

# **Störstellen auf Hofstadters Schmetterling**

**oder:**

**Zur Greensfunktion des almost–Mathieu–Operators**

DISSERTATION  
ZUR ERLANGUNG DES DOKTORGRADES DER  
NATURWISSENSCHAFT  
(DR. RER. NAT)  
NATURWISSENSCHAFTLICHE FAKULTÄT II – PHYSIK  
DER UNIVERSITÄT REGENSBURG

vorgelegt von

**Florian Chmela**

aus

Rosenheim

2000

Promotionsgesuch eingereicht am: 13.12.2000

Diese Arbeit wurde angeleitet von: Prof. Dr. Obermair

Prüfungsausschuß:

Vorsitzender: Prof. Dr. M. Creuzburg

1. Prüfer: Prof. Dr. G. Obermair

2. Prüfer: Prof. Dr. I. Morgenstern

3. Prüfer: Prof. Dr. D. Strauch

Tag der mündlichen Prüfung: 27.04.2001

*Für Sophie  
und Anne*



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2. Die Azbel–Harper–Gleichung</b>	<b>7</b>
2.1. Der Tight–Binding–Formalismus . . . . .	7
2.2. Der Azbel–Harper–Hamiltonian . . . . .	12
<b>3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter</b>	<b>23</b>
3.1. Die Greensfunktion des Tight–Binding–Modells . . . . .	24
3.1.1. Quadratgitter . . . . .	25
3.1.2. Einfach kubisches Gitter . . . . .	30
3.2. Die Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian . . . . .	31
3.2.1. Die Greensfunktion für den gesamten Kristall . . . . .	32
3.2.2. Die Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian . . . . .	33
3.2.3. Berechnung der Diagonalelemente . . . . .	42
3.2.4. Die Nebendiagonalelemente . . . . .	50
<b>4. Störstellen im Kristall</b>	<b>59</b>
4.1. Die Greensfunktion des gestörten Systems . . . . .	59
4.1.1. Die Zustandsdichte des gestörten Systems . . . . .	63
4.2. Störstellen im Tight–Binding–Modell . . . . .	65
4.3. Störstellen im Azbel–Harper–Modell . . . . .	70

## *Inhaltsverzeichnis*

4.3.1. Lage zu den Bandkanten . . . . .	72
4.4. Zwei Störstellen . . . . .	82
<b>5. Zusammenfassung</b>	<b>91</b>
<b>A. Zur Gleichheit der Elemente in einer Diagonalen</b>	<b>95</b>
<b>B. Die Greensfunktion für große <math> l - m </math></b>	<b>103</b>
<b>C. Die Zustandsdichte des Systems mit einem Fremdatom</b>	<b>105</b>
<b>D. Verwendete Bezeichnungen</b>	<b>109</b>

# 1. Einleitung

Bereits mit dem Einzug der Quantenmechanik in die Theoretische Festkörperphysik stellte ein eher einfaches Modellsystem die neue Theorie vor ein großes Problem. Die Schrödingergleichung eines Elektrons in einem periodischen Potential bei angelegtem Magnetfeld ist nicht separabel. Das Problem des Diamagnetismus von Metallen und Halbleitern, mit dem noch einfacheren Modell des freien Elektronengases schon um 1930 von Landau gelöst, erwies sich somit bei der etwas realistischeren Beschreibung auf der Basis von Blochfunktionen als unerwartet kompliziert.

Die physikalische Bedeutung dieses Systems ist unbestritten, eine Vielzahl quantenmechanischer Effekte konnte in Experimenten an Elektronen in einem Kristallgitter bei angelegtem Magnetfeld gefunden werden. Insbesondere durch die Entdeckung des ganzzahligen Quanten-Hall-Effekts durch Klaus von Klitzing im Jahre 1980 [Kli] hat die theoretische Beschreibung des zweidimensionalen Elektronengases im Magnetfeld eine wahre Renaissance erlebt.

