathbf{k}}^{(n)} - \lambda = H_{\mathbf{k}} - \lambda + \sum_{\alpha=1,2} k_\alpha (A_\alpha^{(n)} - A_\alpha).$$

Wir wissen bereits, dass  $(A_\alpha^{(n)} - A_\alpha) \rightarrow 0$  in  $\mathcal{B}(W_0^{1,2}, W_0^{-1,2})$ . Deshalb gilt fur alle  $n > n_0$

$$\left\| \sum_{\alpha=1,2} k_\alpha (A_\alpha^{(n)} - A_\alpha) \right\|_{\mathcal{B}(W_0^{1,2}, W_0^{-1,2})} < \frac{1}{\|(H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1}\|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{1,2})}} \quad (3.92)$$

und

$$(H_{\mathbf{k}}^{(n)} - \lambda)^{-1} = (H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1} \sum_{j=0}^{\infty} \left( \sum_{\alpha=1,2} k_\alpha (A_\alpha - A_\alpha^{(n)}) (H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1} \right)^j, \quad (3.93)$$

falls die Reihe auf der rechten Seite in  $\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{1,2})$  konvergiert. Die behauptete Konvergenz (3.90) folgt unmittelbar aus der Darstellung (3.93) und aus Punkt ii) dieses Lemmas.

(iv) Zuerst beweist man

$$\sup_{\substack{k \in K \\ \lambda \in \Lambda}} \left\| (H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1} \right\|_{\mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{1,2})} < \infty. \quad (3.94)$$

Dies folgt aus der Tatsache, dass die Abbildung

$$K \times \Lambda \ni (\mathbf{k}, \lambda) \longmapsto (H_{\mathbf{k}} - \lambda) \longmapsto (H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1} \in \mathcal{B}(W_0^{-1,2}, W_0^{1,2})$$

wohldefiniert und stetig ist. Infolgedessen ist (3.92) gleichmäßig in  $(\mathbf{k}, \lambda) \in K \times \Lambda$  für  $n > n_0$  erfüllt. Die gleichmäßige Konvergenz für (3.90) folgt unmittelbar aus (3.94) und der Darstellung (3.93) von  $(H_{\mathbf{k}}^{(n)} - \lambda)^{-1}$ .  $\square$

**Theorem 3.32.** *Seien für die Familien der Koeffizientenfunktionen  $\{M_\alpha^{(n)}\}_{n \in \mathbb{N}}$ ,  $\alpha = 0, 1, 2$ , die Voraussetzungen von Lemma 3.31 erfüllt.*

i) *Für jedes  $n \in \mathbb{N}$  und jedes  $\mathbf{k} \in \mathbb{C}^2$  hat der Operator  $H_{\mathbf{k}}^{(n)}|_{L^2}$  den gleichen Definitionsbereich wie  $H|_{L^2}$ , nämlich*

$$\begin{aligned} \text{dom}(H_{\mathbf{k}}^{(n)}|_{L^2}) &= \text{dom}(H|_{L^2}) = \\ &W_0^{1,2} \cap \left\{ \varphi \mid \varphi|_{(x_l, x_{l+1})} \in W^{2,2}((x_l, x_{l+1})), \text{ für } l = 0, \dots, L \right. \\ &\quad \left. \widehat{m}_l \lim_{\substack{x \rightarrow x_l \\ x > x_l}} \frac{d\varphi}{dx}(x) = \widehat{m}_{l-1} \lim_{\substack{x \rightarrow x_l \\ x < x_l}} \frac{d\varphi}{dx}(x), \text{ für } l = 1, \dots, L \right\}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

ii) *Für jedes  $n \in \mathbb{N}$  und jede eindimensionale analytische Mannigfaltigkeit  $\mathcal{S} \subset \mathbb{C}^2$  ist die Operatorfamilie  $\{H_{\mathbf{k}}^{(n)}|_{L^2}\}_{\mathbf{k} \in \mathcal{S}}$  eine holomorphe Operatorfamilie vom Typ (A), vgl. Kato [Kat84, VII.2]. Wenn insbesondere  $\hat{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}^2$  ist, dann bilden die Operatoren  $\{H_{\mathbf{k}}^{(n)}\}_{\{\mathbf{k} = \xi \hat{\mathbf{k}}, \xi \in \mathbb{C}\}}$  eine selbstadjungierte holomorphe Familie vom Typ (A) und die entsprechenden Resultate aus Kato [Kat84, VII.2] sind anwendbar. Im letzteren Fall besitzen die Eigenwertkurven für endliche und reelle  $\mathbf{k}$ -Werte keine Singularitäten.*

iii) *Für jedes  $\lambda \notin \text{spec } H_{\mathbf{k}}$  konvergieren in die Operatoren  $(H_{\mathbf{k}}^{(n)}|_{L^2} - \lambda)^{-1}$  gegen  $(H_{\mathbf{k}}|_{L^2} - \lambda)^{-1}$  in der nuklearen Norm. Diese Konvergenz ist sogar lokal gleichmäßig in  $\mathbf{k}$  und  $\lambda$  wie in Lemma 3.31 beschrieben.*

iv) *Wenn  $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$ , was nach Punkt ii) die Selbstadjungiertheit der Operatoren  $H_{\mathbf{k}}^{(n)}$  und  $H_{\mathbf{k}}$  impliziert, dann taucht asymptotisch das Spektrum von  $H_{\mathbf{k}}$  in den Spektren der Operatoren  $H_{\mathbf{k}}^{(n)}$  auf. Genauer gesagt: Wenn  $\lambda$  ein Eigenwert des Operators  $H_{\mathbf{k}}$  und  $\mathcal{U} \subset \mathbb{C}$  eine beliebige Umgebung von  $\lambda$  ist, dann*

gibt es ein  $n_0$ , so dass für jedes  $n > n_0$  der Operator  $H_{\mathbf{k}}^{(n)}$  Eigenwerte in  $\mathcal{U}$  besitzt.

*Beweis.* Soweit es Punkt i) und Punkt ii) betrifft, ist es ausreichend zu beweisen, dass die Operatoren  $A_{\alpha}^{(n)}|_{L^2}$  relativbeschränkt sind bezüglich  $H|_{L^2}$  mit Relativschränke Null. Die Behauptungen folgen dann aus [Kat84, Th. IV.1.1] und [Kat84, Th. VII.2.6].

Mittels partieller Integration des zweiten Terms folgert man aus (3.5) für jedes  $\varphi \in \text{dom}(H|_{L^2})$ :

$$\begin{aligned} \|A_{\alpha}^{(n)}\varphi\|_{L^2} &= \left\| \left( M_{\alpha}^{(n)} - (M_{\alpha}^{(n)})^* \right) \frac{d\varphi}{dx} - \varphi \frac{d}{dx} (M_{\alpha}^{(n)})^* \right\|_{L^2} \\ &\leq \|M_{\alpha}^{(n)} - (M_{\alpha}^{(n)})^*\|_{L^{\infty}(\Omega, \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \|\varphi\|_{W_0^{1,2}} + \left\| \frac{d}{dx} M_{\alpha}^{(n)} \right\|_{L^{\infty}(\Omega, \mathcal{B}(\mathbb{C}^d))} \|\varphi\|_{L^2}. \end{aligned}$$

Man kann  $\|\varphi\|_{W_0^{1,2}} = \|d\varphi/dx\|_{L^2}$  mittels (3.31), (3.32) und der Youngschen Ungleichung folgendermaßen weiter abschätzen:

$$\begin{aligned} \|\varphi\|_{W_0^{1,2}} &\leq \gamma_H \sqrt{\frac{\|H\varphi\|_{L^2} \|\varphi\|_{L^2}}{\min_{j=1,\dots,d} \text{ess inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}} \\ &\leq \delta \|H\varphi\|_{L^2} + \frac{1}{4\delta} \frac{\gamma_H^2 \|\varphi\|_{L^2}}{\min_{j=1,\dots,d} \text{ess inf}_{x \in \Omega} |m_j(x)|}, \end{aligned}$$

wobei  $\delta$  eine beliebige positive Zahl und  $\gamma_H$  die endliche positive Interpolationskonstante aus (3.32) ist. Daraus folgt die Relativbeschränktheit der Operatoren  $A_{\alpha}^{(n)}|_{L^2}$  bezüglich  $H|_{L^2}$  mit Schranke Null.

(iii) Unter Verwendung von Punkt iii) und Punkt iv) von Lemma 3.31 kann man die nukleare Norm von

$$(H_{\mathbf{k}} - \lambda)^{-1} - (H_{\mathbf{k}}^{(n)} - \lambda)^{-1}$$

auf dieselbe Weise abschätzen, wie das im Beweis von Punkt iv) von Theorem 3.9 geschehen ist, vgl. (3.29).

(iv) Theorem 3.32, Punkt iii) impliziert, dass die Operatoren  $H_{\mathbf{k}}^{(n)}$  gegen  $H_{\mathbf{k}}$  konvergieren. Somit folgt die Behauptung aus der Selbstadjungiertheit von  $H_{\mathbf{k}}^{(n)}$  und einem allgemeinen Störungstheorem für selbstadjungierte Operatoren, vgl. Kato [Kat84, V.4.3].  $\square$

# Kapitel 4

## Numerische Approximation der Eigenwerte

In diesem Kapitel behandeln wir die numerische Approximation der Eigenwerte und Eigenfunktionen von  $kp$ -Schrödingeroperatoren. Dabei stehen die numerischen Verfahren im Vordergrund, die in der Programmbibliothek KPLIB zur numerischen Lösung des Eigenwertproblems für  $kp$ -Schrödingeroperatoren implementiert sind. KPLIB ist eine in ANSI-C entwickelte Bibliothek, die Schnittstellen zur Beschreibung der Geometrie, der Randbedingungen, der Materialdaten, zur Diskretisierung, zur numerischen Lösung der algebraischen Eigenwertprobleme und zur Berechnung von Matrixelementen auf Basis der Eigenlösungen, wie der Impulsmatrixelemente, bereitstellt. Sie baut auf der Bibliothek PDELIB [FKL01] des WIAS zur Lösung partieller Differentialgleichungen auf. KPLIB ist Grundlage des Simulators WIAS-QW [BK] zur Berechnung der elektronischen Zustände in (Multi-)Quantum-Wells und deren optoelektronischer Eigenschaften. KPLIB und WIAS-QW haben wir für die numerischen Berechnungen im Kapitel 6 verwendet.

Die numerische Berechnung der Eigenlösungen besteht aus zwei Schritten: der Diskretisierung der  $kp$ -Operatoren und der numerischen Lösung der resultierenden algebraischen Eigenwertprobleme. In Kapitel 4.2 wird das in KPLIB verwendete Finite-Volumen-Schema zur Approximation der Eigenfunktionen beschrieben. Eine Beschreibung der in KPLIB und WIAS-QW verfügbaren Verfahren zur Lösung der algebraischen Eigenwertprobleme mit dem Fokus auf der Steuerung des iterativen Eigenwertlösers ARPACK [LMSY02] findet sich in Anhang D.

## 4.1 Vorbemerkungen

Zur Definition der diskreten kp-Operatoren machen wir im Folgenden die Voraussetzungen 3.1–3.4. Allerdings wollen wir dabei nicht nur stückweise konstante Koeffizientenfunktionen  $M_\alpha$ ,  $\alpha = 0, 1, 2$  zulassen, wie in Voraussetzung 3.4 gefordert, sondern auch deren *glatte* Approximationen im Sinne von Lemma 3.31. Zusätzlich machen wir zur Vereinfachung der Betrachtung die technische

**Voraussetzung 4.1.** *Für fast alle  $x \in \Omega$  seien die Matrizen  $M_\alpha(x)$ ,  $\alpha \in \{0, 1, 2\}$  schiefsymmetrisch über  $\mathbb{C}^d$ .*

Diese Voraussetzung schränkt die Übergangsbedingungen an Materialgrenzen auf den Fall des symmetrischen bzw. konventionellen Operator Orderings ein, siehe Kapitel 2.2.2.

Unter diesen Voraussetzungen können wir die den Operator  $A_\alpha$ ,  $\alpha \in \{0, 1, 2\}$  definierende Form aus Definition 3.5 schreiben als

$$\begin{aligned} \langle A_\alpha \varphi, \psi \rangle &= \int_{\Omega} \left\langle M_\alpha(x) \frac{d\varphi}{dx}(x), \psi(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} - \left\langle M_\alpha(x) \varphi, \frac{d\psi}{dx}(x) \right\rangle_{\mathbb{C}^d} dx \\ &= \sum_{j,l=1}^d \int_{\Omega} M_{\alpha jl}(x) \left( \frac{d\varphi_l}{dx}(x) \bar{\psi}_j(x) - \varphi_l(x) \frac{d\bar{\psi}_j}{dx}(x) \right) dx, \end{aligned} \quad (4.1)$$

für alle  $\varphi$  und  $\psi$  aus  $W_0^{1,2}(\Omega; \mathbb{C}^d)$ .

Zur Diskretisierung fassen wir die Operatorteile mit Differentialoperatoren gleicher Ordnung zusammen. Den kp-Schrödingeroperator können wir schreiben als

$$H_{\mathbf{k}} = H + A + W. \quad (4.2)$$

Dabei ist  $H$  der Operator nach Definition 3.5, in  $A$  sind alle Anteile erster Ordnung zusammengefasst

$$A = A_0 + k_1 A_1 + k_2 A_2, \quad (4.3)$$

und in  $W$  sind alle Potentialanteile enthalten

$$W = \sum_{\alpha=1}^2 k_\alpha B_\alpha + \sum_{\alpha,\beta=1}^2 k_\alpha k_\beta B_{\alpha\beta} + V + E. \quad (4.4)$$

Die Operatoren  $A$  und  $W$  sind jeweils definiert als

$$\langle A\varphi, \psi \rangle = \sum_{j,l=1}^d \int_{\Omega} \mathfrak{M}_{jl}(x) \left( \frac{d\varphi_l}{dx}(x) \bar{\psi}_j(x) - \varphi_l(x) \frac{d\bar{\psi}_j}{dx}(x) \right) dx \quad (4.5)$$

mit

$$\mathfrak{M} = M_0 + k_1 M_1 + k_2 M_2 \quad (4.6)$$

und

$$\langle W\varphi, \psi \rangle = \int_{\Omega} \langle w(x) \varphi(x), \psi(x) \rangle_{\mathbb{C}^d} dx \quad (4.7)$$

mit

$$w = \sum_{\alpha=1}^2 k_{\alpha} U_{\alpha} + \sum_{\alpha,\beta=1}^2 k_{\alpha} k_{\beta} U_{\alpha\beta} + v + e. \quad (4.8)$$

## 4.2 Finite-Volumen-Schema

Aufgrund dieser Darstellung werden wir uns im folgenden auf die Diskretisierung der skalaren Operatoren

$$\langle Hu, w \rangle = \int_{\Omega} m(x) \frac{du}{dx}(x) \frac{d\bar{w}}{dx}(x) dx, \quad (4.9)$$

$$\langle Au, w \rangle = \int_{\Omega} M(x) \left( \frac{du}{dx}(x) \bar{w}(x) - u(x) \frac{d\bar{w}}{dx}(x) \right) dx, \quad (4.10)$$

$$\langle Vu, w \rangle = \int_{\Omega} V(x) u(x) \bar{w}(x) dx, \quad (4.11)$$

beziehen, wobei  $m$  irgendeine der Funktionen  $m_j$  ist,  $M$  irgendeine der Funktionen  $\mathfrak{M}_{jl}$  ist,  $V$  irgendeine der Funktionen  $W_{jl}$  ist und  $u, w$  aus  $W_0^{1,2}(\Omega; \mathbb{C})$  sind. Aus den Diskretisierungen der einzelnen skalaren Anteile wird mittels eines blockorientierten Verfahrens eine *Bandmatrix* aufgestellt, die Systemmatrix des kp-Operators.

**Definition 4.2.** *Mit Bezug auf die endliche, disjunkte Zerlegung (3.3) des Raumintervalles  $\Omega = (x_0, x_{L+1})$  definieren wir das Zwischengitter*

$$x_{n-\frac{1}{2}} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{2} \quad (4.12)$$

mit  $x_{-\frac{1}{2}} = x_0$  und  $x_{N+\frac{1}{2}} = x_{L+1}$ . Die Finite-Volumen-Zellen sind dann gegeben durch

$$\Omega_n = [x_{n-\frac{1}{2}}, x_{n+\frac{1}{2}}]. \quad (4.13)$$

**Lemma 4.3.** Die Finite-Volumen-Diskretisierung der Terme 2. Ordnung sind gegeben durch

$$-\frac{m_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}u_{n-1} + \left(\frac{m_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} + \frac{m_n}{x_{n+1} - x_n}\right)u_n - \frac{m_n}{x_{n+1} - x_n}u_{n+1} \quad (4.14)$$

*Beweis.* Die Gleichung sei auf den Finite-Volumen-Zellen im schwachen Sinne erfüllt. Die Behauptung folgt mittels partieller Integration sowie linearer Approximationen der Ableitung in  $x_{n-\frac{1}{2}}$  und  $x_{n+\frac{1}{2}}$  in der Form

$$\frac{du}{dx}\left(x_{n-\frac{1}{2}}\right) \approx \frac{u_n - u_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}, \quad \frac{du}{dx}\left(x_{n+\frac{1}{2}}\right) \approx \frac{u_{n+1} - u_n}{x_{n+1} - x_n}. \quad (4.15)$$

□

**Lemma 4.4.** Die Finite-Volumen-Diskretisierung des Terms 1. Ordnung der Form

$$M(x)\frac{du}{dx} + \frac{d}{dx}\left(M(x)u(x)\right) \quad (4.16)$$

ist gegeben durch

$$-M_{n-1}u_{n-1} + M_n u_{n+1}. \quad (4.17)$$

*Beweis.* Die Gleichung sei im schwachen Sinne für jede Finite-Volumen-Zelle  $\Omega_n$  erfüllt. Dazu ist das Integral

$$I = \int_{\Omega_n} M(x)\frac{du}{dx} + \frac{d}{dx}\left(M(x)u(x)\right)dx \quad (4.18)$$

auszuwerten. Man erhält für die einzelnen Teile des Integrals

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_n} M(x)\frac{du}{dx}dx &= M_{n-1} \int_{x_{n-\frac{1}{2}}}^{x_n} \frac{du}{dx}dx + M_n \int_{x_n}^{x_{n+\frac{1}{2}}} \frac{du}{dx}dx \\ &= M_{n-1}(u(x_n) - u(x_{n-\frac{1}{2}})) + M_n(u(x_{n+\frac{1}{2}}) - u(x_n)), \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\int_{\Omega_n} \frac{d}{dx}\left(M(x)u(x)\right)dx = M_n u(x_{n+\frac{1}{2}}) - M_{n-1}u(x_{n-\frac{1}{2}}). \quad (4.20)$$

Damit ergibt sich insgesamt

$$I = -2M_{n-1}u(x_{n-\frac{1}{2}}) + (M_{n-1} - M_n)u(x_n) + 2M_n u(x_{n+\frac{1}{2}}). \quad (4.21)$$

