

HL 15 Elektronentheorie

Zeit: Freitag 15:00–16:00

Raum: TU P-N226

HL 15.1 Fr 15:00 TU P-N226

Orbital functionals in current-density-functional theory — •NICOLE HELBIG, STEFAN KURTH, and EBERHARD K.U. GROSS — Freie Universität Berlin, Arnimalle 14, 14195 Berlin

The ab-initio treatment of many-electron systems in strong magnetic fields is still a challenging task. Current-density-functional theory (CDFT) is an option whose theoretical foundation was laid down many years ago. However, the application of this formalism has been hesitant because all electron-gas-based (LDA-type) approximations of the CDFT exchange-correlation functional have serious pathologies which make them awkward or impossible to use in practical calculations. As an alternative we have developed a CDFT version of the optimized effective potential (OEP) method which allows for the use of explicitly orbital-dependent functionals in the context of CDFT. We will present the derivation of these equations and will show results for a quantum dot in external magnetic fields.

HL 15.2 Fr 15:15 TU P-N226

Eine Methode zur Berechnung der Temperaturabhängigkeit der Fermi Energie in intrinsischen Halbleitern — •RUDOLF ZELLER — Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich

Die Lehrbuchformel $E_F(T) = (E_V + E_L)/2 + 3kT/4 \ln(m_V/m_L)$ für die Fermi Energie als Funktion der Energiekanten und effektiven Massen von Leitungsband (L) und Valenzband (V) beruht auf der Näherung parabolischer Bänder und der Näherung $kT \ll E_L - E_V$. Aus gerechneten Bandstrukturen lassen sich die effektiven Massen nur sehr schwierig ermitteln und es ist nicht klar, für welchen Temperaturbereich die Näherungen gelten. Es wird eine Methode vorgestellt, wie man ohne diese Probleme $E_F(T)$ direkt aus der integrierten Zustandsdichte bestimmen kann, indem man diese Zustandsdichte als Funktion der komplexen Energie-Variablen betrachtet und ihre analytischen Eigenschaften ausnutzt. Die Methode wurde auf das Beispiel von GaN in Zinkblendestruktur angewendet und es werden Ergebnisse gezeigt, die im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie mittels der tight-binding Korringa-Kohn-Rostoker Greenfunktionsmethode berechnet wurden.

HL 15.3 Fr 15:30 TU P-N226

kp parameters of wurtzite GaN — •SVIATOSLAV SHOKHOVETS¹, GERHARD GOBSCH¹, and OLIVER AMBACHER² — ¹Institute of Physics, TU Ilmenau, PF 100565, 98684 Ilmenau — ²Center for Micro- and Nanotechnologies, TU Ilmenau, PF 100565, 98684 Ilmenau

Using a so-called A-set of parameters describing the six highest valence bands (VBs) and an assumption of a nonparabolic conduction band (CB) we calculated the imaginary part of the dielectric function in the vicinity of the fundamental absorption edge of wurtzite GaN. Both interband optical transitions and excitonic effects were included. Comparison to experiment yields the momentum matrix element, the electron effective mass, the size of the CB nonparabolicity, and parameter F related to the influence of remote bands. We estimate effects on the values determined owing to discrepancies between the reported A-sets of VB parameters, as well as optical anisotropy and possible anisotropy of the electron effective mass and present a set of self-consistent kp parameters which provides a parameterisation of the band structure of wurtzite GaN in the framework of an 8x8 Hamiltonian.

HL 15.4 Fr 15:45 TU P-N226

Diskretisierung von Mehrband-k-p-Schrödingergleichungen für mehrdimensionale Halbleiternanostrukturen — •TILL ANDLAUER, ALEX TRELLAKIS und PETER VOGL — Walter Schottky Institut, Technische Universität München, Am Coulombwall 3, 85748 Garching

Wir präsentieren eine systematische Untersuchung der Mehrband-k-p-Methode für beliebig orientierte, null- bis dreidimensionale Nanostrukturen in Ortsraum-Diskretisierung. Es ist bekannt, dass diese Methode zu unphysikalischen Lösungen führen kann, wie z.B. artifizielle Bandlücken-Zustände im Inneren von Halbleitern oder fälschlich gebundene Zustände an Grenzflächen verschiedener Materialien. Wir zeigen, dass man durch geeignete Reskalierung von Materialparametern im Hamilton, durch richtige Anordnung der Differenzial-Operatoren und der ortsabhängigen

Materialgrößen in den Hamilton-Matrixelementen sowie durch passende Wahl des Diskretisierungsverfahrens diese Mängel beheben kann. In diesem Zusammenhang haben wir ein Diskretisierungsschema des Einhüllenden-Funktions-Formalismus entwickelt, das es ermöglicht, die Hamiltonmatrix unabhängig von der räumlichen Dimension, der Geometrie und Orientierung der Nanostruktur, sowie der Zahl der Basiszustände zu konstruieren.