Bis heute führen nahezu alle Ansätze zur Lösung des Problems der Nichtseparabilität durch Einführung der Einband-Näherung auf eine eindimensionale Differenzgleichung, die ihre wohl bekannteste Form in der sogenannten Azbel-Harper-Gleichung, in der mathematischen Physik als almost-Mathieu-Gleichung bezeichnet, findet. Sie wurde zum ersten Mal im Jahre 1955 von P. G. Harper aufgestellt [Har].

Die Azbel-Harper-Gleichung ist sicherlich kein perfektes Festkörpermodell, die Näherungen die bei ihren Herleitungen jeweils gemacht werden, wie Kapitel 2 dieser Arbeit beschrieben, sind beträchtlich. Dennoch widersetzte sich die Gleichung für annähernd 20 Jahre einer exakten allgemeinen Lösung. Erst Hofstadter gelang es im Jahre 1975 zum ersten Mal, das Spektrum eines Elektrons in dem durch die Azbel-Harper-Gleichung definierten System anzugeben und topologisch zu klassifizieren, Ergebnis war der sogenann-

## 1. Einleitung

te Hofstadter–Schmetterling [Hof1][Hof2]. Seither stellt die Azbel–Harper–Gleichung einen Gegenstand aktueller Forschung dar, dieser Trend ist auch heute noch ungebrochen (siehe z.B. [Ke1], [Lip] und [Pap]).

Im Gegensatz dazu ist das Problem eines Elektrons in einem Kristallgitter mit einem oder mehreren Fremdatomen schon lange gelöst. Im Jahr 1949 gelang es J. C. Slater, die Störstellenniveaus in Tight–Binding–Näherung zu berechnen, mit Hilfe der Greensfunktion konnte die Rechnung im Jahr 1954 durch G. F. Kostner und J. C. Slater wesentlich vereinfacht werden [Kos2].

Alle Untersuchungen des Azbel–Harper–Modells gehen von einem perfekten Einkristall aus. Fast alle wesentlichen Effekte der experimentellen Festkörperphysik basieren dagegen auf dotierten Halbleitern, deren Kristallstruktur ist durch Fremdatome gestört. In dieser Arbeit soll nun der Versuch unternommen werden, den bekannten Ansatz von Kostner und Slater zur Behandlung von Störstellen in einem Festkörper auf das Azbel–Harper–Modell zu übertragen und so die Auswirkung eines Fremdatoms auf das Spektrum des Modellsystems, und andere physikalische Größen —sofern sie sich aus der Azbel–Harper–Gleichung ableiten lassen— zu berechnen.

Um diese Aufgabe zu bewältigen, wird zunächst in Kapitel 2 die Herleitung des Modellsystems skizziert. Nach einer Beschreibung der Tight–Binding–Näherung und der Herleitung des sogenannten Tight–Binding–Hamiltonians wird mit Hilfe der Peierls–Onsager–Hypothese ein möglicher Weg zur Azbel–Harper–Gleichung aufgezeigt. Der effektive Hamiltonoperator für Blochelektronen im Magnetfeld wird aus ihr abgeleitet. Einige der wesentlichen Eigenschaften dieses Modells werden im Anschluß daran erläutert.

Im dritten Kapitel werden die mathematischen Grundlagen für das angestrebte Ziel erarbeitet: die Berechnung der Greensfunktion für Teilchen in einem periodischen Potential, zunächst ohne angelegtem Magnetfeld. Analog zu dieser Rechnung wird dann die Greensfunktion für ein zweidimensionales Elektronengas im Kristallgitter bei angelegtem Magnetfeld so weit wie möglich analytisch und dann numerisch berechnet und diskutiert. Einige wesentliche Eigenschaften der Greensfunktion werden rigoros bewiesen, die Parallelen zum System ohne Magnetfeld ausführlich dargestellt.

In Kapitel 4 wird die berechnete Greensfunktion zur exakten Berechnung des Spektrums mit Störstellen benützt. Dabei wird zunächst allgemein vorgegangen: Mit den Berechnungen aus Kapitel 3 ist eine allgemeine Abschätzung der Auswirkungen eines Fremdatoms auf das Spektrum des Modellsystems, unabhängig vom angelegtem Magnetfeld, möglich.