Mittels linearer Approximation von  $u$  auf dem Zwischengitter

$$u(x_{n-\frac{1}{2}}) \approx \frac{u_n + u_{n-1}}{2}, \quad u(x_{n+\frac{1}{2}}) \approx \frac{u_{n+1} + u_n}{2} \quad (4.22)$$



folgt die Behauptung. □

**Lemma 4.5.** *Die Finite-Volumen-Diskretisierung der Terme 0. Ordnung der Form (4.11) ist gegeben durch*

$$V_n \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{2} u_n \text{ mit } V_n = V(x_n). \quad (4.23)$$

*Beweis.* Die Gleichung sei im schwachen Sinne für die Finite-Volumen-Zelle  $\Omega_n$  erfüllt. Die Behauptung folgt dann mittels der Quadraturformel

$$\int_{\Omega_n} V(x)u(x)dx \approx V(x_n)u(x_n)(x_{n+\frac{1}{2}} - x_{n-\frac{1}{2}}). \quad (4.24)$$

□

**Bemerkung 4.6.** *Im Falle konstanter Koeffizienten stimmt dieses Schema mit einem Finite-Differenzen-Schema überein. Eine Untersuchung der Eigenschaften des Finite-Differenzen-Verfahren für  $kp$ -Schrödingeroperatoren mit Hilfe diskreter ebener Wellen findet sich in [Sol03].*



# Kapitel 5

## Achtbandmodell für kubische Materialien

In diesem Kapitel wird die Modellierung elektronischer Zustände in Quantum-Wells und Multi-Quantum-Wells auf Basis des Achtband-Modells für Halbleitermaterialien mit kubischer Kristallsymmetrie betrachtet. Dieses Modell haben wir schon in Kapitel 2.1.2 zur Beschreibung der elektronischen Zustände in Volumenhalbleitern kennengelernt. In diesem Kapitel wird dieses Modell um Terme zur Berücksichtigung mechanischer Verspannung erweitert. Dazu findet sich als Erstes eine Darstellung der Modellierung mechanisch verspannter Quantenschichten anhand des technologisch häufig vorkommenden Falles der biaxialen Verspannung. Daran schliesst sich eine Darstellung des  $k_p$ -Hamiltonian für Volumenmaterialien und eine Diskussion seiner Eigenschaften an. Darauf aufbauend wird die Modellierung der elektronischen Zustände in Quantum-Wells und Multi-Quantum-Wells diskutiert, was auf den zugehörigen  $k_p$ -Schrödingeroperator führt. Die Koeffizientenmatrizen dieses  $k_p$ -Schrödingeroperators sind in Abschnitt 5.4 dargestellt. Mit diesen Koeffizientenmatrizen wird dann die in Kapitel 3 hergeleitete Abschätzung der Bandlücke für dieses konkrete Beispiel ausgewertet. Abschliessend wird eine Methode diskutiert, um die in Kapitel 3 gemachten Voraussetzungen an die Koeffizientenmatrizen zu erfüllen und so Spurious Solutions zu vermeiden.

### 5.1 Mechanisch verspannte Quantenschichten

Beim Epitaxiewachstum von dünnen Halbleiterschichten auf einem Substrat, passt sich das Kristallgitter des Schichtmaterials an das des Substrates an,

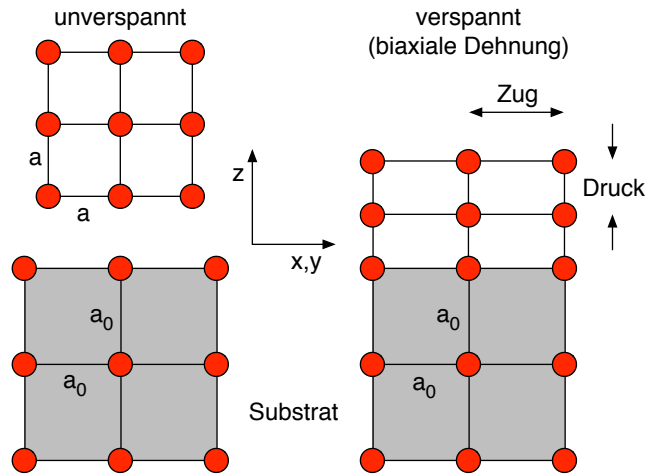


Abbildung 5.1: Mechanisch verspannte Quantenschicht.

siehe Abbildung 5.1. Sind die Gitterkonstanten  $a$  der unverspannten Quantenschicht und die Gitterkonstante  $a_{sub}$  des Substrats voneinander verschieden, so führt dies zu einer Verzerrung im Kristallgitter der aufgewachsenen Materialschicht.

Wir betrachten Halbleiter mit kubischem Kristallgitter und nehmen der Einfachheit halber an, dass die Wachstumsrichtung der Quantenschicht parallel zur  $z$ -Achse ist, die kristallographisch als  $[001]$ -Richtung bezeichnet wird. Also passt sich beim Aufwachsen das Kristallgitter der Quantenschicht in der  $xy$ -Ebene an das Kristallgitter des Substrats an. Daraus resultiert eine *biaxiale Verspannung* (beschrieben durch den Verzerrungstensor  $\varepsilon$ ), die entlang  $x$ - und  $y$ -Richtung gleich groß ist und durch die Gitterfehlpassung  $f$  gegeben ist:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = f = \frac{a_{sub} - a}{a}. \quad (5.1)$$

Nun macht man üblicherweise die Annahme, dass keine Scherspannungen auftreten und die Struktur in Wachstumsrichtung spannungsfrei ist. In diesem Fall ist der Verzerrungstensor  $\varepsilon$  diagonal, d. h. es gilt

$$\varepsilon = \text{diag}(\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}).$$

Die Verzerrung  $\varepsilon_{zz}$  in Wachstumsrichtung ergibt sich aus der Annahme der Spannungsfreiheit in  $z$ -Richtung zu [Chu95, Kap 4.5.2]

$$\varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx}, \quad (5.2)$$

wobei  $C_{11}$  und  $C_{12}$  sind elastische Konstanten der Quantenschicht sind.

Ist die Gitterkonstante der Quantenschicht größer als die des Substrats spricht man von *stauchender* (*kompRESSIVER*) Verspannung. In diesem Fall ist  $\varepsilon_{xx} < 0$ . Ist die Gitterkonstante der Quantenschicht kleiner als die des Substrates spricht man von *dehnender* (*TENSILER*) Verspannung, d. h.  $\varepsilon_{xx} > 0$ .

## 5.2 Achtbandmodell für Volumenmaterialien

Der Achtband-kp-Hamiltonian für kubische Materialien hat folgende Struktur:

$$H = H_0 + H_\Delta + H_1(k) + H_2(k) + D(\varepsilon). \quad (5.3)$$

Bei den einzelnen Anteilen handelt es sich um:

- $H_0$ : Bandkanten (Basis-Energie der Basis-Funktionen),
- $H_\Delta$ : Spin-Bahn-Wechselwirkung,
- $H_1(k)$ : kp-Kopplung in erster Ordnung in  $k$  (Interband-Kopplung),
- $H_2(k)$ : kp-Kopplung in zweiter Ordnung in  $k$  (Intraband-Kopplung),
- $D(\varepsilon)$ : Kopplungen aufgrund mechanischer Verspannung.

Die Energie der Basis-Funktionen ist diagonal und gegeben durch

$$H_0 = \text{diag}(E_c, E_v, E_v, E_v, E_c, E_v, E_v, E_v). \quad (5.4)$$

$E_c$  ist die Leitungsbandkante und  $E_v$  die Valenzbandkante. Die Bandlücke  $E_g$  ist gegeben durch  $E_c - E_v$ . Die Spin-Bahn-Wechselwirkungsmatrix ist von der Form

$$H_\Delta = \begin{pmatrix} G_{so} + iG_z & G_y + iG_x \\ -G_y + iG_x & G_{so} - iG_z \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

mit den Matrizen

$$G_{so} = \frac{\Delta_{so}}{3} \text{diag}(0, -1, -1, -1), \quad (5.6a)$$

$$G_x = \frac{\Delta_{so}}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.6b)$$

$$G_y = \frac{\Delta_{so}}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.6c)$$

$$G_z = \frac{\Delta_{so}}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.6d)$$

$\Delta_{so}$  ist die Größe der Spin-Bahn-Aufspaltung. Die kp-Kopplung der Bänder 1. Ordnung hat die Form (siehe [Kan82, EW96])

$$H_1(k) = \begin{pmatrix} H4(k) & 0 \\ 0 & H4^*(-k) \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

mit

$$H4(k) = \begin{pmatrix} 0 & iP_0k_x & iP_0k_y & iP_0k_z \\ -iP_0k_x & 0 & 0 & 0 \\ -iP_0k_y & 0 & 0 & 0 \\ -iP_0k_z & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.8)$$

Die kp-Kopplung in 2. Ordnung ist von der Form (siehe [Kan82, EW96])

$$H_2(k) = \begin{pmatrix} Ak^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & S(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Ak^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S(k) \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

mit

$$Ak^2 = A(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (5.10)$$

sowie der als Shockley-Matrix bezeichneten  $3 \times 3$ -Matrix

$$S(k) = \begin{pmatrix} S_{11}(k) & Nk_xk_y & Nk_xk_z \\ Nk_xk_y & S_{22}(k) & Nk_yk_z \\ Nk_xk_z & Nk_yk_z & S_{33}(k) \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

mit den Diagonalelementen

$$S_{11}(k) = Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2), \quad (5.12a)$$

$$S_{22}(k) = Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2), \quad (5.12b)$$

$$S_{33}(k) = Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2). \quad (5.12c)$$

Die Deformationswechselwirkungsmatrix  $D(\varepsilon)$ , die den Einfluss der mechanischen Verspannung über *Pikus-Bir-Deformationspotentiale* beschreibt, hat eine ähnliche Struktur wie die Matrix der kp-Kopplung in 2. Ordnung [BP74, EW96]:

$$D(\varepsilon) = \begin{pmatrix} a_s(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xx}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D3(\varepsilon) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_s(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xx}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D3(\varepsilon) \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Analog zur Shockley-Matrix  $S$  ist die  $3 \times 3$  Matrix  $D3$  gegeben durch:

$$D3(\varepsilon) = \begin{pmatrix} D3_{11}(\varepsilon) & n_\varepsilon \varepsilon_{xy} & n_\varepsilon \varepsilon_{xz} \\ n_\varepsilon \varepsilon_{yx} & D3_{22}(\varepsilon) & n_\varepsilon \varepsilon_{yz} \\ n_\varepsilon \varepsilon_{zx} & n_\varepsilon \varepsilon_{zy} & D3_{33}(\varepsilon) \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

mit den Diagonalelementen

$$D3_{11}(\varepsilon) = l_\varepsilon \varepsilon_{xx} + m_\varepsilon (\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad (5.15a)$$

$$D3_{22}(\varepsilon) = l_\varepsilon \varepsilon_{yy} + m_\varepsilon (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}), \quad (5.15b)$$

$$D3_{33}(\varepsilon) = l_\varepsilon \varepsilon_{zz} + m_\varepsilon (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}). \quad (5.15c)$$

Der Koeffizient  $P_0$  der kp-Kopplung erster Ordnung und die Koeffizienten  $A$ ,  $L$ ,  $M$  und  $N$  der kp-Kopplung zweiter Ordnung sind dabei folgendermaßen durch Materialparameter bestimmt:

$$A = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{m_0}{m_c} - \frac{E_p}{E_g} \frac{E_g + 2\Delta_{so}/3}{E_g + \Delta_{so}} \right), \quad (5.16)$$

$$L = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( (\gamma_1^L + 4\gamma_2^L) - \frac{E_p}{E_g} \right), \quad (5.17)$$

$$M = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1^L - 2\gamma_2^L), \quad (5.18)$$

$$N = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( 6\gamma_3^L - \frac{E_p}{E_g} \right), \quad (5.19)$$

$$P_0 = \sqrt{\frac{2m_0 E_p}{\hbar^2}}. \quad (5.20)$$

Dabei ist  $E_p$  das optische Matrixelement,  $E_g$  die Bandlücke,  $\Delta_{so}$  die Spin-Bahn-Aufspaltung,  $m_c$  die Leitungsbandmasse und  $\gamma_1^L$ ,  $\gamma_2^L$ ,  $\gamma_3^L$  die Luttingerparameter. Die Koeffizienten  $a_s$ ,  $l_\varepsilon$ ,  $m_\varepsilon$ ,  $n_\varepsilon$  der Deformationswechselwirkung sind folgendermaßen durch die Deformationspotentiale  $a_c$ ,  $a_v$ ,  $b$ ,  $d$  definiert:

$$a_s = a_c, \quad (5.21)$$

$$l_\varepsilon = a_v + 2b, \quad (5.22)$$

$$m_\varepsilon = a_v - b \quad (5.23)$$

$$n_\varepsilon = \sqrt{3}d. \quad (5.24)$$

Dabei bezeichnen  $a_c$  und  $a_v$  jeweils das Leitungsband- und Valenzband-Deformationspotential.  $b$  und  $d$  sind die Scherdeformationspotentiale.

### 5.3 Achtband-Modell für Quantenschichten

Wir betrachten nun den kp-Schrödingeroperator des Achtband-Modells für Quantenschichten wie Quantum-Wells und Multi-Quantum-Wells. Wie dieser mit dem kp-Hamiltonian für Volumenmaterialien zusammenhängt haben wir bereits in Abschnitt 2.2.2 diskutiert. Hier möchte ich nur kurz darauf eingehen, wie sich die einzelnen Modellierungsansätze, d. h. das Operator Ordering, auf die Struktur der im folgenden Abschnitt aufgeführten Koeffizientenmatrizen auswirken:



- Für konventionelles bzw. symmetrisches Operator Ordering sind die Matrizen  $M_\alpha$ ,  $\alpha = 0, 1, 2$  schiefadjungiert.
- Für Operator-Ordering der Valenzband-Terme nach Burt-Foreman weichen die Matrizen  $M_1$  und  $M_2$  von dieser Schiefadjungiertheit ab, siehe [For97].
- Daneben gibt es Vorschläge auch bei der durch die Koeffizientenmatrix  $M_0$  beschriebenen Valenz-Leitungsband-Kopplung vom symmetrischen Operator Ordering und damit der Schiefadjungiertheit abzuweichen, siehe [For97, Bur98, PFFD01, RAE<sup>+</sup>02, MTPP05].

Wir werden im Folgenden den Fall des symmetrischen Operator-Orderings betrachten. Zum einen tragen die Kopplungsmatrizen  $M_0$  unabhängig vom Operator Ordering nicht zur Bandlückenabschätzung bei. Zweitens sind die Positivitätsbedingungen an die Koeffizienten des Achtband-Modells (siehe Bemerkung 5.1 und 5.2) vom Operator Ordering unabhängig. Zudem bewirkt eine Abweichung vom konventionellen Falle für die Matrizen  $M_1$  und  $M_2$  nur eine Verschlechterung der Konstanten  $N_{max}$  (5.69). Es hat aber keinen Einfluss auf die garantierte Bandlücke bei  $k = 0$ , siehe (5.75).

## 5.4 Koeffizientenmatrizen der Normalform des Modells

Im Folgenden geben wir die Darstellung des Achtband-Hamiltonians in Normalform, d. h. mit den Koeffizientenmatrizen  $m$ ,  $M_\alpha$  mit  $\alpha = 0, 1, 2$ ,  $U_\alpha$ ,  $U_{\alpha\beta}$  mit  $\alpha, \beta = 1, 2$ ,  $v$  und  $e$  an. Wir fangen an mit den reziproken Effektivmassen des Hauptteils:

$$m = \begin{pmatrix} m4 & 0 \\ 0 & m4 \end{pmatrix}, \quad m4 = \begin{pmatrix} A & & & \\ & M & & \\ & & M & \\ & & & L \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

Die Parameter mögen die folgenden Voraussetzungen erfüllen:

$$A > 0, \quad M < 0, \quad L < 0. \quad (5.26)$$

Die Bandkanten sind gegeben durch

$$e = \begin{pmatrix} e4 & 0 \\ 0 & e4 \end{pmatrix}, \quad e4 = \begin{pmatrix} E_c & & & \\ & E_v & & \\ & & E_v & \\ & & & E_v \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

mit der Voraussetzung an die Leitungsbandkanten  $E_c$  und  $E_v$

$$E_c > 0, \quad E_v < 0. \quad (5.28)$$

Die Koeffizientenmatrizen der kp-Kopplung erster Ordnung lauten, vgl.  $H_1$  (5.7):

$$M_0 = \begin{pmatrix} M4_0 & 0 \\ 0 & M4_0 \end{pmatrix}, \quad M4_0 = \frac{P_0}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.29)$$

$$U_1 = \begin{pmatrix} U4_1 & 0 \\ 0 & U4_1 \end{pmatrix}, \quad U4_1 = P_0 \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.30)$$

$$U_2 = \begin{pmatrix} U4_2 & 0 \\ 0 & U4_2 \end{pmatrix}, \quad U4_2 = P_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.31)$$

Die übrigen Koeffizientenmatrizen der Differentialoperatoren erster Ordnung (Intrabandkopplungen) sind gegeben durch:

$$M_1 = \begin{pmatrix} M4_1 & 0 \\ 0 & M4_1 \end{pmatrix}, \quad M4_1 = -i\frac{N}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.32)$$

$$M_2 = \begin{pmatrix} M4_2 & 0 \\ 0 & M4_2 \end{pmatrix}, \quad M4_2 = -i\frac{N}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.33)$$

Die Koeffizientenmatrix der  $k^2$ -Terme in nullter Ordnung lauten:

$$U_{11} = \begin{pmatrix} U_{411} & 0 \\ 0 & U_{411} \end{pmatrix}, \quad U_{411} = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M + L_M & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

$$U_{22} = \begin{pmatrix} U_{422} & 0 \\ 0 & U_{422} \end{pmatrix}, \quad U_{422} = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M + L_M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M \end{pmatrix}, \quad (5.35)$$

$$U_{12} + U_{21} = \begin{pmatrix} U_{412} + U_{421} & 0 \\ 0 & U_{412} + U_{421} \end{pmatrix}, \quad (5.36a)$$

$$U_{412} + U_{421} = N \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.36b)$$

Die Potentialwechselwirkungsmatrix setzt sich zusammen aus der Spin-Bahn-Wechselwirkung  $H_\Delta$  (5.5) und der von der mechanischen Verspannung abhängigen Deformationswechselwirkung  $D(\varepsilon)$  (5.13):

$$v = H_\Delta + D(\varepsilon). \quad (5.37)$$

## 5.5 Abschätzung der Bandlücke

Im Folgenden wollen wir das Achtband-Modell für den technologisch häufig anzutreffenden Fall der *biaxial verspannten* Quantenschichten betrachten. Die Modellierung der mechanischen Verspannung in biaxial verspannten Quantenschichten haben wir bereits in Abschnitt 5.1 kennengelernt. Für biaxiale Verspannung ist der Verzerrungstensor  $\varepsilon$  diagonal. Die Diagonalstruktur von  $\varepsilon$  hat zur Folge, dass Deformationswechselwirkungsmatrix  $D(\varepsilon)$  (5.13) ebenfalls diagonal ist, was in einer Verschiebung der Bandkanten  $e$  resultiert. D. h. die Potentialwechselwirkungsmatrix  $v$  besteht in diesem Fall nur aus dem Spin-Bahn-Anteil  $H_\Delta$ .