Die Berechnung des gestörten Systems ohne Magnetfeld wird im Anschluß vorgeführt. Daraufhin wird das Spektrum (und die Zustandsdichte) des Azbel–Harper–Modells, zunächst mit einer Störstelle berechnet; hier ergeben sich die zentralen Ergebnisse:

- Eine isolierte lokale Störung, also *ein* Fremdatom, erzeugt in *jeder* Lücke des Hofstadter–Spektrums, also zwischen zwei magnetischen Unterbändern, *ein* Störstellenniveau.
- Im Inneren der Gruppen von magnetischen Unterbändern, die im allgemeinen sehr dicht liegen, werden daher die Ionisierungsenergien aus den lokalisierten Störstellenniveaus sehr klein.
- Die Rolle von Donatoren und Akzeptoren kann im genannten Fall dicht liegender Unterbänder vertauscht werden.
- Die Eigenfunktionen zu den Störstellenniveaus sind lokalisiert.

Schließlich wird in Abschnitt 4.4 das Problem mit zwei Störstellen in Abhängigkeit von deren Abstand und Lage behandelt. Das Spektrum von zwei Fremdatomen im ansonsten perfekten Kristallgitter läßt Schlüsse auf die Auswirkung beliebig vieler Streuzentren zu; das aus der qualitativen Diskussion des ganzzahligen Quanten–Hall–Effekts vertraute Bild von Landau–Bändern in dotierten Systemen mit ausgedehnten Zuständen im Inneren, lokalisierten Zuständen am Bandrand, wird zumindest tendenziell bestätigt.

Einige der langwierigeren Rechnungen dieser Arbeit wurden im Anhang A bis C aufgenommen. Im Anhang D werden die in der Arbeit häufig verwendeten Bezeichnungen mit ihrer Bedeutung zur besseren Übersicht tabellarisch aufgeführt.

## 1. *Einleitung*

## 2. Die Azbel–Harper–Gleichung

Ziel dieser Arbeit ist es, den Einfluß von Fremdatomen auf das Spektrum von Blochelektronen in einem idealen Kristall bei angelegtem Magnetfeld zu bestimmen. Als Ausgangspunkt dient das sogenannte Tight–Binding–Modell eines idealen Kristalls ohne Störstellen. Seine Herleitung wird in Abschnitt 2.1 skizziert.

Daran anschließend wird in Abschnitt 2.2 mit Hilfe der Peierls–Onsager–Hypothese ein effektiver Hamiltonoperator bei angelegtem Magnetfeld abgeleitet. Die wesentlichen Eigenschaften des sogenannten Azbel–Harper–Hofstadter–Modells werden beschrieben und diskutiert. Dieses Modellsystem bildet die Grundlage für die weitere Arbeit, die Berechnung der Störstellenniveaus mit Hilfe der Greensfunktion.

### 2.1. Der Tight–Binding–Formalismus

Um die Bewegung von Elektronen in einem Kristallgitter zu beschreiben, stellt die Festkörperphysik verschiedene Verfahren bereit. Je nach Stärke der Bindung der Elektronen an die Gitteratome wird zwischen freiem Elektronengas und schwach bzw. stark gebundenen Elektronen unterschieden. Diese Arbeit wird sich auf den Ansatz für stark gebundene Elektronen, den sogenannten Tight–Binding–Formalismus, beschränken. Seine Herleitung ist in den Standardwerken zur Festkörperphysik, z.B. [Ash], [Ki1] oder [Ki2], ausführlich beschrieben. Im Folgenden wird die Vorgehensweise kurz dargestellt.