Wir spezifizieren nun die Abschätzung der Bandlücke aus Theorem 3.24 für das Achtband-kp-Modell. Dazu müssen wir zunächst nachweisen, dass die Koeffizientenmatrizen  $U_{11}$ ,  $U_{22}$ ,  $U_{12}$  und  $U_{21}$  die Voraussetzung 3.22 erfüllen.

Zudem zeigen wir, dass  $v = H_\Delta$  im Sinne von Voraussetzung 3.23  $\Theta$ -wachsend ist, d. h. der Bedingung (3.54) genügt.

Der Konjugationsoperator  $\tilde{\Theta}$  (3.11) ist für das Achtband-Modell gegeben durch

$$\tilde{\Theta} = \begin{pmatrix} \Theta_4 & 0 \\ 0 & \Theta_4 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \Theta_4 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.38)$$

Die Potentialmatrix  $v$  ist nichtdiagonal und gegeben durch

$$v = H_\Delta = \begin{pmatrix} G_{so} + iG_z & G_y + iG_x \\ -G_y + iG_x & G_{so} - iG_z \end{pmatrix}.$$

Nun kann man nachrechnen, dass  $H_\Delta$  mit  $\tilde{\Theta}$  kommutiert und dass gilt

$$\tilde{\Theta}H_\Delta = H_\Delta\tilde{\Theta} = -H_\Delta.$$

Die Eigenwerte lauten von  $H_\Delta$  lauten (siehe Anhang B):

$$-\Delta \quad (\text{zweifach}), \quad 0 \quad (\text{sechsfach}). \quad (5.39)$$

Daraus folgt, dass

$$\frac{1}{2} \inf \text{spec} (\tilde{\Theta}H_\Delta + H_\Delta\tilde{\Theta}) = \inf \text{spec}(-H_\Delta) = 0$$

gilt. Mit den Bezeichnungen aus Theorem 3.24 bedeutet das

$$v_{\Theta^-} = 0, \quad v_{\Theta^+} = H_\Delta. \quad (5.40)$$

Damit trägt nach Theorem 3.24 die Spin-Bahn-Wechselwirkung nicht zu einer Verkleinerung der Bandlücke bei.

### 5.5.1 Bedingungen für die Positivität der $k^2$ -Terme

Zur Erfüllung von Voraussetzung 3.22 wird benötigt, dass das Spektrum von

$$\tilde{U}(\eta) = \frac{1}{2}(\tilde{\Theta}U_\eta + U_\eta\tilde{\Theta})$$

mit  $U_\eta$  gemäß (3.52) nicht negativ ist. In unserem Fall hat  $U_\eta$  die Blockdiagonaldarstellung

$$U_\eta = \begin{pmatrix} U_{4\eta} & 0 \\ 0 & U_{4\eta} \end{pmatrix} \quad (5.41)$$

mit

$$U_{4\eta} = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M + \cos^2(\eta)L_M & \sin(\eta)\cos(\eta)N & 0 \\ 0 & \sin(\eta)\cos(\eta)N & M + \sin^2(\eta)L_M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M \end{pmatrix}. \quad (5.42)$$

Damit ergibt sich für  $\tilde{U}(\eta)$

$$\begin{aligned} \tilde{U}(\eta) &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \Theta 4U_{4\eta}(\eta) + U_{4\eta}(\eta)\Theta 4 & 0 \\ 0 & \Theta 4U_{4\eta}(\eta) + U_{4\eta}(\eta)\Theta 4 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \tilde{U}_{4\eta}(\eta) & 0 \\ 0 & \tilde{U}_{4\eta}(\eta) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.43)$$

wobei

$$\tilde{U}_{4\eta}(\eta) = \begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -M - \cos^2(\eta)L_M & -\sin(\eta)\cos(\eta)N & 0 \\ 0 & -\sin(\eta)\cos(\eta)N & -M - \sin^2(\eta)L_M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -M \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

und

$$L_M \stackrel{def}{=} L - M. \quad (5.45)$$

Aus der Struktur der Matrix lässt sich unmittelbar ablesen, dass

$$\lambda_1 = A, \quad \lambda_2 = -M$$

zweifach entartete Eigenwerte der Matrix  $\tilde{U}(\eta)$  sind. Die übrigen Eigenwerte sind durch die Eigenwerte der Matrix

$$\begin{pmatrix} -M - \cos^2(\eta)L_M & -\sin(\eta)\cos(\eta)N \\ -\sin(\eta)\cos(\eta)N & -M - \sin^2(\eta)L_M \end{pmatrix}, \quad (5.46)$$

d. h. durch die Nullstellen des charakteristischen Polynoms

$$(M + \cos^2(\eta)L_M + \lambda)(M + \sin^2(\eta)L_M + \lambda) - \sin^2(\eta)\cos^2(\eta)N^2 = 0$$

gegeben. Dieses lässt sich zu

$$\lambda^2 + (2M + L_M)\lambda - \sin^2(\eta) \cos^2(\eta)(N^2 - L_M^2) + M^2 + ML_M = 0 \quad (5.47)$$

umformen und besitzt die Nullstellen

$$\lambda_{\pm}(\eta) = -\frac{1}{2} \left( M + L \pm \sqrt{L_M^2 + \sin^2(2\eta)(N^2 - L_M^2)} \right). \quad (5.48)$$

Gesucht wird nun das Minimum der Eigenwerte. Zur Analyse der Eigenwerte betrachten wir die Diskriminante von (5.48). Diese lässt sich folgendermaßen von unten und oben abschätzen:

$$\min\{L_M^2, N^2\} \leq L_M^2 + \sin^2(2\eta)(N^2 - L_M^2) \leq \max\{L_M^2, N^2\}.$$

Nach Voraussetzung sind  $M < 0$  und  $L < 0$ . Damit ist das Minimum der Eigenwerte  $\lambda_+(\eta)$ ,  $\lambda_-(\eta)$  für alle  $\eta \in [0, 2\pi]$  gegeben durch

$$\lambda_+ = -\frac{1}{2} \left( M + L + \max\{|L_M|, |N|\} \right). \quad (5.49)$$

Zur weiteren Analyse machen wir die Fallunterscheidung: (a)  $|N| < |L_M|$  und (b)  $|N| > |L_M|$ .

Im Fall (a) erhalten wir

$$\lambda_+ = -\frac{1}{2} \left( M + L + |L_M| \right). \quad (5.50)$$

Falls nun  $L < M$  und unter der vorausgesetzten Negativität von  $L$  und  $M$  ist  $|L_M| = |L - M| = L - M$  und damit  $\lambda_+ = -L > 0$ . Im Fall  $L > M$  ergibt sich umgekehrt  $\lambda_+ = -M > 0$ . Damit ist das Minimum der Eigenwerte im Fall (a) gegeben durch

$$\lambda_+ = -\min\{L, M\}. \quad (5.51)$$

Aufgrund der vorausgesetzten Negativität von  $L$  und  $M$  ist damit  $\lambda_+$  immer positiv und es ergibt sich keine zusätzliche Bedingung an die Parameter.

Im Fall (b) erhalten wir für  $\lambda_+$

$$\lambda_+ = -\frac{1}{2} \left( M + L + |N| \right). \quad (5.52)$$

d. h. für den generischen Fall  $N < 0$  (falls  $E_p/E_g < 6\gamma_3$ ):

$$\lambda_+ = -\frac{1}{2} \left( M + L - N \right). \quad (5.53)$$

Soll nun  $\lambda_+$  positiv sein, so resultiert daraus folgende Bedingung für die Koeffizienten des Achtband-Modells:

$$N - M - L > 0. \quad (5.54)$$

Durch Einsetzen der Definitionen für  $M$ ,  $L$  und  $N$  erhält man daraus

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( 6\gamma_3 - \frac{E_p}{E_g} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \gamma_1 + 4\gamma_2 - \frac{E_p}{E_g} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \gamma_1 - 2\gamma_2 \right) > 0,$$

und nach elementaren Umformungen

$$\gamma_1^L + \gamma_2^L > 3\gamma_3^L. \quad (5.55)$$

Dies ist eine Bedingung an die Luttinger-Parameter, welche die effektiven Massen der schweren und leichten Löcher definieren, vgl. (5.82), (5.83), (5.84).

Für  $N > 0$ , was für sehr große Werte des optischen Matrixelements  $E_p$  auch möglich ist, ergibt sich die Bedingung

$$-(L + M + N) > 0. \quad (5.56)$$

Nach Einsetzen der Definitionen der Parameter  $L$ ,  $M$  und  $N$  ergibt sich daraus die Bedingung

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( 6\gamma_3 - \frac{E_p}{E_g} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \gamma_1 + 4\gamma_2 - \frac{E_p}{E_g} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \gamma_1 - 2\gamma_2 \right) > 0, \quad (5.57)$$

und nach Umformen erhält man die nun zusätzlich von  $E_p/E_g$  abhängige Bedingung:

$$\gamma_1 + \gamma_2 + 3\gamma_3 - \frac{E_p}{E_g} > 0. \quad (5.58)$$

Wir fassen nun die Ergebnisse zusammen in der

**Bemerkung 5.1** (Bedingung für die Koeffizienten  $A$ ,  $L$  und  $N$ ). *Seien  $A(x)$ ,  $L(x)$  und  $N(x)$  die Koeffizientenfunktionen des Achtband-Modells. Sei die Menge  $\Omega_-$  definiert durch*

$$\Omega_- = \{x \in \Omega : N(x) \leq 0\}. \quad (5.59)$$

*Sei für fast alle  $x \in \Omega_-$  die Bedingung*

$$N(x) - M(x) - L(x) > 0 \quad (5.60)$$

erfüllt und sei für fast alle  $x \in \Omega \setminus \Omega_-$  die Bedingung

$$L(x) + M(x) + N(x) < 0 \quad (5.61)$$

erfüllt. Seien außerdem für fast alle  $x \in \Omega$  die Bedingungen

$$M(x) < 0 \quad \text{und} \quad L(x) < 0 \quad (5.62)$$

erfüllt. Dann folgt daraus, dass Matrixfunktionen  $U_{11}$ ,  $U_{22}$ ,  $U_{12}$  und  $U_{21}$  die Voraussetzung 3.22 erfüllen.

Alternativ kann man diese Voraussetzung auch als für praktische Zwecke geeigneter Bedingung an die Materialparameter formulieren:

**Bemerkung 5.2** (Bedingung an die Materialparameter  $\gamma_1^L$ ,  $\gamma_2^L$ ,  $\gamma_3^L$ ,  $E_p$ ,  $E_g$ ). Seien  $\gamma_1^L(x)$ ,  $\gamma_2^L(x)$ ,  $\gamma_3^L(x)$  die Funktionen der Luttinger-Parameter, sei die Funktion  $E_g(x)$  die Größe der Bandlücke und die Funktion  $E_p(x)$  das optische Matrixelement. Sei die Menge  $\Omega_-$  definiert durch

$$\Omega_- = \left\{ x \in \Omega : 6\gamma_3^L(x) \leq \frac{E_p(x)}{E_g(x)} \right\}. \quad (5.63)$$

Sei für fast alle  $x \in \Omega_-$  die Bedingung

$$\gamma_1^L(x) + \gamma_2^L(x) > 3\gamma_3^L(x) \quad (5.64)$$

erfüllt und sei für fast alle  $x \in \Omega \setminus \Omega_-$  die Bedingung

$$\gamma_1^L(x) + \gamma_2^L(x) + 3\gamma_3^L(x) - \frac{E_p(x)}{E_g(x)} > 0 \quad (5.65)$$

erfüllt. Seien außerdem für fast alle  $x \in \Omega$  die Bedingungen

$$\gamma_1^L(x) + 4\gamma_2^L(x) - \frac{E_p(x)}{E_g(x)} > 0, \quad (5.66)$$

$$\gamma_1^L(x) - 2\gamma_2^L(x) > 0 \quad (5.67)$$

erfüllt. Dann folgt daraus, dass Matrixfunktionen  $U_{11}$ ,  $U_{22}$ ,  $U_{12}$  und  $U_{21}$  die Voraussetzung 3.22 erfüllen.



## 5.5.2 Größe der garantierten Bandlücke

Um die Voraussetzungen von Theorem 3.24 zu erfüllen, brauchen wir noch zusätzlich zu den in Bemerkung 5.1 bzw. 5.2 formulierten Voraussetzungen die Positivität der Koeffizientenfunktion  $A(x)$ , d. h. die

**Voraussetzung 5.3.** *Die Koeffizientenfunktion  $A(x)$  genüge fast alle  $x \in \Omega$  der Bedingung*

$$A(x) > 0. \quad (5.68)$$

Sind nun alle diese Voraussetzungen erfüllt, dann erfüllen die Koeffizientenfunktionen des Achtband-Modells alle Voraussetzung von Theorem 3.24 und wir können dieses zur Abschätzung der Größe der Bandlücke benutzen.

Dazu benötigen wir noch die  $L^\infty$ -Normen der Matrixfunktionen  $M_1$  und  $M_2$ . Diese sind rein imaginär und schiefsymmetrisch. Damit ist ihre  $L^\infty$ -Norm über den maximalen Eigenwert von  $iM_1$  sowie  $iM_2$  gegeben und man bestimmt diesen unmittelbar zu  $N/2$ . Damit erhalten wir

$$\|M_1\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^8))} = \|M_2\|_{L^\infty(\Omega; \mathcal{B}(\mathbb{C}^8))} = \frac{1}{2} \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} N(x) = \frac{1}{2} N_{max}. \quad (5.69)$$

Des Weiteren benötigen wir die Größe der effektiven globalen Bandlücke, siehe (3.36). Für den hier betrachteten Fall biaxial verspannter Quantenschichten ist  $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$  und  $\varepsilon_{zz}$  wie in (5.2) gegeben. Die Deformationswechselwirkungsmatrix  $D(\varepsilon)$  hat dann wie bereits erwähnt Diagonalstruktur und ist gegeben durch

$$D(\varepsilon) = \operatorname{diag}(a_{sc}(\varepsilon), a_{sx}(\varepsilon), a_{sy}(\varepsilon), a_{sz}(\varepsilon), a_{sc}(\varepsilon), a_{sx}(\varepsilon), a_{sy}(\varepsilon), a_{sz}(\varepsilon))$$

mit den durch die Deformationspotentiale definierten Bandkantenverschiebungen

$$\begin{aligned} a_{sc}(\varepsilon) &= a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xx}) \\ a_{sx}(\varepsilon) &= l_\varepsilon \varepsilon_{xx} + m_\varepsilon(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \\ a_{sy}(\varepsilon) &= l_\varepsilon \varepsilon_{yy} + m_\varepsilon(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}), \\ a_{sz}(\varepsilon) &= l_\varepsilon \varepsilon_{zz} + m_\varepsilon(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}), \end{aligned}$$

wobei  $l_\varepsilon$  und  $m_\varepsilon$  wie in (5.22) und (5.23) definiert sind. Diese Bandkantenverschiebung addieren wir nun zu der Leitungsbandkante  $E_c$  und der Valenz-

bandkante  $E_v$  hinzu und erhalten für den effektive Bandkantenkoeffizientenfunktion  $e$ :

$$e = \text{diag}(E_{cs}, E_{vx}, E_{vy}, E_{vz}, E_{cs}, E_{vx}, E_{vy}, E_{vz}),$$

wobei

$$\begin{aligned} E_{cs} &= E_c + a_{sc}(\varepsilon) = E_v + E_g + a_{sc}(\varepsilon) \\ E_{vx} &= E_v + a_{sx}(\varepsilon) \\ E_{vy} &= E_v + a_{sy}(\varepsilon) \\ E_{vz} &= E_v + a_{sz}(\varepsilon). \end{aligned}$$

Damit erhalten wir die globalen Valenz- und Leitungsbandkanten  $E_c^{eff}$  und  $E_v^{eff}$  als

$$\begin{aligned} E_c^{eff} &= \text{ess inf}_{x \in \Omega} E_{cs}(x), \\ E_v^{eff} &= \text{ess sup}_{x \in \Omega} \max \{E_{vx}(x), E_{vy}(x), E_{vz}(x)\}. \end{aligned}$$

Damit besitzt der zugeordnete Bandkantenoperator  $E$  (3.9) eine globale Bandlücke der Größe

$$E_g^{eff} = E_c^{eff} - E_v^{eff}.$$

Die durch die effektiven Bandkantenprofile der Elektronen und Löcher definierte Bandlücke wird auch als (fundamentale) *Bandlücke der Quantenschicht* bezeichnet. Nun gehen wir davon aus, dass die Lücke sich an einer optimalen Position befindet, d. h.

$$e = \min_{j=1, \dots, d} \text{ess inf}_{x \in \Omega} |e_j| = \frac{E_g^{eff}}{2}. \quad (5.70)$$

Als letzte Größe benötigen wir noch das essentielle Minimum  $m_{min}$  des Betrages reziproken effektiven Massen  $m$  (5.25). Dieses berechnet sich zu

$$m_{min} = \text{ess inf}_{x \in \Omega} \min \{A(x), -L(x), -M(x)\}. \quad (5.71)$$

Damit können wir die für die Abschätzung der Bandlücke benötigte Konstante  $M$  (3.38) bestimmen:

$$M = \frac{N_{max}^2}{4m_{min}}, \quad (5.72)$$

wobei  $N_{max}$  gemäß (5.69) definiert ist. Damit erfahren wir aus Theorem 3.24 — vgl. (3.63) — schliesslich, dass alle  $\lambda$ , für die die Bedingung

$$k < \sqrt{\frac{2m_{min}}{N_{max}^2}} \sqrt{\frac{E_{gap}^{eff}}{2}} - \lambda \quad (5.73)$$

erfüllt ist, zur Resolventenmenge des Achtband-Operators und damit zur Bandlücke gehören. D. h. Theorem 3.24 garantiert die Erhaltung der Bandlücke gegeben durch das Intervall

$$Gap(k) = \left( -E_g^{max}(k), E_g^{max}(k) \right),$$

mit

$$E_g^{max}(k) = \frac{E_g^{eff}}{2} - \frac{N_{max}^2}{2m_{min}} k^2.$$

Mit der effektiven Masse  $m_{gap}$  definiert als

$$m_{gap} = \frac{\hbar^2 m_{min}}{N_{max}^2}, \quad (5.74)$$

welche die Verkleinerung der Bandlücke mit zunehmenden Wellenvektor charakterisiert, erhalten wir die Darstellung:

$$E_g^{max}(k) = \frac{E_g^{eff}}{2} - \frac{\hbar^2}{2m_{gap}} k^2. \quad (5.75)$$

**Bemerkung 5.4.** *Damit haben wir unter den oben genannten Voraussetzungen an die Koeffizientenfunktionen des Achtband-Modells bzw. die entsprechenden Materialparameter gezeigt, dass man die Bandlücke der Quantenschicht  $E_g^{eff}$  ebenfalls als Bandlücke im Spektrum des  $kp$ -Schrödingeroperators für  $k = 0$  wieder findet. D. h. wir haben in diesem Fall bewiesen, dass Spurious Solutions im Sinne von Eigenfunktionen mit Energieeigenwerten, die innerhalb der Bandlücke der Quantenschicht liegen, ausgeschlossen werden können. Für Wellenvektoren  $k_{\parallel}$  in der Nähe des Zonenzentrums verkleinert sich die Größe der garantierten Bandlücke quadratisch in Abhängigkeit vom Betrag des Wellenvektors  $k = \|k_{\parallel}\|$ .*

Wesentliche Annahmen für diese Abschätzung sind die generellen Voraussetzungen an die Vorzeichen der Koeffizienten zweiter Ordnung (5.26) bzw. Voraussetzung 3.2 sowie die in Abschnitt 5.5.1 durch Analyse der Eigenwerte der  $k^2$ -Terme hergeleiteten Bedingungen an die Materialparameter, siehe (5.52) und Bemerkung 5.1. In [VSW07] werden die Koeffizientenmatrizen der

Terme zweiter Ordnung von dreidimensionalen  $kp$ -Schrödingeroperatoren betrachtet. Durch Analyse der Eigenwerte des Valenzbandanteils dieser Koeffizientenmatrizen werden dort auch Bedingungen an die Materialparameter des Achtband-Modells hergeleitet. Die daraus resultierenden Einschränkungen für die Wahl möglicher Materialparameter sind allerdings deutlich größer als bei den hier vorgestellten. Diese lassen sich im Fall von *Burt-Forman-Operator-Ordering* nicht alle gleichzeitig erfüllen, da ein Eigenwert immer das falsche Vorzeichen besitzt. Sie garantieren die Elliptizität der Terme zweiter Ordnung, die den Valenzbändern des Achtband-Modells zugeordnet sind.