Ein idealer Kristall ist aus regelmäßig angeordneten Atomen an den Gitterpunkten  $\vec{R}_{\vec{n}}$  mit den Gitterindizes  $\vec{n}$  aufgebaut. Der Hamiltonoperator eines Elektrons im Potential aller Kristallatome lautet daher:

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{\vec{n}} V_{Atom}(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}). \quad (2.1)$$

## 2. Die Azbel–Harper–Gleichung

Dieser Operator läßt sich durch den Hamiltonoperator eines Elektrons im Potential des Gitteratoms an einem Gitterplatz  $\vec{R}_{\vec{n}}$  darstellen. Der Einfluß aller anderen Kristallatome wird in einem Störterm  $V_{St}$  zusammengefaßt. Dieser berücksichtigt die Atompotentiale aller Atome an den restlichen Gitterplätzen  $\vec{R}_{\vec{m}}$ :

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{Atom} + V_{St} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{Atom}(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) + V_{St}(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}). \quad (2.2)$$

Der Potentialterm  $V_{St}$  muß gewährleisten, daß der Hamiltonoperator  $\mathbf{H}$  die volle Symmetrie des periodischen Gitters besitzt, was z.B. durch folgenden Ansatz erfüllt wird:

$$V_{St} = \sum_{\vec{m} \neq \vec{n}} V_{Atom}(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{m}}).$$

Die Eigenfunktionen von  $\mathbf{H}$  sind die sogenannten Bloch–Funktionen  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ . Diese lassen sich als Produkt einer ebenen Welle und einer periodischen Ortsfunktion ausdrücken:

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}+\vec{K}}(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}), \\ u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) &= u_{\vec{k}}(\vec{r}). \end{aligned}$$

Dabei stellt  $\vec{R}$  einen Gittervektor dar,  $\vec{K}$  einen Vektor des reziproken Gitters.

Die Blochwellen zeichnen sich insbesondere durch ihre Translationseigenschaften bezüglich der Gittervektoren  $\vec{K}$  und  $\vec{R}$  aus:

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}+\vec{K}}(\vec{r}) &= \psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \\ \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) &= \psi_{\vec{k}}(\vec{r}). \end{aligned}$$

Aufgrund ihrer Periodizität im reziproken Gitter lassen sie sich als Fourierreihe in den Gittervektoren entwickeln:

$$\psi_{i\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{\vec{n}}} W_i(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}). \quad (2.3)$$

Die  $W_i(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}})$  in (2.3) werden als Wannier–Funktionen bezeichnet, sie sind im Gegensatz zu Blochfunktionen jeweils um den Gitterplatz  $\vec{R}_{\vec{n}}$  lokalisiert. Aufgrund dieser Lokalisierung lassen sich die Wannier–Funktionen nach den Eigenfunktionen  $\phi_j(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}})$  des

Hamiltonoperators  $\mathbf{H}_{Atom}$  entwickeln:

$$W_i(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) = \sum_j \phi_j(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}).$$

Die Summe läuft dabei über alle Eigenzustände des Gitteratoms. Wegen dieser Entwicklung wird das Verfahren in der Literatur oft als LCAO (linear combination of atomic orbitals) bezeichnet.

Im einfachsten Fall geht man davon aus, daß sich das Elektron in einem  $s$ -Orbital befindet und aufgrund des geringen Überlapps einzig die  $s$ -Wellenfunktion von  $\mathbf{H}_{Atom}$  einen nennenswerten Beitrag zur Entwicklung der Wannier-Funktionen liefert<sup>1</sup>. Damit ergibt sich für die Wellenfunktion des gesamten Hamiltonoperators:

$$\Psi_{s\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{\vec{n}}} \phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}). \quad (2.4)$$

Die Genauigkeit dieser Näherung nimmt mit wachsender Gitterkonstante zu, da der Überlapp zwischen den Wannier-Funktionen an verschiedenen Gitterplätzen immer geringer wird.