## 5.6 Vermeidung von Spurious Solutions durch Anpassung von $E_p$

Bei der Benutzung des Achtband-Hamiltonians für Halbleiter mit kleiner Bandlücke ergeben sich häufig Parametersätze, die zu einer anomalen Bandkrümmung für große Wellenvektoren führen, siehe Kapitel 2.1.3. Dieses Verhalten der Energiedispersion im Volumenmaterial kann dann bei der Anwendung auf Heterostrukturen zu Spurious Solutions des zugehörigen  $kp$ -Schrödingeroperators führen, siehe [For97, Sol03]. In Kapitel 2.2.4 haben wir mehrere Methoden zur Vermeidung solcher Spurious Solutions angesprochen. Wir wollen nun im Folgenden die dort vorgeschlagene Methode der Reskalierung des optischen Matrixelements  $E_p$  für den Fall des von uns in Kapitel 6.1 und 6.2 verwendeten Achtband-Modells für kubische Materialien diskutieren. Dazu werden wir die Abhängigkeit der Vorzeichen der Koeffizienten der  $k^2$ -Termen auf der Hauptdiagonale des Hamiltonians von  $E_p$  diskutieren. Den resultierenden Reskalierungs-Ansatz werden wir dann in Abschnitt 5.6.1 anhand des Vergleichs von  $kp$ -Rechnungen mit experimentellen Ergebnissen für eine Reihe verschiedener Indiumarsenidantimonid-basierter Multi-Quantum-Well-Strukturen testen.

Wir wollen den Achtband-Hamiltonian (2.6) für kubische Materialien aus Kapitel 2.1.2 (Notation nach [EW96]) betrachten. Die Vorzeichen der Koeffizienten der  $k^2$ -Termen auf der Hauptdiagonale haben einen entscheidenden Einfluss auf das Verhalten der Dispersionsrelation  $E(k)$  für große Wellenvektoren. Die Koeffizienten des Valenzband-Anteils sind gegeben durch (vgl. (2.10))

$$L = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left( (\gamma_1^L + 4\gamma_2^L) - \zeta \right), \quad M = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1^L - 2\gamma_2^L), \quad (5.76)$$

wobei der Kane-Parameter  $P_0$ , der die Kopplung zwischen den Valenz- und Leitungsbänder beschreibt, mittels (2.13) durch das relative optische Matrixelement  $\zeta = E_p/E_g$  ersetzt wurde. Der dem Leitungsband zugeordnete Koeffizient lautet (vgl. (2.11))

$$A = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{m_0}{m_c} - \zeta \frac{E_g + 2/3\Delta_{so}}{E_g + \Delta_{so}} \right), \quad (5.77)$$

wobei von der selben Ersetzung für  $P_0$  Gebrauch gemacht wurde. Die Bedingungen an die Koeffizienten zur Vermeidung der anomalen Bandkrümmung und damit von Spurious Solutions lauten (siehe z. B. [For97, MGO94]):

$$A > 0, \quad L < 0, \quad M < 0. \quad (5.78)$$

Diese Bedingungen bedeuten die physikalisch naheliegende Positivität der Krümmung der den Leitungsbändern zugeordneten Matrixelemente  $H_{ii}(k)$  auf der Hauptdiagonalen des kp-Hamiltonian sowie entsprechend die Negativität der Krümmung des den Valenzbändern zugeordneten Teils der Hauptdiagonale. Sie sind konsistent mit der in Kapitel 3 gemachten Voraussetzung 3.2 an die Vorzeichen der Koeffizientenfunktionen  $m_i$  des kp-Schrödingeroperators. Diese Vorzeichenbedingung war essentiell für den Beweis der in Kapitel 3.4 gezeigten Abschätzung der Bandlücke des kp-Schrödinger-Operators in den Daten des Problems. In dem durch diese Abschätzung beschriebenen Spektralbereich können keine Eigenwerte des kp-Schrödinger-Operators liegen und damit auch keine Eigenfunktionen in Form von Spurious Solutions.

Zwischen der Effektivmasse der schweren Löcher  $m_{hh,z}^*$  in Richtung einer der Koordinatenachsen und dem Parameter  $M$  gibt es folgenden Zusammenhang:

$$\frac{m_0}{m_{hh,z}^*} = \gamma_1^L - 2\gamma_2^L = -\frac{2m_0}{\hbar^2} M.$$

$m_{hh,z}^*$  ist für physikalisch relevante Fälle positiv und  $M$  damit negativ.

Die Vorzeichen der Koeffizienten  $A$  und  $L$  hängen vom relativen optischen Matrixelement  $\zeta = E_p/E_g$  ab. Aus (5.78) ergeben sich folgende Bedingungen für die Parameter des kp-Hamiltonian:

$$\frac{E_p}{E_g} = \zeta < \zeta_0^L = \gamma_1^L + 4\gamma_2^L \quad (5.79)$$

und

$$\frac{E_p}{E_g} = \zeta < \zeta_0^A = \frac{m_0}{m_c} \frac{E_g + \Delta_{so}}{E_g + 2/3\Delta_{so}}. \quad (5.80)$$

Nun ergeben sich insbesondere für Halbleiter mit kleiner Bandlücke so hohe Werte für  $\zeta$ , dass mindestens eine der Bedingungen verletzt ist. Man kann in diesem Fall jedoch die Bedingungen durch eine geeignete Verkleinerung des optischen Matrixelementes  $E_p$  erfüllen:

$$E_p \rightarrow E'_p = \alpha E_p, \quad \alpha < 1. \quad (5.81)$$

Diese Anpassung von  $E_p$  hat nur einen kleinen Einfluss auf die Bandstruktur für kleine Wellenvektoren  $k$ . Daher bleiben die gebundenen Zustände zumindest für kleine Anpassungen von  $E_p$  davon fast unberührt. Die Achtband-Hamiltonians bilden eine Schar von Modellen, die vom Parameter  $E_p$  abhängen. Für  $E_p \rightarrow 0$  verschwindet die Kopplung zwischen dem Valenzband-Anteil und dem Leitungsband-Anteil. Für  $E_p = 0$  führt dies auf den Standard-Sechsband-Hamiltonian zur Beschreibung der Valenzband-Zustände und ein parabolisches Modell für die Leitungsbänder. Der Sechsband-Hamiltonian liefert immer noch eine brauchbare Approximation der Valenzbandstruktur in verspannten Quantum-Wells [CC92, For93, MGO94, CC96].

Der Effektivmassen-Tensor  $(m_n^*)_{ij}$  eines Bandes  $E_n$  ist definiert als

$$\left( (m_n^*)^{-1} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n(k)}{\partial k_i \partial k_j}.$$

Für die Effektivmasse der schweren und leichten Lochbänder (hh und lh) entlang unterschiedlicher kristallographischer Richtungen erhält man für  $k = 0$ , siehe [GHB93, VMRM01]:

$$\frac{m_0}{m_{hh}[100]} = \gamma_1^L - 2\gamma_2^L, \quad \frac{m_0}{m_{lh}[100]} = \gamma_1^L + 2\gamma_2^L, \quad (5.82)$$

$$\frac{m_0}{m_{hh}[110]} = \frac{1}{2}(2\gamma_1^L - \gamma_2^L - 3\gamma_3^L), \quad \frac{m_0}{m_{lh}[110]} = \frac{1}{2}(2\gamma_1^L + \gamma_2^L + 3\gamma_3^L), \quad (5.83)$$

$$\frac{m_0}{m_{hh}[111]} = \gamma_1^L - 2\gamma_3^L, \quad \frac{m_0}{m_{lh}[111]} = \gamma_1^L + 2\gamma_3^L. \quad (5.84)$$

Für die Leitungsbänder und die Split-Off-Bänder ergeben sich die winkelunabhängigen Effektivmassen [GHB93, VMRM01]

$$\frac{m_0}{m_{el}} = \frac{2m_0}{\hbar^2} A + \frac{E_p}{E_g} \frac{E_g + 2/3\Delta_{so}}{E_g + \Delta_{so}}, \quad (5.85)$$

$$\frac{m_0}{m_{so}} = \gamma_1^L - \frac{1}{3} \frac{E_p}{E_g} \frac{\Delta_{so}}{E_g + \Delta_{so}}. \quad (5.86)$$

Die Effektivmassen der schweren und der leichten Löcher sind unabhängig vom optischen Matrixelement  $E_p$ , d. h. der Valenz-Leitungsband-Kopplung. Setzt man die Definition des Koeffizienten  $A$  gemäß (5.77) ein, so zeigt sich, dass auch die Leitungsbandmasse unabhängig von  $E_p$  ist. Die Effektivmasse der Split-Off-Bänder hängt jedoch explizit von  $E_p$  ab. Damit stimmen die Energiedispersionen der Bandkanten-nahen Zustände, d. h. der schweren und leichten Lochzustände sowie der Elektronenzustände, in der Nähe von  $k = 0$  für beliebige Werte von  $E_p$  in der Ordnung  $k^2$  überein. Dies rechtfertigt die oben beschriebene Anpassung von  $E_p$  zur Erfüllung der Vorzeichenbedingungen (5.78).

### 5.6.1 Bewertung anhand von Multi-Quantum-Wells mit kleiner Bandlücke

Unsere Betrachtungen zum Reskalierungs-Ansatz wollen wir mit dem Vergleich von  $kp$ -Rechnungen mit experimentellen Ergebnissen für eine Reihe verschiedener  $InAsSb$ -Multi-Quantum-Well-Strukturen (Indiumarsenidantimonid) abschliessen.  $InAs_xSb_{1-x}$  ist das Mischkristallsystem mit der niedrigsten Bandlücke aller III-V-Halbleitermaterialien. Dieses System eignet sich besonders zum Test dieses Ansatzes, da aufgrund der kleinen Bandlücke eine große Reskalierung von  $E_p$  auf 20%-40% des Literaturwertes notwendig ist. Daher eignet sich diese Materialklasse besonders, um den durch die Reskalierung induzierten Modellierungsfehler exemplarisch zu bewerten.

Zu diesem Zweck betrachten wir einen Satz von neun Multi-Quantum-Well-Strukturen (MQW), mit jeweils unterschiedlicher Arsenkonzentration  $x$ . Die einzelnen Strukturen bestehen jeweils aus 10  $InAs_xSb_{1-x}$ -Wells, die durch Barrieren aus  $Al_{0.15}In_{0.85}As_{0.77}Sb_{0.23}$  (Aluminiumindiumarsenidantimonid) voneinander getrennt sind. Der ganze MQW-Stapel befindet sich gitterangepasst auf [100]-orientierten GaSb-Substraten (Galliumantimonid). Als Referenz dient eine  $1\ \mu\text{m}$ -dicke Schicht aus  $InAs_{0.895}Sb_{0.105}$ , die aufgrund ihrer Dicke als Volumen-Halbleiter betrachtet werden kann.

Zum Vergleich der  $kp$ -Rechnungen mit experimentellen Daten haben wir die Bandstruktur der vermessenen Proben berechnet. Als Beispiel für eine solche  $kp$ -Rechnung ist die Bandstruktur für die MQW-Struktur mit dem Arsengehalt  $x = 0.82$  in Abbildung 5.2(a) dargestellt. Aus den berechneten Bandstrukturen haben wir die *MQW-Kante* gemäß

$$E_g^{MQW} = E_{c0}(k_{\parallel} = 0) - E_{v0}(k_{\parallel} = 0) \quad (5.87)$$

bestimmt, wobei  $E_{c0}(k_{\parallel})$  das unterste Leitungsband und  $E_{v0}(k_{\parallel})$  das oberste Valenzband bezeichnet. Die aus den  $kp$ -Rechnungen gewonnene MQW-Kante wurde dann mit experimentell gemessenen Werten verglichen. Die Ergebnisse dieses Vergleichs sind in Abbildung 5.2(b) dargestellt. Dabei sind die aus Transmissionsmessungen bestimmten MQW-Kanten mit ausgefüllten Kreisen gezeichnet. Die offenen Kreise zeigen MQW-Kanten die aus Photolumineszenzmessungen gewonnen wurden. Die aus den  $kp$ -Rechnungen resultierenden MQW-Kanten sind durch Quadrate dargestellt. Man beobachtet eine systematische Infrarot-Verschiebung der experimentell bestimmten MQW-Kante gegenüber den  $kp$ -Rechnungen. Diese Tendenz ist auch in der volumenartigen als Reference bezeichneten  $InAs_{0.895}Sb_{0.105}$ -Probe sichtbar. Daher ist die Ursache dieser Rot-Verschiebung eher bei Unsicherheiten der Materialdaten für dieses Mischkristallsystem — speziell der Bandlücke — als bei den  $kp$ -Rechnungen zu vermuten. Für die Details der  $kp$ -Rechnungen und weitere Vergleiche zwischen  $kp$ -Rechnungen und spektroskopischen Daten siehe [KBB<sup>+</sup>05].

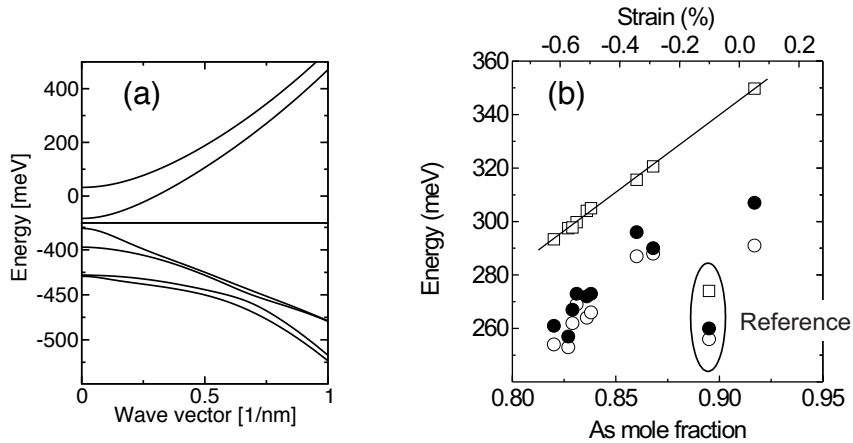


Abbildung 5.2: (a) Berechnete Leitungs- und Valenzbandstruktur für eine MQW-Struktur mit einem Arsengehalt von  $x = 0.82$  bei Raumtemperatur. (b) Vergleich zwischen  $kp$ -Rechnungen und Experimenten.



# Kapitel 6

## Anwendungen

### 6.1 Elektronische Zustände in verspannten Multi-Quantum-Wells

Die Bandstruktur einer Quantum-Well-Struktur ist durch die Eigenwertkurven  $E_i(k_{\parallel})$  und die zugehörigen Eigenfunktionen

$$F_i(z; k_{\parallel}) = (F_{i,1}(z; k_{\parallel}), \dots, F_{i,d}(z; k_{\parallel}))^T$$

des kp-Schrödingeroperators (3.10) bzw. (2.15) in Abhängigkeit vom reduzierten Wellenvektor  $k_{\parallel} = (k_x, k_y)$  gegeben. Als kp-Schrödingeroperator benutzen wir im Folgenden ein Achtband-Modell für kubische Materialien in der Formulierung nach [EW96]. Der zugehörige Hamiltonian für Volumenmaterialien entspricht dem in Kapitel 2.1.2 vorgestellten Modell (2.6). Dieses Modell beinhaltet die Kopplung von Valenz- und Leitungsbändern, Spin-Bahn-Wechselwirkung und den Einfluss der mechanischen Verspannung. Der Modell-Hamiltonian ist in der Klasse der kp-Schrödingeroperatoren enthalten, deren Spektraleigenschaften in Kapitel 3 untersucht wurden. Damit lassen sich die dort erzielten mathematischen Ergebnisse auf das verwendete Modell anwenden.

Für die numerischen Berechnungen in diesem und den folgenden Abschnitten wurden mit der von U. Bandelow und mir entwickelte Quantum-Well-Simulator WIAS-QW [BK] verwendet. Die numerische Approximation der Eigenwerte und Eigenfunktionen in WIAS-QW basiert auf dem Finite-Volumen-Schema, das in Kapitel 4.2 beschrieben ist.

Wir wollen unsere Betrachtungen für eine  $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$  basierte, mechanisch verspannte Multi-Quantum-Well-Struktur durchführen. Diese Struktur besteht aus einem Stapel von 6 kompressiv verspannten (gestauchten), 7 nm breiten Quantum Wells ( $x = 0.239$ ,  $y = 0.826$ ), die durch tensil verspannte (gedehnte), 10 nm breite Barrieren ( $x = 0.291$ ,  $y = 0.539$ ) voneinander getrennt sind. Diese MQW-Struktur ist ein typisches Beispiel für eine Laserstruktur wie sie in Halbleiterlaserdioden verwendet wird. Dabei ist die MQW-Struktur noch in Wellenleiterschichten eingebettet, die gitterangepasst auf InP hergestellt sind. Die für die Simulation benutzten Parametersatz ist in Tabelle 6.1 zu finden. Die Parameter wurden mit den im Anhang C beschriebenen Methoden und Daten interpoliert.

Parameter		QW	Barriere	Einheit
Valenzbandkante	$E_v$	0	-129,5	meV
Leitungsbandkante	$E_c$	700	903,5	meV
Bandlücke	$E_g$	700	1033	meV
Optisches Matrixelement	$E_p$	22692	22258	meV
Spin-Bahn Split-Off Energie	$\Delta$	323,88	245,14	meV
Luttinger-Parameter	$\gamma_1$	14,99	11,02	
Luttinger-Parameter	$\gamma_2$	5,83	4,07	
Luttinger-Parameter	$\gamma_3$	6,62	4,84	
Leitungsbandmasse	$m_c$	0,04827	0,07804	$m_0$
Deformationspotentiale:				
– Leitungsband	$a_c$	-5572,8	-5671,2	meV
– Valenzband	$a_v$	1096,4	1207,4	meV
– Scherdeformation	$b$	-1767,0	-1751,6	meV
– Scherdeformation	$d$	-4089,8	-4523,9	meV
Elastische Konstante	$C_{11}$	9,503	10,236	10 GPa
Elastische Konstante	$C_{12}$	4,930	5,253	10 GPa
Gitterkonstante	$a$	5,9281	5,8513	Å
Verzerrung	$\varepsilon$	-0,010	0,003	

Tabelle 6.1: *Bandstrukturparameter der Multi-Quantum-Well-Struktur. Für die Berechnung der Verzerrung wurde als Gitterkonstante des InP-Substrates  $a_{InP} = 5.8688$  Å verwendet.*

### 6.1.1 Mini-Bänder in Multi-Quantum-Wells

Zunächst betrachten wir das Spektrum der Multi-Quantum-Well-Struktur für  $k_{\parallel} = 0$ . Dieses ist für die untersten zwei Leitungsbandzustände und

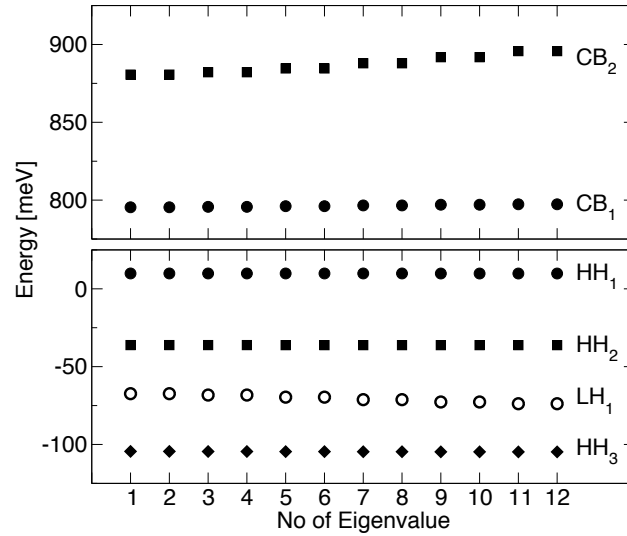


Abbildung 6.1: Ausbildung von Mini-Bändern in unserer Beispiel-MQW-Struktur bestehend aus 6 Quantum-Well. Die Eigenwerte treten durch die symmetriebedingte zweifache Entartung in Gruppen von 12 Eigenwerten auf. Oben: Leitungsbandzustände, unten: Valenzbandzustände, jeweils für  $k_{\parallel} = 0$ . Das unterste Leitungs- und die obersten Valenz-Mini-Bänder zeigen keine Dispersion. Die Dispersion in den Mini-Bändern der energetisch in den Quantum-Well höher liegenden Zustände weist dagegen auf eine Kopplung der Zustände zwischen den einzelnen Wells hin.

die obersten vier Valenzbandzustände in Abbildung 6.1 dargestellt. Die Eigenwerte treten in Gruppen zu je 12 Eigenwerten auf, die als *Mini-Bänder* bezeichnet werden und sind aus Symmetriegründen zweifach entartet. Diese 12-er Gruppen repräsentieren somit die gekoppelten elektronischen Zustände der 6 einzelnen Quantum-Well. Die Aufspaltung der Eigenwerte resultiert aus der Kopplung der einzelnen Quantum-Well-Zustände durch die endliche Höhe der Barrieren. Die mit der Aufspaltung verbundene Abhängigkeit der Energie von der Position in der Eigenwertgruppe wird als *Dispersion* bezeichnet. Diese Miniband-Dispersion ist vergleichbar mit der Dispersion, die bei periodischen Multi-Quantum-Well-Strukturen auftritt, den so genannten *Übergittern*, siehe z. B. [Sin93, Kap. 6.4].

Sind die Zustände der einzelnen Quantum-Well z. B. durch sehr hohe oder sehr breite Barrieren nahezu voneinander entkoppelt, so verschwindet die Aufspaltung des zugehörigen Mini-Bandes beinahe. Dieses Verhalten zeigen das unterste Leitungs- und die obersten Valenz-Minibänder, siehe Abbildung 6.1. Die Aufspaltung der energetisch höher liegenden Mini-Bänder weist je-

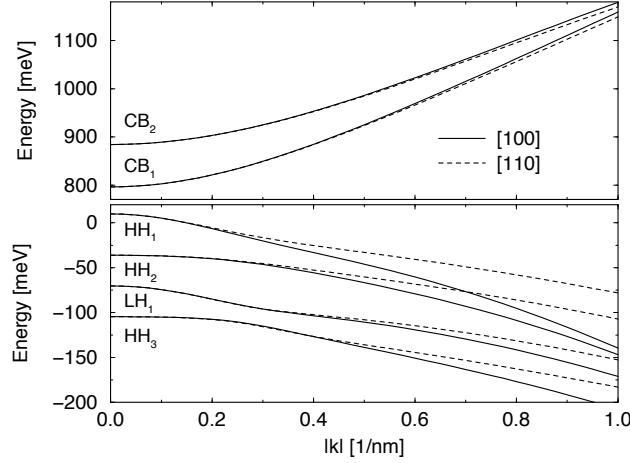


Abbildung 6.2: Bandstruktur und Warping in einem 7 nm kompressiv verspannten InGaAsP-Quantum-Well. Oben: Leitungsbänder, unten: Valenzbänder, jeweils entlang der [100]- (durchgezogen) und [110]-Richtung (gestrichelt). Die Bänder sind aus Symmetriegründen zweifach entartet.

doch auf eine zunehmende Kopplung der Zustände zwischen den einzelnen Wells hin.

Typisch für das Design der optisch aktiven Zone von MQW-Laserdioden ist eine Entkopplung der untersten Zustände der einzelnen Quantum-Well. Diese Entkopplung führt zu einer guten räumlichen Lokalisierung der untersten Zustände in den einzelnen Quantum Wells. Die Interband-Übergänge zwischen diesen Zuständen liefern dann den dominierenden Beitrag zu optischen Eigenschaften wie dem optischen Gewinn. Diese Eigenschaft weist auch unsere Beispiel-MQW-Struktur auf. Daher wollen wir unsere Untersuchungen im Folgenden für einen repräsentativen 7 nm dicken einzelnen Quantum-Well durchführen.

### 6.1.2 Bandstruktur

In Abbildung 6.2 ist die Bandstruktur  $E_i(k_{\parallel})$  für den betrachteten 7 nm InGaAsP-Quantum-Well dargestellt. Aufgrund ihrer größeren Effektivmasse ist die Quantisierungsenergie  $E_{conf} = E_{v,qw} - E(k_{\parallel} = 0)$  der schweren Löcher kleiner als die der leichten Löcher ( $E_{v,qw}$  ist die Valenzbandkante des Well-Materials). Dadurch wird die im Volumenmaterial bei  $k = 0$  bestehende Entartung zwischen schweren und leichten Löchern, siehe Abbildung

2.2, im Quantum-Well aufgehoben. Diese Verschiebung zwischen schweren und leichten Loch-Bändern wird in unserem Fall noch zusätzlich durch die kompressive Verspannung des Quantum-Well-Materials verstärkt, wobei wiederum die schweren Löcher energetisch bevorzugt werden. Daher entsprechen die obersten zwei Valenzbänder Schwer-Loch-Zuständen.

Zur Untersuchung der Winkelabhängigkeit der Dispersion (Warping-Effekt) ist die Bandstruktur für zwei unterschiedliche kristallographische Richtungen dargestellt. Man beobachtet eine sehr geringe Winkelabhängigkeit der Energie bei den Leitungsbändern, wogegen die Valenzbänder ein starkes Warping und stark ausgeprägte Nichtparabolizitäten aufweisen, siehe Abbildung 6.2. Auch für die Leitungsbänder ergibt sich bei genauerer Analyse ein deutliches Abweichen vom parabolischen Verhalten für Wellenvektoren ca.  $|k_{\parallel}| > 0.2 \text{ } 1/\text{nm}$  ausserhalb des Zonenzentrums.

### 6.1.3 Impulsmatrixelemente der Interband-Übergänge

Wichtige Informationen über die Elektronen- und Löcher-Zustände liefern auch die Impulsmatrix-Elemente der Band-zu-Band-Übergänge. Diese sind ein Maß für die Übergangsraten zwischen den beteiligten Zuständen unter dem Einfluss einer optischen Anregung. Diese Übergangsraten bestimmen entscheidend optische Eigenschaften der Nanostruktur, wie z. B. den optischen Gewinn, siehe Kapitel 6.2.3.

Das Impulsmatrixelement  $p_{ij}$  für den Interband-Übergang zwischen dem Leitungsbandzustand  $F_i$  und dem Valenzbandzustand  $F_j$  ist definiert durch (siehe [EBWS95])

$$p_{ij} = \frac{m_0}{\hbar} \sum_{\mu, \nu=1}^d \int_{\Omega} \bar{F}_{i\mu} \left( \nabla_k H_{\nu\mu}(k_{\parallel}, k_z) \right) \Big|_{ik_z = \frac{\partial}{\partial z}} F_{j\nu} dz. \quad (6.1)$$

In Abbildung 6.3 sind die Impulsmatrixelemente für die wichtigsten Interband-Übergänge in Abhängigkeit vom reduzierten Wellenvektor  $k_{\parallel}$  jeweils für TE- und TM-Polarisationsrichtung dargestellt. Das individuelle Verhalten der Impulsmatrixelemente in Abhängigkeit von Betrag des Wellenvektors  $|k_{\parallel}|$  unterscheidet sich für die einzelnen Übergänge zum Teil stark voneinander. Für alle Übergänge lässt sich eine deutliche Winkelabhängigkeit erkennen. Die Winkelabhängigkeit ist dabei für Hauptübergang  $CB_1 \leftrightarrow HH_1$  zwischen dem untersten Leitungsband-Zustand  $CB_1$  und dem obersten Valenzband-Zustand  $HH_1$  in TE-Polarisationsrichtung besonders stark ausgeprägt.

Zu den TE-Anteilen tragen die Übergänge zwischen dem Leitungsband und den beiden Valenzband-Sorten (leichte und schwere Löcher) bei, wobei der Hauptübergang  $CB_1 \leftrightarrow HH_1$  den dominierenden Anteil darstellt. Zu den TM-Anteilen tragen nahezu nur die Übergänge zwischen dem Leitungsband und den leichten Löchern ( $LH_1$ ) bei, da die Impulsmatrixelemente für die Übergänge mit dem schweren Löchern ( $HH_1$  und  $HH_2$ ) deutlich kleiner sind, siehe Abbildung 6.3. Da zudem die schweren Löcher aufgrund der kompressiven Verspannung energetisch bevorzugt werden, wird von dieser Laserstruktur bevorzugt TE-polarisiertes Licht verstärkt.

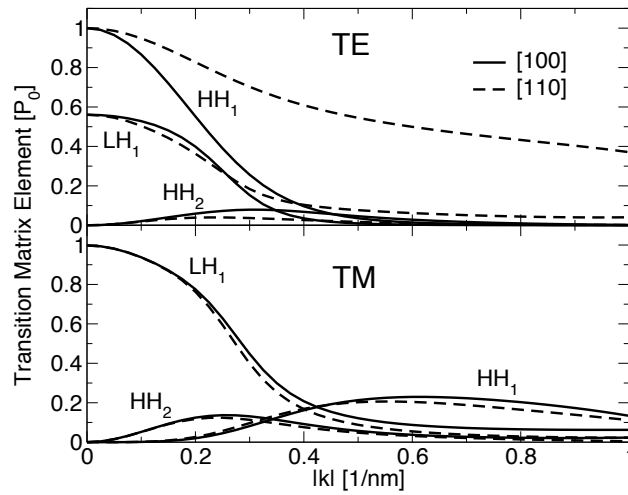


Abbildung 6.3: Dispersion der Impulsmatrixelemente  $|e \cdot p_{ij}(k_{||})|^2$  (6.1) für die Übergänge zwischen dem untersten Leitungsband  $CB_1$ , dargestellt in Abb. 6.2 oben, und den oberen Valenzbändern, dargestellt in Abb. 6.2 unten. Es sind unterschiedliche Polarisationsrichtungen  $e$  dargestellt: Oben: TE-Polarisation ( $p||e_x$ ), unten: TM-Polarisation ( $p||e_z$ ). Die Normierung der Kurven erfolgt für beide Abbildungen auf den gleichen Referenzwert  $P_0$ .

## 6.2 Upscaling auf halbklassische Zustandsgleichungen

In der Simulation optoelektronischer Bauelemente wie verspannter Multi-Quantum-Well (SMQW) Laserdioden haben sich halbklassische Modelle als sehr erfolgreich erwiesen, insbesondere dann, wenn die Daten für die optische aktive Zone aus Modellen für die beteiligten kleineren Skalen (z. B. der Nanoskale) gewonnen wurden. Möchte man auf eine direkte Simulation eines

gekoppelten Modells verzichten, so werden geeignete Upscaling-Verfahren für die konstitutiven halbklassischen Gesetze benötigt.

Für die Simulation optoelektronischer Bauelemente wird grundsätzlich eine Beschreibung des Transports der Elektronen und Löcher, eine Beschreibung des optischen Feldes und die Kopplung dieser Modelle durch Modelle für strahlende Rekombination von Elektronen und Löcher benötigt. Im Folgenden beschränken wir uns auf die Darstellung eines halbklassischen Ladungsträger-Transport-Modells sowie auf spezielle Mechanismen der strahlenden Rekombination. Für Modelle für das optische Feld sowie eine detaillierte Darstellung des Gesamtmodells siehe [BGK00, BGH05, BKKR03, BHK03]. Konkret werden Upscaling-Methoden für die Größen Zustandsdichte, optischer Materialgewinn sowie das Maximum des optischen Materialgewinns und der Rate der spontanen strahlenden Rekombination diskutiert. Die Untersuchungen werden wir für die uns schon vertraute Beispielstruktur aus Kapitel 6.1 durchführen. Diese erfolgen auf Grundlage der dort gemachten Berechnungen der elektronischen Struktur.

### 6.2.1 Drift-Diffusions-Gleichungen

Die am meisten benutzten halbklassischen Modelle für den Ladungsträgertransport in Halbleiter-Bauelementen sind Drift-Diffusions-Modelle. Das Basismodell für diesen Typ von Modellen ist das van Roosbroeck-System, siehe [Gaj93] und Referenzen darin. Das *van-Roosbroeck-System* beschreibt die Bewegung von Elektronen und Löchern in einem selbstkonsistenten elektrischen Feld aufgrund von Drift und Diffusion. Es besteht zum einen aus Stromkontinuitätsgleichungen für die Dichten  $n$  und  $p$  der Elektronen und Löcher und zum anderen aus der Poisson-Gleichung für das elektrostatische Potential  $\varphi$ :

$$q \frac{\partial n}{\partial t} - \nabla \cdot j_n = -qR, \quad q \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot j_p = -qR, \quad (6.2)$$

$$\varepsilon_0 \nabla (\varepsilon_s \nabla \varphi) = -q(C + p - n). \quad (6.3)$$

$\varepsilon_0$  ist die Vakuumdielektrizitätskonstante,  $\varepsilon_s$  ist die statische Dielektrizitätskonstante,  $q$  ist die Elementarladung und  $C$  das effektive Dotierungsprofil. Die Rekombinationsrate  $R$  beinhaltet alle nicht-strahlenden und strahlenden Rekombinationsvorgänge. Diese hängen prinzipiell von den Ladungsträgerdichten  $n$  und  $p$  ab. Die Triebkräfte der Ströme  $j_n$  und  $j_p$  sind die negativen Gradienten der Quasi-Fermi-Potentiale  $F_n$  und  $F_p$  der Elektronen und Löcher:

$$j_n = -qn\mu_n \nabla F_n, \quad j_p = -qp\mu_p \nabla F_p. \quad (6.4)$$

$\mu_n$  und  $\mu_p$  bezeichnen die Mobilitätskoeffizienten der Elektronen und Löcher.

Die Stromkontinuitätsgleichungen müssen noch um konstitutive Gesetze wie Zustandsgleichungen für die Ladungsträgerdichte und geeignete Rekombinationsmodelle vervollständigt werden. Bei der Simulation von Halbleiterlasern wird dabei üblicher Weise die Fermi-Dirac-Verteilung als Zustandsgleichung für die Elektronen und Löcher benutzt:

$$n = N_c \mathcal{F}_{1/2} \left( \frac{q\varphi - qF_n - E_c}{k_b T} \right), \quad p = N_v \mathcal{F}_{1/2} \left( \frac{E_v + qF_p - q\varphi}{k_b T} \right). \quad (6.5)$$

$E_c$  und  $E_v$  bezeichnen jeweils die Leitungs- und Valenzbandkanten.  $N_c$  und  $N_v$  sind die zugehörigen Bandkanten-Zustandsdichten (Density of States, DOS) gegeben durch

$$N_c = 2 \left( \frac{m_c^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \quad N_v = 2 \left( \frac{m_v^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (6.6)$$

Die Parameter  $m_c^*$  und  $m_v^*$  sind die Bandkantenmassen der Zustandsdichte,  $T$  ist die Bauelementtemperatur,  $k_B$  ist die Boltzmannkonstante und  $\mathcal{F}_{1/2}$  ist das Fermi-Integral der Ordnung 1/2 gegeben durch

$$\mathcal{F}_{1/2}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\sqrt{y}}{1 + \exp(y - x)} dy. \quad (6.7)$$

Die konstitutiven Gleichungen stellen eine Verbindung zwischen den Drift-Diffusions-Gleichungen und der quantenmechanischen Beschreibung der elektronischen Struktur der Halbleitermaterialien her. Im Falle der Fermi-Dirac-Verteilung handelt es sich dabei um ein quantenmechanisches Modell für ein dreidimensionales homogenes Fermionengas mit parabolischer Bandstrukturapproximation. Typischer Weise gewinnt man die Parameter dieser konstitutiven Gesetze aus den Daten der elektronischen Struktur des jeweiligen Halbleitermaterials. Diesen Vorgang der Gewinnung makroskopischer Beschreibungen aus mikroskopischen Modellen und Daten wollen wir als *Upscaling* bezeichnen. Im Folgenden möchten wir am Beispiel unserer InGaAsP-Quantum-Well-Struktur untersuchen, inwiefern sich auf diese Weise geeignete makroskopische bzw. halbklassische Beschreibungen der Quantum-Well-Struktur aus den mikroskopischen kp-Rechnungen gewinnen lassen. Beispiele dafür sind zum einen die Zustandsgleichungen für die Ladungsträgerdichten. Zum anderen wollen wir optische Eigenschaften wie den optischen Materialgewinn und die spontane strahlende Rekombination von Elektronen und Löcher betrachten.