Die Dispersionsrelation für das Elektron im Kristallgitter ist allgemein durch

$$E(\vec{k}) = \frac{\langle \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) | \mathbf{H} | \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \rangle}{\langle \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) | \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \rangle} \quad (2.5)$$

gegeben. Setzt man die Wellenfunktionen (2.4) in (2.5) ein und berücksichtigt zudem, daß im Nenner von Gleichung (2.5) wegen der starken Lokalisierung des Elektrons im  $s$ -Orbital nur die  $N$  Terme mit  $\vec{n} = \vec{m}$  merklich von Null verschiedene Werte annehmen, ergibt sich folgende Dispersionsrelation:

$$E(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{n}, \vec{m}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{\vec{n}} - \vec{R}_{\vec{m}})} \cdot \int \phi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{m}}) \left[ \mathbf{H}_{Atom}(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) + V_{St}(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) \right] \phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) d\vec{r}. \quad (2.6)$$

<sup>1</sup>Die Rechnung für  $p$  bzw.  $d$ -Orbitale kann analog durchgeführt werden (siehe z.B. [Ash]), wegen der höheren Entartung und der komplizierteren Symmetrie liefert sie aber wesentlich komplexere Resultate. Diese können z.T. mit den Ergebnissen für  $s$ -Orbitale genähert werden.

## 2. Die Azbel–Harper–Gleichung

Die Exponentialfaktoren  $e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{\vec{n}}-\vec{R}_{\vec{m}})}$  werden in den  $N$  Fällen  $\vec{n} = \vec{m}$  zu 1. Durch zusätzliches Aufspalten in die Integrale über  $\mathbf{H}_{Atom}$  und  $V_{St}$  zerfällt (2.6) in zwei Terme. Der erste gibt die Energie des Elektrons im  $s$ -Zustand eines einzelnen Atoms an:

$$E_s = \int \phi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) \mathbf{H}_{Atom}(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) \phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) d\vec{r}. \quad (2.7)$$

Der zweite Term beschreibt eine Absenkung ( $V_{St} < 0$ ) dieser Energie durch die Potentiale der restlichen Kristallatome:

$$A := \int \phi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) V_{St}(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) \phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) d\vec{r}. \quad (2.8)$$

Für alle  $\vec{n} \neq \vec{m}$  verschwindet der Beitrag von  $\mathbf{H}_{Atom}$  aufgrund des geringen Überlapps der Funktionen  $\phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}})$  zu verschiedenen Gitterpunkten. Übrig bleiben nur noch Terme der Form

$$B := \frac{1}{N} \sum_{\vec{n} \neq \vec{m}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}_{\vec{n}}-\vec{R}_{\vec{m}})} V, \quad (2.9)$$

mit

$$V := \int \phi_s^*(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{m}}) [V_{St}(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}})] \phi_s(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}}) d\vec{r}. \quad (2.10)$$

Wegen des geringen Überlapps der  $s$ -Orbitale genügt es, in (2.9) nur die nächsten Nachbarn zu berücksichtigen. Im einfach kubischen Gitter gilt damit für die Ortskoordinaten:

$$\vec{R}_{\vec{n}} - \vec{R}_{\vec{m}} \in \{(\pm a, 0, 0); (0, \pm a, 0); (0, 0, \pm a)\}.$$

Aufgrund der Periodizität des Potentials  $V_{St}$  und der Kugelsymmetrie der  $s$ -Wellenfunktion zerfällt die Summe (2.9) in sechs gleiche Integrale, multipliziert mit den jeweiligen Exponentialfunktionen, die zu  $\cos$ -Termen zusammengefaßt werden können:

$$E_s(\vec{k}) = E_s + A + 2V \cdot (\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)). \quad (2.11)$$

Jedes Energieniveau des Gitteratoms  $E_s$  wird also durch den Einfluß der anderen Atome im Gitter um  $|A|$  abgesenkt und zu einem Band der Breite  $2V$  aufgeweitet. Die zugehörigen Eigenzustände sind durch (2.4) gegeben.

Damit ist das Problem „ein Elektron im idealen einfach kubischen Kristall“ prinzipiell gelöst. In dieser Arbeit soll Störungsrechnung mit Hilfe der Greensfunktion an diesem

System durchgeführt werden. Deshalb ist es nötig, einen möglichst einfachen effektiven Hamiltonoperator  $\mathbf{H}^t$  aufzustellen.

Ein möglicher Weg, diesen Operator zu konstruieren wird in [Eco] aufgezeigt: Die Menge der Wannier-Funktionen  $W_i(\vec{r} - \vec{R}_{\vec{n}})$  ist abgeschlossen (siehe z.B. [Ki2]). Deshalb kann jeder Operator in der Basis der Wannier-Funktionen ausgedrückt werden. Reduziert man die Betrachtung auf einen Bandindex  $i_0$ , läßt sich ein effektiver Hamilton-Operator des Tight-Binding-Modells folgendermaßen angeben:

$$\mathbf{H}^t = \sum_{\vec{l}} |\vec{l}\rangle \varepsilon_{\vec{l}} \langle \vec{l}| + \sum_{\vec{l}, \vec{m}} |\vec{l}\rangle V_{\vec{l}, \vec{m}} \langle \vec{m}|. \quad (2.12)$$

Dabei ist  $\varepsilon_{\vec{n}}$  durch die Energie des  $i_0$ -ten Atomorbitals  $E_{i_0}$  (reduziert um  $A$  aus (2.8)) gegeben und  $V_{\vec{n}\vec{m}}$  entspricht dem Wert von  $V$ , wie in (2.10) definiert. Die Vektoren  $|\vec{m}\rangle$  entsprechen den Wannierfunktionen  $W_{i_0}(\vec{r}_{\vec{m}} - \vec{R}_{\vec{n}})$  am Gitterplatz  $\vec{m}$ . Die Summen laufen über alle Gitterplätze  $\vec{l}, \vec{m}$  im Kristall.

Die Matrixelemente des effektiven Hamiltonoperators  $\mathbf{H}^t$  ergeben sich so als

$$\langle \vec{n} | \mathbf{H}^t | \vec{m} \rangle = \varepsilon_{\vec{n}} \delta_{\vec{n}\vec{m}} + V_{\vec{n}\vec{m}}. \quad (2.13)$$

Im periodischen System gilt:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\vec{l}} &= \varepsilon_0 && \text{für alle Gitterpunkte } \vec{l} \\ V_{\vec{l}, \vec{m}} &= V_{\vec{l}-\vec{m}}. \end{aligned}$$

Wie oben wird die Wechselwirkung auf nächste Nachbarn reduziert, denn der Überlapp der Eigenzustände von  $\mathbf{H}_{Atom}$  ist sehr klein:

$$V_{\vec{l}, \vec{m}} = \begin{cases} V & \text{für } \vec{l}, \vec{m} \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.14)$$

Für die weiteren Betrachtungen wird  $V = 1$  gesetzt.

Ferner setzen wir o.B.d.A.

$$\varepsilon_0 = 0. \quad (2.15)$$

Die Menge der  $\{|\vec{l}\rangle\}$  ist ein Orthonormalsystem aufgrund der Eigenschaften der Wannier-

## 2. Die Azbel–Harper–Gleichung

Funktionen:

$$\langle \vec{l} | \vec{m} \rangle = \delta_{\vec{l}, \vec{m}}. \quad (2.16)$$

Mit den Vereinfachungen (2.14) und (2.15) können die Eigenwerte  $\varepsilon(\vec{k})$  und Eigenfunktionen  $|\vec{k}\rangle$  sofort berechnet werden:

$$\varepsilon_t(\vec{k}) = \sum_{\vec{l}} V_{0\vec{l}} e^{i\vec{k}\vec{l}} \quad (2.17)$$

$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{l}} e^{i\vec{k}\vec{l}} |\vec{l}\rangle \quad (2.18)$$

Dabei ist  $\vec{k}$  beschränkt auf die erste Brillouinzone: Für die  $i$ -te Komponente von  $\vec{k}$  gilt jeweils  $-\pi/a_i \leq k_i \leq \pi/a_i$ . Diese Lösung deckt sich mit den in (2.11) und (2.3) hergeleiteten Beziehungen.