## 6.2.2 Effektive Bandkanten und Zustandsdichten

Im Flachband-Fall variiert der Verlauf von  $q\varphi - qF_n$  und  $q\varphi - qF_p$  in Wachstumsrichtung der Nanostruktur nur schwach und kann daher näherungsweise als konstant angenommen werden. Damit liegt es nahe, für die in der Quantum-Well-Struktur lokalisierten Elektronen und Löcher Quasi-Fermi-Niveaus, gegeben durch

$$E_{F_n} = q\varphi - qF_n \text{ und } E_{F_p} = q\varphi - qF_p \quad (6.8)$$

einzuführen. SMQW-Laser sind üblicherweise so konstruiert, dass im Arbeitspunkt Flachbandbedingungen realisiert sind.

Unter der Annahme, dass sich die in den Quantum-Wells lokalisierten Elektronen und Löcher jeweils im thermodynamischen Gleichgewicht befinden, berechnen sich deren lokale Dichteverteilungen  $n_{qw}$  und  $p_{qw}$  zu gegebenen Werten der Quasi-Fermi-Niveaus  $E_{F_n}$  und  $E_{F_p}$  aus den Daten der elektronischen Struktur (Eigenwertkurven und Eigenfunktionen) nach den Formeln

$$n_{qw}(z) = \sum_{i \in c} \frac{1}{(2\pi)^2} \int f(E_i(k_{\parallel}) - E_{F_n}) \|F_i(z; k_{\parallel})\|_{\mathbb{C}^d}^2 dk_{\parallel}, \quad (6.9)$$

$$p_{qw}(z) = \sum_{j \in v} \frac{1}{(2\pi)^2} \int f(E_{F_p} - E_j(k_{\parallel})) \|F_j(z; k_{\parallel})\|_{\mathbb{C}^d}^2 dk_{\parallel}, \quad (6.10)$$

mit der Fermi-Funktion

$$f(E) = \left(1 + \exp\left(\frac{E}{k_B T}\right)\right)^{-1}. \quad (6.11)$$

Wir führen die *mittlere Ladungsträgerdichte* im Quantum-Well durch

$$\bar{n} = \frac{1}{d_{qw}} \int_{\Omega} n_{qw}(z) dz, \quad \bar{p} = \frac{1}{d_{qw}} \int_{\Omega} p_{qw}(z) dz, \quad (6.12)$$

ein, wobei  $d_{qw}$  die Dicke des Quantum-Wells bezeichnet.

Für unsere Beispielstruktur aus Kapitel 6.1 sind die Elektronen- und Löcherverteilungen in Abbildung 6.4 für verschiedene Flächendichten  $N = \bar{n}d_{qw}$  und  $P = \bar{p}d_{qw}$  dargestellt.

Auf Basis der durch die kp-Rechnung gegebenen elektronischen Struktur können wir mittels (6.9) und (6.10) die mittleren Ladungsträgerdichten (6.12) berechnen und deren Abhängigkeit von den jeweiligen Quasi-Fermi-Niveaus

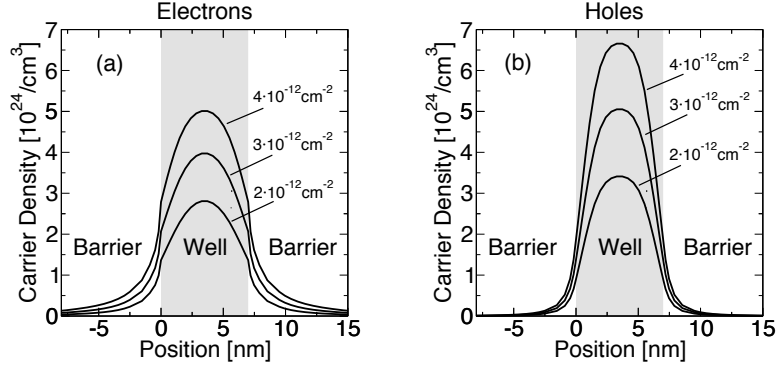


Abbildung 6.4: Lokale Ladungsträgerverteilungen (6.9) und (6.10) für verschiedene Flächendichten  $N = P = 2 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $3 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $4 \cdot 10^{-12} \text{ cm}^{-2}$  bei Raumtemperatur. Man beachte die im Vergleich zu den Elektronen stärker ausgeprägte Lokalisierung der Löcher im Quantum-Well.

$E_{F_n}$  bzw.  $E_{F_p}$  sowie von der Temperatur untersuchen. D. h. wir wollen die Kurvenscharen

$$\bar{n} = \bar{n}(E_{F_n}, k_b T) \quad \text{und} \quad \bar{p} = \bar{p}(E_{F_p}, k_b T) \quad (6.13)$$

betrachten. Diese sind in dem für die Lasersimulation interessanten Dichte- und Temperaturbereich in Abbildung 6.5 und 6.6 jeweils für Elektronen und Löcher dargestellt.

Diese aus den kp-Rechnungen gewonnen Beziehungen wollen wir nun an die in den Drift-Diffusions-Gleichungen benutzten Fermi-Dirac-Verteilungen

$$\bar{n} = N_c \mathcal{F}_{1/2}(E_{F_n} - E_c), \quad (6.14)$$

$$\bar{p} = N_v \mathcal{F}_{1/2}(E_v - E_{F_p}), \quad (6.15)$$

durch geeignete Parameter  $N_c$ ,  $E_c$  und  $N_v$ ,  $E_v$  für eine gegebene Referenztemperatur ( $T_0 = 315 \text{ K}$ ) anpassen. Durch Benutzung der Formeln (6.6) für die Bandkanten-Zustandsdichten  $N_c$  und  $N_v$  lassen sich die Bandkantenmassen  $m_c^*$  und  $m_v^*$  berechnen. Auf diese Weise erhalten wir quantenkorrigierte Bandkanten  $E_c$ ,  $E_v$  und Bandkantenmassen  $m_c$  und  $m_v$  für den Quantum-Well. Diese erlauben es einen einzelnen Quantum-Well wie ein künstliches klassisches Material in der Bauelement-Simulation zu behandeln, dessen Parameter mikroskopisch definiert sind. Die auf diese Weise gewonnenen Parameter

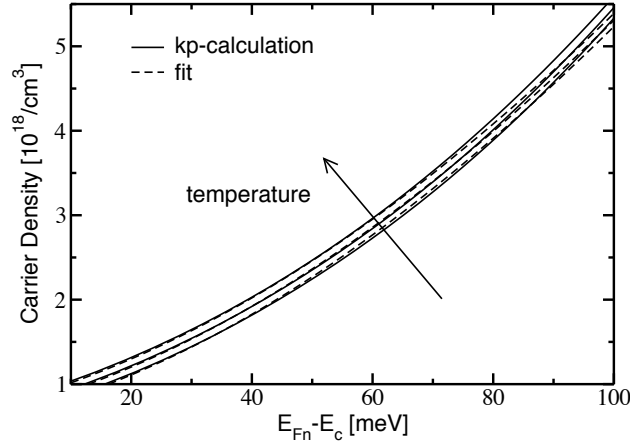


Abbildung 6.5: Beziehung (6.13) (*kp-Rechnung*) zwischen mittlerer Elektrodendichte  $\bar{n}$  und Quasi-Fermi-Niveau  $E_{F_n}$  relativ zur effektiven Bandkante  $E_c$  für die Temperaturen  $T = 290$  K, 315 K, 340 K. Die gestrichelten Kurven zeigen den Fit zur makroskopischen Zustandsgleichung (6.14).

unterscheiden sich in unserem Beispiel dabei wesentlich von den Volumenwerten des Quantum-Well-Materials. Die Ergebnisse für diese Anpassung sind jeweils in den Abbildungen 6.5 und 6.6 dargestellt.

Für die Löcher liegen die angepassten Kurven (6.15) in einem großen Dichte- und Temperaturbereich sehr dicht an den quantenmechanisch berechneten (6.12). Für die Elektronen stellt die Fermi-Dirac-Verteilung (6.14) immer noch eine gute Näherung dar, auch wenn der Geltungsbereich kleiner ist. Dies erlaubt in der Lasersimulation mit Drift-Diffusions-Modellen die Elektronen- und Löcherdichten in den Quantum-Wells mit den Fermi-Dirac-Verteilungen (6.14), (6.15) zu beschreiben, wobei die Parameter aus *kp*-Rechnungen gewonnen wurden.

Die Offsets  $\Delta E_c = E_c - E_{c0}$  und  $\Delta E_v = E_v - E_{v0}$  zwischen den angepassten „makroskopischen“ Bandkanten  $E_c$  und  $E_v$  und den Grundzustandsenergien  $E_{c0} = E_c(k_{\parallel} = 0)$  und  $E_{v0} = E_v(k_{\parallel} = 0)$  des Quantum-Wells betragen jeweils  $-4.2$  meV und  $15.5$  meV. Dies führt zu einer leichten Vergrößerung der „makroskopischen“ Bandlücke  $E_g^{makro} = E_c - E_v$  gegenüber der durch die Grundzustandsenergien  $E_{c0}$ ,  $E_{v0}$  definierten optischen Bandlücke  $E_g^{QW} = E_{c0} - E_{v0}$  des Quantum-Wells. Diese Verschiebung muss bei der Berechnung des optischen Gewinns in der Lasersimulation berücksichtigt werden.

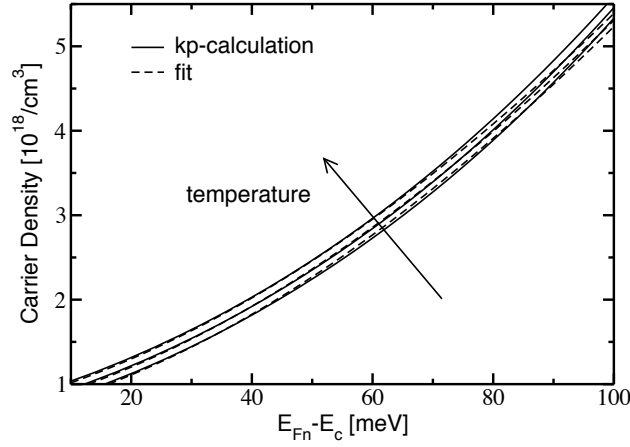


Abbildung 6.6: Beziehung (6.13) (*kp*-Rechnung) zwischen mittlerer Löcherdichte  $\bar{p}$  und Quasi-Fermi-Niveau  $E_{F_p}$  relativ zur effektiven Bandkante  $E_v$  für die Temperaturen  $T = 290$  K, 315 K, 340 K. Die gestrichelten Kurven zeigen den Fit zur makroskopischen Zustandsgleichung (6.15).

### 6.2.3 Optischer Materialgewinn

Wir nehmen weiterhin Flachbandbedingungen an. Dann berechnet sich der optische Materialgewinn in Abhängigkeit von der optischen Anregung in Termen der Bandstruktur und der Impulsmatrixelemente (6.1) nach der Formel

$$\begin{aligned}
 g(\omega) = & \frac{\pi \hbar q^2}{\varepsilon_0 m_0^2 n_r c} \cdot \frac{1}{d_{qw}} \cdot \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\substack{i \in c \\ j \in v}} \int \frac{|p_{ij} \cdot e|^2}{E_i - E_j} f(E_i - E_{F_n}) (1 - f(E_j - E_{F_p})) \\
 & \times \left[ 1 - \exp\left(\frac{\hbar\omega - (E_{F_n} - E_{F_p})}{k_B T}\right) \right] \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{[(E_i - E_j) - \hbar\omega]^2 + \Gamma^2} dk_{\parallel},
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

wobei der letzte Faktor eine Verbreiterung aufgrund von Stoßprozessen beinhaltet [End97]. Letztere sind über eine charakteristischen Intraband-Relaxationszeit  $\tau$  ( $\Gamma = \hbar/\tau$ ) parametrisiert.  $c$  ist die Lichtgeschwindigkeit,  $n_r$  der Brechungsindex,  $E_{photon} = \hbar\omega$  die Energie der optischen Anregung und  $e$  die Polarisationsrichtung des optischen Feldes.

Unter der Annahme, dass die optisch aktive Zone undotiert ist, haben wir unter Verwendung lokaler Ladungsneutralität  $\bar{n} = \bar{p}$  das Spektrum des optischen Materialgewinns für unsere Beispielstruktur in Abhängigkeit von der Wellenlänge für verschiedene Flächendichten und Temperaturen berechnet. Der Einfachheit halber verzichten wir im Folgenden auf die Überstriche bei

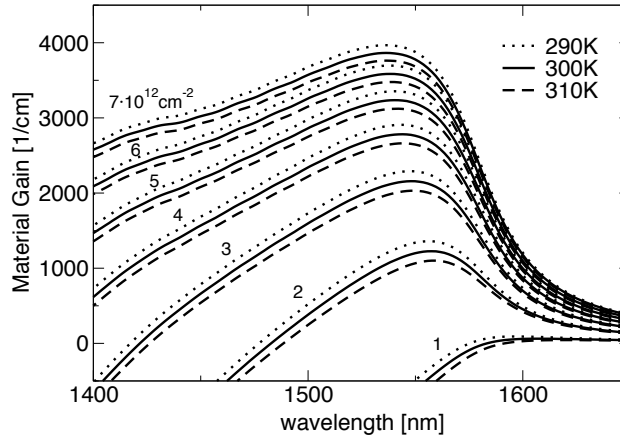


Abbildung 6.7: *Spektrum des optischen Materialgewinns (TE-Polarisation) nach (6.16) für verschiedene Flächendichten und Temperaturen.*

den mittleren Ladungsträgerdichten, d. h. wir bezeichnen diese mit  $n$  und  $p$ . Für die Berechnungen wurde eine Intraband-Relaxationszeit  $\tau$  von 60 fs und für den Brechungsindex  $n_r$  der Wert 3.4 verwendet. Die Ergebnisse sind für die TE-Polarisationsrichtung in Abbildung 6.7 dargestellt.

Nun wollen wir zum Zwecke des Upscalings das Maximum des optischen Materialgewinns, den so genannten Peak-Gain, in Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte und der Temperatur betrachten. Der Verlauf des Peak-Gain  $g_p$  ist in Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte in Abbildung 6.8 für verschiedene Temperaturen dargestellt. Für ausreichend hohe Ladungsträgerdichten (größer als  $2.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) können diese Gewinn-Kurven gut mit einem *logarithmisches* Gewinnmodell der Form

$$g_p(n) = g_0 \log(n/n_t) \quad (6.17)$$

beschrieben werden, siehe Abbildung 6.8. Für niedrigere Dichten versagt dieser Fit allerdings vollständig. Dies wird insbesondere beim Vergleich des differentiellen Gewinns  $dg_p/dn$  für den Fit und die berechneten Kurven deutlich, siehe Abbildung 6.9. Für  $g_0$  haben wir nur eine sehr geringe Temperaturabhängigkeit festgestellt, sodass für die Darstellung des Fits in den Abbildungen 6.8 und 6.9 für alle Temperaturen der gleiche Wert für  $g_0$  benutzt wurde. Für die Transparenz(-Ladungsträger)-Dichte  $n_t$  ergab sich näherungsweise eine lineare Zunahme mit der Temperatur. Das beschriebene Temperaturverhalten kann man auch sehr deutlich anhand des Verlaufs des differentiellen Gewinns nachvollziehen, welcher in Abbildung 6.9 dargestellt ist. Die gefittete Kurve

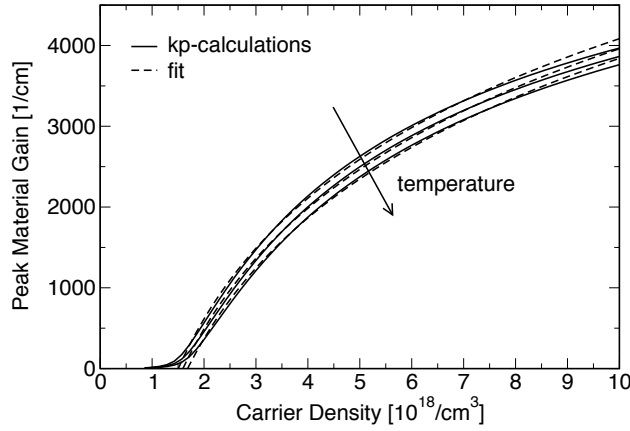


Abbildung 6.8: *Maximum des Materialgewinns in Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte für die Temperaturen  $T = 290$  K,  $300$  K,  $310$  K. Die gestrichelten Kurven zeigen den Fit an das logarithmische Gewinn-Modell  $g_p(n) = g_0 \log(n/n_t)$ .  $g_0 = 2155 \text{ cm}^{-1}$  ist kaum temperaturabhängig und wurde daher als konstant angenommen. Dagegen nimmt die Transparenzdichte  $n_t = n_t(T)$  näherungsweise linear mit der Temperatur zu.*

in dieser Abbildung ist den gleichen Daten berechnet, wie sie zum Fit des Peak-Gains der Kurven in Abbildung 6.8 verwendet wurden, d. h.

$$dg_p/dn = g_0/n,$$

mit dem gleichen von der Temperatur unabhängigen Wert für  $g_0$ . Abbildung 6.9 lässt auch eine geringe Verschiebung des Geltungsbereichs des logarithmischen Gewinn-Modells mit der Temperatur erkennen.

## 6.2.4 Spontane strahlende Rekombination

Nach [Wen] berechnet sich die Rate der spontanen strahlenden Rekombination  $R_{rad}$  aus den Bandstrukturdaten und den Impulsmatrixelementen nach der Formel

$$R_{rad} = \frac{n_r q^2}{\pi \hbar^2 c^3 \varepsilon_0 m_0^2} \frac{1}{d_{qw}} \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\substack{i \in c \\ j \in v}} \int (E_i - E_j) |p_{ij}|^2 f(E_i - E_{F_n}) f(E_{F_p} - E_j) dk_{\parallel}. \quad (6.18)$$

Die spontane strahlende Rekombination hat einen signifikanten Einfluss auf die Größe des Schwellenstroms des Lasers, wenn wie in unserem Falle die optisch aktive Zone undotiert ist und daher lokale Ladungsneutralität  $n = p$

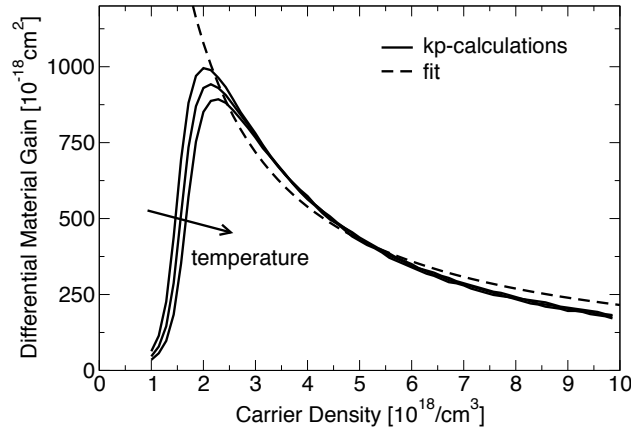


Abbildung 6.9: *Differentieller Gewinn berechnet am Maximum des Materialgewinns aus Abbildung 6.7 in Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte für die Temperaturen  $T = 290\text{ K}$ ,  $300\text{ K}$ ,  $310\text{ K}$ . Die gestrichelte Kurve ist dem Fits aus Abbildung 6.8 zugeordnet, d. h.  $dg_p/dn = g_0/n$  und damit unabhängig von der Temperatur.*

vorliegt. Somit ist die spontane strahlende Rekombination neben der im vorigen Abschnitt behandelten, durch den optischen Gewinn definierten stimulierten Rekombination, eine wichtige Größe in der Lasersimulation. Die Abhängigkeit der Rate der spontanen strahlenden Rekombination ist zusammen mit einem Fit an ein Rekombinationsgesetz von der Form

$$R_{rad}(n) = B n^\alpha \quad (6.19)$$

in Abbildung 6.10 für verschiedene Temperaturen dargestellt. Der Fit wurde jeweils für die Temperaturen  $T = 290\text{ K}$ ,  $315\text{ K}$ ,  $340\text{ K}$  getrennt durchgeführt. Dabei ergab sich in dem betrachteten Bereich der Ladungsträgerdichte ( $n = 1 \cdot 10^{18}\text{ cm}^{-3}$  bis  $5 \cdot 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ ) eine gute Übereinstimmung zwischen dem Potenzgesetz (6.19) und den quantenmechanisch berechneten Werten, siehe Abbildung 6.10. Die Exponenten zeigten eine leichte Temperaturabhängigkeit und lagen dabei näherungsweise bei  $\alpha = 1.5$ . Dieser Wert weicht deutlich von  $\alpha = 2$  ab, der dem in der Lasersimulation häufig verwendeten Rekombinations-Modell  $R_{rad}(n, p) \sim np = n^2$  für undotierte Quantum-Wells ( $n = p$ ) entspricht.

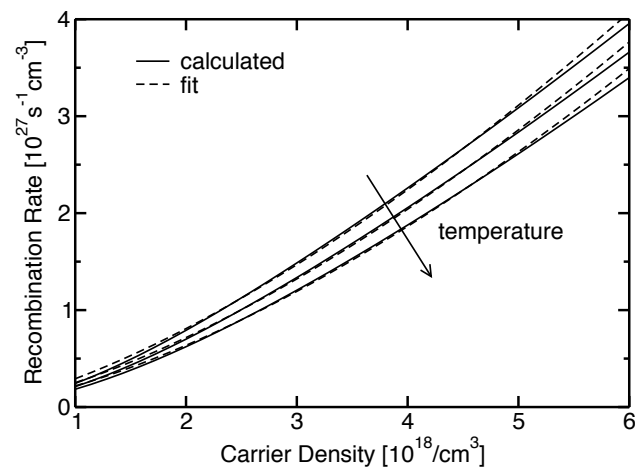


Abbildung 6.10: Rate der spontanen strahlenden Rekombination  $R_{rad}$  (6.18) in Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte ( $n = p$ ) für die Temperaturen  $T = 290 \text{ K}, 315 \text{ K}, 340 \text{ K}$ . Gestrichelt: Fit an  $R_{rad} = Bn^\alpha$  mit  $\alpha = 1.47$  (290 K), 1.51 (315 K), 1.55 (340 K).



# Anhang A

## Luttinger–Kohn–Hamiltonian für schwere und leichte Löcher

Der Luttinger–Kohn–Hamiltonian [Chu95, Kap. 4.5.2], [Chu91], [CC92] ist ein Vierband kp–Schrödingeroperator zur Beschreibung der obersten vier Valenzbänder und gegeben durch

$$H_{\mathbf{k}} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{pmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^* & P-Q & 0 & R \\ R^* & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^* & S^* & P+Q \end{pmatrix} + E_v \mathbb{1}_{\mathbb{C}^4} \quad (\text{A.1})$$

mit

$$P = \gamma_1(k_x^2 + k_y^2) - \frac{d}{dz} \left( \gamma_1 \frac{d}{dz} \cdot \right), \quad Q = \gamma_2(k_x^2 + k_y^2) + 2 \frac{d}{dz} \left( \gamma_2 \frac{d}{dz} \cdot \right), \quad (\text{A.2})$$

$$R = \sqrt{3} \left( -\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y \right), \quad (\text{A.3})$$

$$S = \sqrt{3}i(k_x - ik_y) \left( \gamma_3 \left( \frac{d}{dz} \cdot \right) + \frac{d}{dz} (\gamma_3 \cdot) \right), \quad (\text{A.4})$$

wobei, in Übereinstimmung mit der Kristallsymmetrie,  $k = (k_x, k_y, 0)$  der reduzierte Wellenvektor und  $z$  die Wachstumsrichtung ist und vom konventionellen Operator Ordering  $\gamma_3 k_z \rightarrow -\frac{i}{2}(\gamma_3(\frac{d}{dz}\cdot) + \frac{d}{dz}(\gamma_3\cdot))$  Gebrauch gemacht wurde. Der Hamiltonian modelliert das Bandmischen von zwei schweren und zwei leichten Löchern in Halbleitern im Falle energetisch deutlich abgetrennten Split-Off-Bänder. Die Luttinger-Parameter  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  beziehen sich auf die Bandstruktur der Volumenmaterialien am  $\Gamma$ -Punkt und  $E_v$  ist der Verlauf der Valenzbandkante. Für alle direkten Halbleitermaterialien mit Zinkblende-

Kristallgitter gilt  $\gamma_1 > 2\gamma_2$ , d. h. der Operator besitzt einen (negativ) definierten Hauptteil. Die relativen effektiven Massen der schweren und der leichten Löcher sind jeweils gegeben durch

$$\frac{m_{HH}^*}{m_0} = \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2}, \quad \frac{m_{LH}^*}{m_0} = \frac{1}{\gamma_1 + 2\gamma_2}, \quad (\text{A.5})$$

wobei  $m_0$  die Massen des freien Elektrons ist.

## A.1 Einfluss mechanischer Verspannungen

Als nächstes betrachten wir eine Erweiterung des Modells zur Beschreibung mechanisch verspannter Quantum-Wells. Mechanische Spannungen treten in Quantum-Wells auf, wenn die Gitterkonstante des Materials des Quantum-Wells mit der der Barrieren nicht übereinstimmt. Eine Folge der mechanischen Verspannung ist die Aufhebung der im Volumenmaterial bei  $k = 0$  vorhandenen energetischen Entartung der leichten und schweren Locherbänder. Im Rahmen des Vierband-Kohn-Luttinger-Modells lassen sich mechanisch verspannte Quantum-Wells mittels Ergänzung um Pikus-Bir-Deformationspotentiale beschreiben. Den modifizierten Kohn-Luttinger-Hamiltonian erhält man dabei durch die folgende Ersetzung der Terme  $P$ ,  $Q$ ,  $R$  und  $S$  in (A.1):

$$P \rightarrow P + P_\varepsilon, \quad Q \rightarrow Q + Q_\varepsilon, \quad R \rightarrow R + R_\varepsilon, \quad S \rightarrow S + S_\varepsilon, \quad (\text{A.6})$$

mit

$$P_\varepsilon = -a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}), \quad Q_\varepsilon = -\frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}), \quad (\text{A.7a})$$

$$R_\varepsilon = \frac{\sqrt{3}}{2}b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy}, \quad S_\varepsilon = -d(\varepsilon_{xz} + i\varepsilon_{yz}). \quad (\text{A.7b})$$

Der Einfluss der mechanischen Verspannungen führt zur einer energetischen Verschiebung der leichten und schweren Lochbänder, die je nach Art der Verspannung unterschiedlich ist. Im Falle biaxial verspannter Quantum-Wells ist der Verzerrungstensor  $\varepsilon$  diagonal. Die biaxiale Verspannung führt dann in tensil (dehnend) verspannten Quantenschichten zu einer energetischen Bevorzugung der leichten Löcher, wohingegen von kompressiver (stauchender) Verspannung die schweren Löcher profitieren. Eine ausführliche Darstellung

der sich ergebenden Bandkantenverschiebungen und deren Auswirkungen auf die Bandstruktur findet sich z. B. in [Chu95, Kap. 4.9].

## A.2 Koeffizientenmatrizen der Normalform

Die Koeffizientenmatrizen zur Darstellung des Luttinger–Kohn–Hamiltonian in der in Kapitel 3 eingeführten Normalform sind für den Fall in [001]-Richtung gewachsener Quantum-Wells und Berücksichtigung der Pikus-Bir-Deformationspotentiale gegeben durch:

$$m = \begin{pmatrix} m_1 & & & \\ & m_2 & & \\ & & m_2 & \\ & & & m_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

mit

$$m_1 = \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2), \quad m_2 = \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2) \quad (\text{A.9})$$

oder

$$m_1 = \frac{\hbar^2}{2m_{HH}}, \quad \frac{m_{HH}}{m_0} = \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2}, \quad m_2 = \frac{\hbar^2}{2m_{LH}}, \quad \frac{m_{LH}}{m_0} = \frac{1}{\gamma_1 + 2\gamma_2}, \quad (\text{A.10})$$

$$e = -E_v 1_4, \quad (\text{A.11})$$

$$M_0 = 0, \quad (\text{A.12})$$

$$M_1 = -i \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \gamma_3 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

$$M_2 = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \gamma_3 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.14})$$

$$U_1 = U_2 = 0, \quad (\text{A.15})$$

$$U_{11,22} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{pmatrix} \gamma_1 + \gamma_2 & 0 & \mp \sqrt{3} \gamma_2 & 0 \\ 0 & \gamma_1 - \gamma_2 & 0 & \mp \sqrt{3} \gamma_2 \\ \mp \sqrt{3} \gamma_2 & 0 & \gamma_1 - \gamma_2 & 0 \\ 0 & \mp \sqrt{3} \gamma_2 & 0 & \gamma_1 + \gamma_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.16})$$

$$U_{12} + U_{21} = i \frac{\hbar^2}{2m_0} 2\sqrt{3}\gamma_3 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.17})$$

$$v = \begin{pmatrix} P_\varepsilon + Q_\varepsilon & -S_\varepsilon & R_\varepsilon & 0 \\ -\bar{S}_\varepsilon & P_\varepsilon - Q_\varepsilon & 0 & R_\varepsilon \\ \bar{R}_\varepsilon & 0 & P_\varepsilon - Q_\varepsilon & S_\varepsilon \\ 0 & \bar{R}_\varepsilon & \bar{S}_\varepsilon & P_\varepsilon + Q_\varepsilon \end{pmatrix}. \quad (\text{A.18})$$

Die vom Verzerrungstensor  $\varepsilon(z)$  abhängigen Deformationswechselwirkungen  $P_\varepsilon$ ,  $Q_\varepsilon$ ,  $R_\varepsilon$  und  $S_\varepsilon$  sind gegeben durch (A.7), wobei die Pikus-Bir-Deformationspotentiale  $a_c$ ,  $a_v$ ,  $b$  und  $d$  jeweils materialabhängig und damit ortsabhängig sind.  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  und  $\gamma_3$  sind dabei Funktionen die den Verlauf der materialabhängigen Luttingerparameter beschreiben und die Funktion  $E_v$  beschreibt den Verlauf des Profils der Valenzbandkante. Unter der Voraussetzung

$$\gamma_1 > 2\gamma_2$$

an die Luttingerparameter ist der Hauptteil des kp-Schrödingeroperators im Sinne von Kapitel 3.5 definit und die dort bewiesenen Aussagen sind auf dieses Modell anwendbar.

# Anhang B

## Eigenwerte der Spin-Bahn-Kopplungs-Matrix

Zur Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren der Spin-Bahn-Kopplungs-Matrix (5.5) aus Kapitel 5 für kubische Materialien haben wir das Computer-Algebra-System MuPAD in der Version 2.5.0 verwendet. Das dazu verwendete MuPAD-Script lautet:

```
Mat:=Dom::Matrix();
Gso:=Mat([[0, 0, 0, 0],
          [0,-1, 0, 0],
          [0, 0,-1, 0],
          [0, 0, 0,-1]]);
Gx:=Mat([[0, 0, 0, 0],
          [0, 0, 0, 0],
          [0, 0, 0,-1],
          [0, 0, 1, 0]]);
Gy:=Mat([[0, 0, 0, 0],
          [0, 0, 0, 1],
          [0, 0, 0, 0],
          [0,-1, 0, 0]]);
Gz:=Mat([[0, 0, 0, 0],
          [0, 0,-1, 0],
          [0, 1, 0, 0],
          [0, 0, 0, 0]]);
```

```
Hsb:=linalg::stackMatrix( (Gso + I*Gz) . (Gy + I*Gx),
                          (-Gy + I*Gx) . (Gso -I*Gz));

linalg::eigenvalues(Hsb, Multiple);
```

Die mit MuPAD berechneten Eigenwerte von  $H_{sb}$  sind:

$$-3 \quad (\text{zweifach entartet}), \quad 0 \quad (\text{sechsfach entartet}). \quad (\text{B.1})$$

Die Eigenwerte von  $H_{\Delta}$  erhält man durch Multiplikation mit  $\Delta_{so}$ .

# Anhang C

## Interpolation der Materialparameter

Im folgenden werden die in dieser Arbeit verwendeten Modelle zur Berechnung der Materialparameter vorgestellt.

### C.1 Bandkantenverlauf

Zur Modellierung des Verlaufs der Bandkanten in der Nanostruktur verwenden wir die *Model-Solid-Theorie*. Als Bezugspunkt wird im Rahmen dieses Ansatzes ein gemittelt Valenzband-Niveau  $E_{v,av}$  verwendet. Die Valenzbandkante und die Leitungsbandkante berechnen sich dann relativ zu diesem Niveau mittels (siehe Abbildung C.1):

$$E_v = E_{v,av} + \frac{\Delta_{so}}{3}, \quad (\text{C.1})$$

$$E_c = E_v + E_g = E_{v,av} + \frac{\Delta_{so}}{3} + E_g, \quad (\text{C.2})$$

wobei  $\Delta_{so}$  die Spin-Bahn-Aufspaltung bezeichnet und  $E_g$  die Bandlücke, siehe auch Abbildung 2.2.

Für Heterostrukturen berechnen sich damit die Valenz- und Leitungsbanddiskontinuitäten mittels:

$$\Delta E_v = E_v^B - E_v^A, \quad \Delta E_c = E_c^B - E_c^A. \quad (\text{C.3})$$

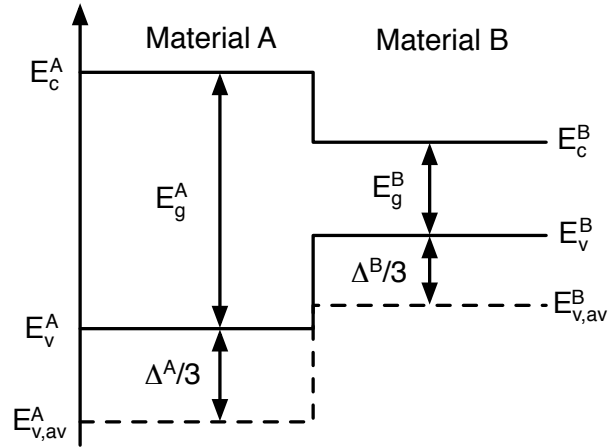


Abbildung C.1: Verlauf der Valenz- und Leitungsbandkanten entlang des Übergangs zwischen zwei Materialien im Rahmen der Model-Solid-Theorie.

## C.2 Lineare Interpolation für quaternäre Legierungen des Typs $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$

Zur linearen Interpolation eines Parameters  $P$  für ein quaternäres Material aus den Daten der binären Bestandteile wird folgende Formel verwendet:

$$P(A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}) = xyP(AC) + (1-x)(1-y)P(BD) + (1-x)yP(BC) + x(1-y)P(AD). \quad (C.4)$$

## C.3 Interpolation und Materialparameter für InGaAsP

Wir betrachten die Interpolation der Materialparameter für das quaternäre Mischkristallsystem  $In_{1-x}Ga_xAs_yP_{1-y}$  (Indiumgalliumarsenidphosphid).

Wie in Tabelle C.1 angegeben, wird für die meisten Parameter die lineare Interpolationsformel (C.4) benutzt, um auf Grundlage der Daten für die binären Bestandteile die Materialparameter des Mischkristalls in Abhängigkeit vom Galliumanteil  $x$  und vom Arsenanteil  $y$  zu berechnen. Die dafür verwendeten Materialdaten der binären Bestandteile GaAs, InAs, InP und GaP finden sich ebenfalls in Tabelle C.1.



Für die Bandlücke wird davon abweichend eine quadratische Interpolationsformel verwendet (Landolt-Börnstein), siehe [Chu95]:

$$E_g(x, y) = 1.35 + 0.668x - 1.068y + 0.758x^2 + 0.078y^2 - 0.069xy - 0.322x^2y + 0.03xy^2 \text{ (eV) bei 300 K . (C.5)}$$

	GaAs	InAs	InP	GaP	Interpolation
<b>Gitterkonstante</b>					
$a_0$ (Å)	5.6533	6.0584	5.6888	5.4505	linear
<b>Bandstrukturparameter</b>					
$E_g$ (eV) 300 K	1.424	0.354	1.344	2.78	quadr. s. (C.5)
$\Delta_{so}$ (eV)	0.34	0.38	0.11	0.08	linear
$E_{v,av}$ (eV)	-6.92	-6.67	-7.04	-7.40	linear
$E_p$ (eV)	25.7	22.2	20.7	22.2	linear
<b>Effektivmassen</b>					
$m_e^*/m_0$	0.067	0.023	0.077	0.25	linear
$\gamma_1$	6.8	20.4	4.95	4.05	linear
$\gamma_2$	1.9	8.3	1.65	0.49	linear
$\gamma_3$	2.73	9.1	2.35	1.25	linear
<b>Deformationspotentiale</b>					
$a_c$ (eV)	-7.17	-5.08	-5.04	-7.14	linear
$a_v$ (eV)	1.16	1.00	1.27	1.70	linear
$a = a_c - a_v$ (eV)	-8.33	-6.08	-6.31	-8.83	———
$b$ (eV)	-1.7	-1.8	-1.7	-1.8	linear
$d$ (eV)	-4.55	-3.6	-5.6	-4.5	linear
<b>elastische Konstanten</b>					
$C_{11}$ (10 GPa)	11.879	8.239	10.11	14.05	linear
$C_{12}$ (10 GPa)	5.376	4.526	5.61	6.203	linear
$C_{44}$ (10 GPa)	5.95	3.96	4.56	7.033	———

Tabelle C.1: *Materialparameter der binären Komponenten GaAs, InAs, InP und GaP nach [Chu95].*

# Anhang D

## Verfahren zur Lösung der algebraischen Eigenwertprobleme

In KPLIB stehen zwei Verfahren zur Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren der diskretisierten kp-Operatoren zur Verfügung: die Berechnung aller Eigenwerte und Eigenvektoren mit LAPACK sowie die iterative Berechnung nur der bandkantennahen Eigenwerte und Eigenvektoren mit ARPACK [LMSY02].

Bei der Lösung der Eigenwertprobleme mit LAPACK wird die LAPACK-Routine ZHBEV für komplexe hermitesche Bandmatrizen verwendet, wobei jeweils das gesamte Spektrum der Matrix berechnet wird. In der Routine ZHBEV wird dabei zunächst mit der LAPACK-Routine ZHBTRD die hermitesche Bandmatrix durch unitäre Transformation auf eine reelle Tridiagonalgestalt gebracht. Anschliessend werden mit der Routine ZSTEQR die Eigenwerte und Eigenvektoren der Tridiagonalmatrix mittels eines QR-Verfahrens bestimmt und die Ergebnisse zurücktransformiert.

Zur schnellen Berechnung der bandkantennahen Eigenwerte und Eigenvektoren steht in KPLIB der iterative Eigenwertlöser ARPACK zur Verfügung. Dieser wird im Shift-and-Invert-Modus benutzt, bei dem die  $n$  Eigenwerte bestimmt werden, die den kleinsten Abstand zum Shift  $\sigma$  haben. Daher eignet sich dieser Modus gut zur Berechnung der bandkantennahen Eigenlösungen. Dabei werden die Leitungsband- und Valenzbandzustände jeweils getrennt berechnet.

Für die Steuerung von ARPACK sind im wesentlichen vier Parameter notwendig:

**nev** die Anzahl der zu bestimmenden Eigenwerte

**ncv** die Länge der Krylov-Folge

**tol** die Toleranz

**sigma** der Shift  $\sigma$

Wir betrachten nun die Steuerung des ARPACK für den Fall des in Kapitel 5 dargestellten Achtband-Modells für Multi-Quantum-Wells. Die Steuerung hat folgende Aspekte:

- Die Wahl der Anzahl der zu bestimmenden Eigenwerte in Abhängigkeit von der Anzahl der Quantum-Wells und der zu bestimmenden Subbänder.
- Die Wahl des Shiftes in Abhängigkeit vom Wellenvektor  $k_{\parallel}$  während der Berechnung der Bandstruktur, d. h. der Eigenwertkurven  $E_n(k_{\parallel})$ .

Für die Anzahl der zu berechneten Eigenwerte  $nev$  habe ich gute Erfahrungen mit der Wahl

$$nev = 2 \times N_{wells} \times N_{c/v}$$

gemacht, wobei  $N_{wells}$  die Anzahl der Quantum-Wells ist und  $N_c$  bzw.  $N_v$  die Anzahl der gewünschten Leitungs- bzw. Valenzsubbänder ist. Für die in Kapitel 6.1 berechnete Multi-Quantum-Well-Struktur wurde beispielsweise für die Leitungsbänder  $N_c = 2$  und die Valenzbänder  $N_v = 4$  gesetzt, vgl. Abbildung 6.1. Für die Länge der Krylov-Folge  $ncv$  habe ich mit der Wahl  $ncv = 2 \times nev$  gute Erfahrungen gemacht.

Die Berechnung der Bandstruktur  $E_n(k)$  erfolgt entlang eines Pfades in der  $k_{\parallel}$ -Ebene. Diese Pfade werden durch eine Folge von Wellenvektoren  $k_n$  beschrieben, die am Zonenzentrum  $k = 0$  beginnen. Für die Wahl des Shiftes  $\sigma$  zur Berechnung der Bandstruktur entlang des Pfades ist in KPLIB und WIAS-QW folgendes Verfahren implementiert: Zur Berechnung der Eigenlösungen für den Beginn des Pfades  $k_0 = 0$  wird als Shift  $sigma_0$  die jeweilige Bandkante gewählt, d. h. zur Berechnung der Leitungsbänder das Minimum effektiven Leitungsbandkante und für Valenzbänder entsprechend das Maximum der Valenzbandkante. Als Shift  $sigma_1$  zur Berechnung der Eigenlösungen für den nächsten Wellenvektor  $k_1$  wird dann im Fall der Leitungsbänder der unterste Eigenwert  $E_{c0}(k_0)$  aus der Berechnung zum vorhergehenden Wellenvektor  $k_0$  gewählt und für Valenzbänder entsprechend der

oberste Eigenwert  $E_{v0}(k_0)$ . Auf diese Weise wird dann weiterverfahren, d.h. die Leitungsband-Shifts  $\sigma_{c,n}$  und Valenzband-Shifts  $\sigma_{v,n}$  gemäß der Vorschrift

$$\begin{aligned}\sigma_{c,n} &= \min\{E_{c\nu}(k_{n-1}) : \nu = 1, \dots, nev\}, \\ \sigma_{v,n} &= \max\{E_{v\nu}(k_{n-1}) : \nu = 1, \dots, nev\}\end{aligned}$$

gewählt. Auf diese Weise folgt man den Eigenwertkurven, was sich günstig auf die Konvergenzgeschwindigkeit des Eigenwertlösers auswirkt.

# Zusammenfassung

Diese Arbeit widmet sich der Untersuchung der Spektraleigenschaften einer speziellen Klasse von Multiband-Schrödingeroperatoren, den so genannten kp-Schrödingeroperatoren. Die gewonnenen Ergebnisse werden anhand eines Achtband-Modells verdeutlicht, an welchem auch Upscalingmethoden zur Verwendung von kp-Rechnungen in der Lasersimulation diskutiert werden.

kp-Schrödingeroperatoren sind etablierte Modelle zur Berechnung der elektronischen Struktur von Halbleiter-Quantenschichten. Die Bänder eines Halbleiters werden jeweils durch skalare, räumlich eindimensionale Schrödingeroperatoren beschrieben, deren Kopplung durch Differentialoperatoren erster und nullter Ordnung definiert ist. Diese Matrix-Schrödingeroperatoren hängen parametrisch vom zweidimensionalen Wellenvektor  $k$  ab. Die Eigenwertkurven dieser zweidimensionalen Schar räumlich eindimensionaler Eigenwertprobleme beschreiben die Bandstruktur in der Quantenschicht. Die Eigenfunktionen approximieren die zugehörige elektronische Wellenfunktion.

Bei der Untersuchung der Spektraleigenschaften der kp-Operatoren interessieren einerseits Aussagen für einen beliebigen aber fest vorgegebenen Wellenvektor und andererseits die Abhängigkeit dieser Eigenschaften vom Wellenvektor. Darüber hinaus stellt sich aus physikalischer Sicht die Frage nach der Existenz einer Spektrallücke bei  $k = 0$ , der Bandlücke der Quantenschicht, sowie nach der Erhaltung dieser Bandlücke für endliche Werte von  $k$ .

Die Untersuchung der kp-Operatoren erfolgt mit Hilfe von Stabilitätstheoremen und Methoden der analytischen Störungstheorie. Zur Frage der Existenz der Bandlücke leitet man quantitative Aussagen mit Hilfe von Formabschätzungen her. Die Resultate werden für das häufig benutzte Achtband-Modell konkret ausgewertet. Die Anwendung dieses Modells zur Simulation realer Mehrfach-Quantenschichten schließt diese Arbeit ab, wobei der Fokus auf der Verwendung der quantenmechanischen kp-Rechnungen für die optoelektronische Simulation von Halbleiterlasern liegt. Die Untersuchungen werden am Beispiel einer InGaAsP-Laserstruktur durchgeführt, deren Emissionswellenlänge auf die optische Faserkommunikation abgestimmt ist.

Aufgrund der Popularität der kp-Modelle findet man in der Literatur viele Beiträge zur Berechnung der elektronischen Struktur konkreter Halbleiter-Heterostrukturen. Daneben gibt es eine Reihe aktueller Arbeiten, die sich mit Modellierungsfragen sowie dem Problem potentiell auftretender unphysikalischer Lösungen und deren Unterdrückung auseinandersetzen. Dagegen ist über die Spektraleigenschaften der kp-Schrödingeroperatoren bisher wenig bekannt.



# Literaturverzeichnis

- [AG81] ACHIESER, N. I. und I. M. GLASMANN: *Theorie der linearen Operatoren im Hilbert-Raum*. Akademie-Verlag, Berlin, 1981.
- [Bah90] BAHDER, THOMAS B.: *Eight-band  $k \cdot p$  model of strained zinc-blende crystals*. Physical Review B, 41(17):11992–12001, 1990.
- [Bas88] BASTARD, G.: *Wave Mechanics applied to Semiconductor Heterostructures*. Halsted Press, 1988.
- [Ber78] BEREZANSKIJ, JU. M.: *Selfadjoint operators in spaces of functions with an infinite number of variables*. Naukova Dumka, Kiev, 1978. in Russisch.
- [BGH05] BANDELOW, U., H. GAJEWSKI und R. HÜNLICH: *Fabry–Perot Lasers: Thermodynamics-Based Modeling*. In: PIPREK, JOACHIM (Herausgeber): *Optoelectronic Devices*. Springer, 2005.
- [BGK00] BANDELOW, U., H. GAJEWSKI und H.-CHR. KAISER: *Modeling combined effects of carrier injection, photon dynamics and heating in Strained Multi-Quantum Well Lasers*. In: ROLF H. BINDER, PETER BLOOD, MAREK OSINSKI (Herausgeber): *Physics and Simulation of Optoelectronic Devices VIII*, Band 3944 der Reihe *Proceedings of SPIE*, Seiten 301–310, August 2000.
- [BHK03] BANDELOW, U., R. HÜNLICH und TH. KOPRUCKI: *Simulation of Static and Dynamic Properties of Edge-Emitting Multiple-Quantum-Well Lasers*. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 9:798–806, 2003.
- [BK] BANDELOW, UWE und THOMAS KOPRUCKI: *WIAS-QW*. Online: <http://www.wias-berlin.de/software/qw>.

- [BKKR00] BANDELOW, U., H.-CHR. KAISER, T. KOPRUCKI und J. REHBERG: *Spectral properties of  $k \cdot p$  Schrödinger operators in one space dimension*. Numerical Functional Analysis and Optimization, 21:379–409, 2000.
- [BKKR03] BANDELOW, U., H.-CHR. KAISER, TH. KOPRUCKI und J. REHBERG: *Modeling and simulation of strained quantum wells in semiconductor lasers*. In: JÄGER, WILLI und HANS-JOACHIM KREBS (Herausgeber): *Mathematics - Key Technology for the Future. Joint Projects Between Universities and Industry*, Seiten 377–390. Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2003.
- [Blo32] BLOCH, FELIX: *Über die Quantenmechanik der Electronen in Kristallgittern*. Z. Physik, 52:555–600, 1932.
- [BP74] BIR, G. L. und G. E. PIKUS: *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*. John Wiley & Sons, New York, 1974. Übersetzung aus dem Russischen von P. Shelnitz.
- [Bur92] BURT, M. G.: *The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures*. J. Physics. Condens. Matter, 4:6651–6690, 1992.
- [Bur94] BURT, M. G.: *Direct derivation of effective-mass equations for microstructures with atomically abrupt boundaries*. Physical Review B, 50(11):7518–7525, 1994.
- [Bur98] BURT, M. G.: *Fundamentals of envelope function theory for electronic states and photonic modes in nanostructures*. J. Physics. Condens. Matter, 11:R53–R83, 1998.
- [Car96] CARDONA, M.: *Fundamentals of Semiconductors*. Springer, Berlin, 1996.
- [CB66] COHEN, MARVIN L. und T. K. BERGSTRESSER: *Band Structures and Pseudopotential Form Factors for Fourteen Semiconductors of the Diamond and Zinc-blende Structures*. Phys. Rev., 141:789–796, 1966.
- [CC76] CHELIKOWSKY, JAMES R. und MARVIN L. COHEN: *Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors*. Phys. Rev. B, 14:556–582, 1976.



- [CC92] CHAO, CALVIN YI-PING und SHUN LIEN CHUANG: *Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells*. Physical Review B, 46(7):4110–4122, 1992.
- [CC96] CHUANG, S. L. und C. S. CHANG: *k·p method for strained wurtzite semiconductors*. Phys. Rev. B, 54:2491–2504, 1996.
- [Chu91] CHUANG, SHUN LIEN: *Efficient band-structure calculations of strained quantum wells*. Physical Review B, 43(12):9649–9661, 1991.
- [Chu95] CHUANG, S. L.: *Physics of optoelectronic Devices*. Wiley & Sons, New York, 1995.
- [CKI94] CHOW, WENG W., STEPHAN W. KOCH und MURRAY SARGENT III: *Semiconductor–Laser Physics*. Springer–Verlag, Berlin, 1994.
- [EBWS95] ENDERS, P., A. BÄRWOLFF, M. WOERNER und D. SUI SKY: *k·p theory of energy bands, wave functions and optical selection rules in strained tetrahedral semiconductors*. Physical Review B, 51(23):16695–16704, 1995.
- [EG92] EVANS, L. C. und R. F. GARIEPY: *Measure theory and fine properties of functions*. CRC Press, Boca Raton, Ann Arbor, London, 1992.
- [End97] ENDERS, P.M.: *Enhancement and spectral shift of optical gain in semiconductors from non–markovian intraband relaxation*. IEEE Journal of Quantum Electronics, 33(4):580–588, 1997.
- [EW96] ENDERS, P. und M. WOERNER: *Exact  $4 \times 4$  block diagonalization of the eight-band k·p Hamiltonian matrix for tetrahedral semiconductors and its application to strained quantum wells*. Semicond. Sci. Technol., 11:983–988, 1996.
- [FKL01] FUHRMANN, J., TH. KOPRUCKI und H. LANGMACH: *pdelib: An open modular tool box for the numerical solution of partial differential equations. design patterns*. In: HACKBUSCH, W. und G. WITTUM (Herausgeber): *Proceedings of the 14th GAMM Seminar on Concepts of Numerical Software*, Kiel, 2001.

- [For93] FOREMAN, BRADLEY A.: *Effective-mass Hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures*. Physical Review B, 48(7):4964–4967, 1993.
- [For97] FOREMAN, BRADLEY A.: *Elimination of spurious solutions from eight-band  $k \cdot p$  theory*. Physical Review B, 56(20):R12748–R12751, 1997.
- [Gaj93] GAJEWSKI, H.: *Analysis und Numerik von Ladungstransport in Halbleitern (Analysis and Numerics of Carrier Transport in Semiconductors)*. Mitt. Ges. Angew. Math. Mech., 16(1):35–57, 1993.
- [GHB93] GERSHONI, D., C. H. HENRY und G. A. BARAFF: *Calculating the Optical Properties of Multidimensional Heterostructures: Application to the Modeling of Quarternary Quantum Well Lasers*. IEEE Journal of Quantum Electronics, 29(9):2433–2450, 1993.
- [Hör66] HÖRMANDER, L.: *An introduction to complex analysis in several variables*. D. Van Nostrand Company, New Jersey, 1966.
- [Kan66] KANE, E. O.: *The  $k \cdot p$  Method*. In: WILLARDSON, R. K. und ALBERT C. BEER (Herausgeber): *Semiconductors and Semimetals*, Band 1, Kapitel 3, Seiten 75–100. Academic Press, New York and London, 1966.
- [Kan82] KANE, EVAN O.: *Energy Band Theory*. In: PAUL, WILLIAM (Herausgeber): *Handbook on Semiconductors*, Band 1, Kapitel 4a, Seiten 193–217. North-Holland, Amsterdam, New York, Oxford, 1982.
- [Kat84] KATO, TOSIO: *Perturbation theory for linear operators*, Band 132 der Reihe *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. Springer Verlag, Berlin, 1984.
- [KBB<sup>+</sup>05] KOPRUCKI, T., M. BARO, U. BANDELOW, T.Q. TIEN, F. WEIK, J.W. TOMM, M. GRAU und M.-CH. AMANN: *Electronic structure and optoelectronic properties of strained InAsSb/GaSb multiple quantum wells*. Appl. Phys. Lett., 87:81911/1–181911/3, 2005.
- [KKF06] KOPRUCKI, T., H.-C. KAISER und J. FUHRMANN: *Modeling and simulation of strained quantum wells in semiconductor lasers*. In: MIELKE, A. (Herausgeber): *Analysis, Modeling and*

*Simulation of Multiscale Problems*, Seiten 365–394. Springer Verlag, Heidelberg, 2006.

- [Kri91] KRIJN, M P C M: *Heterojunction band offsets and effective masses in III-V quarternary alloys*. *Semicond. Sci. Technol.*, 6:27–31, 1991.
- [LMSY02] LEHOUCQ, R., K. MASCHHOFF, D. SORENSEN und C. YANG: *ARPACK-Arnoldi package*. URL: <http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>, 2002. Paket `arpack96.tar.Z` und Patch aus 2002.
- [MGO94] MENEY, A. T., BESIRE GONUL und E. P. O'REILLY: *Evaluation of various approximations used in the envelope-function method*. *Physical Review B*, 50(15):10893–10904, 1994.
- [MTPP05] MLINAR, V., M. TADIĆ, B. PARTOENS und F. M. PEETERS: *Nonsymmetrized Hamiltonian for semiconducting nanostructures in a magnetic field*. *Physical Review B*, 71:205305, 2005.
- [Naj68] NAJMARK, M. A.: *Linear differential operators*. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften. Ungar, New York, 1968. Übersetzung aus dem Russischen editiert von W. N. Everitt.
- [Paz83] PAZY, A.: *Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations*, Band 44 der Reihe *Applied Mathematical Sciences*. Springer Verlag, Berlin, 1983.
- [PFFD01] POKATILOV, E. P., V. A. FONOBEROV, V. M. FOMIN und J. T. DEVREESE: *Development of an eight-band theory for quantum dot heterostructures*. *Physical Review B*, 64:245328, 2001.
- [RAE<sup>+</sup>02] RODINA, A. V., A. Y. ALEKSEEV, A. L. EFROS, M. ROSEN und B. K. MEYER: *General boundary conditions for the envelope function in the multiband  $k \cdot p$  model*. *Physical Review B*, 65:125302, 2002.
- [Sin93] SINGH, J.: *Physics of semiconductors and their heterostructures*. McGraw–Hill, New York, 1993.
- [Sol03] SOLER, X. C.: *Theoretical Methods for Spintronics in Semiconductors with Applications*. Doktorarbeit, California Institute of Technology, Pasadena, California, USA, 2003.

- [Sti01] STIER, OLIVER: *Electronic and Optical Properties of Quantum Dots and Wires*. Dissertation TU Berlin, Germany. Wissenschaft & Technik Verlag, Berlin, 2001.
- [VdW89] WALLE, CHRIS G. VAN DE: *Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory*. Phys. Rev. B, 39:1871–1883, 1989.
- [VMRM01] VURGAFTMAN, I., J. R. MEYER und L. R. RAM-MOHAN: *Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys*. J. Appl. Phys., 89:5815–5875, 2001.
- [VSW07] VEPREK, R. G., S. STEIGER und B. WITZIGMANN: *Ellipticity and the spurious solution problem of  $k \cdot p$  envelope equations*. Physical Review B, 76:165320, 2007.
- [Wen] WENZEL, HANS: *How to use the kp8 programs*. Online: <http://www.fbh-berlin.de/people/wenzel/kp8.html>.