## 2.2. Der Azbel–Harper–Hamiltonian

Ausgehend von dem im vorangehenden Abschnitt vorgestellten Tight–Binding–Modell soll nun ein Modell zur Beschreibung der Dynamik von Elektronen in einem Kristallgitter bei angelegtem homogenen Magnetfeld entwickelt werden. Die Herleitung dieses Azbel–Harper–Hofstadter–Modells wird im folgenden Abschnitt nur kurz skizziert, genauere Ausführungen finden sich z.B. in [Hof2].

Ausgangspunkt ist die Energiedispersion  $\varepsilon_t(\vec{k})$  des Leitungsbandes ohne angelegtes Magnetfeld (siehe (2.11) bzw. (2.17)). Die Peierls–Onsager–Hypothese [Pei] [Ons] gibt dann einen Weg vor, wie sich aus  $\varepsilon_t(\vec{k})$  ein effektiver Hamiltonian für Leitungselektronen in einem Magnetfeld mit dem Vektorpotential  $\vec{A}$  konstruieren lässt.

Die Dispersionsrelation des einfach kubischen Gitters (2.17) wird durch die Ersetzung

$$\vec{k} \longrightarrow \vec{\pi} := \frac{1}{\hbar} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \quad (2.19)$$

mit dem Impulsoperator  $\vec{p}$  zum effektiven Hamiltonoperator

$$\mathbf{H}^e(\vec{\pi}) := \varepsilon_t(\vec{\pi}). \quad (2.20)$$



$\mathbf{H}^e(\vec{\pi})$  wird in der Literatur häufig als Peierls–Onsager–Hamiltonian bezeichnet. Mit diesem einfachen Verfahren gelang Onsager die Interpretation der feldabhängigen oszillatorischen Effekte in vielen Festkörperexperimenten [Sc1]. Einen Ansatz zur theoretischen Begründung von Peierls ad–hoc Hypothese lieferte Kohn [Koh] im Jahre 1957: Er zeigt die Existenz eines allgemeinen effektiven Hamiltonoperators für Blochelektronen im Magnetfeld, der sich als Potenzreihe im Betrag des Magnetfeldes darstellen läßt. Die erste Komponente dieser Potenzreihe, der  $B^1$ –Term, entspricht exakt  $\mathbf{H}^e$  aus (2.20). Zumindest für  $B \rightarrow 0$  ist  $\mathbf{H}^e$  also gültig.

Einsetzen von (2.19) in (2.20) liefert für ein  $d$ –dimensionales System:

$$\mathbf{H}^e = V \sum_{j=1}^d \left( e^{\frac{ia}{\hbar}(p_j - \frac{e}{c}A_j)} + e^{-\frac{ia}{\hbar}(p_j - \frac{e}{c}A_j)} \right). \quad (2.21)$$

Dabei gilt

$$p_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$$

und deshalb

$$e^{\frac{ia}{\hbar}p_j}\psi(x_j) = e^{a\frac{\partial}{\partial x_j}}\psi(x_j) = \psi(x_j + a). \quad (2.22)$$

Denn  $e^{a\frac{\partial}{\partial x_j}}$  ist der Translationsoperator um eine Gitterkonstante  $a$ .

Nehmen wir an, das Magnetfeld stehe senkrecht zur  $x$ – $y$ –Ebene, dann wird es nur die Bewegung der Elektronen in dieser Ebene beeinflussen. Wir können unsere Untersuchungen also auf diese Ebene beschränken. Eine dreidimensionale Betrachtung des Problems wurde von Rupert Faltermeier in [Fal] durchgeführt. Es zeigt sich, daß diese Vereinfachung nur zulässig ist, wenn die Bewegung in  $z$ –Richtung auf einen Impulseigenwert  $k_z$  beschränkt wird, also „echt zweidimensional“ ist. Für die folgenden Betrachtungen sei dies angenommen.

Für das Vektorpotential  $\vec{A}$  verwenden wir die Landau–Eichung

$$\vec{A} = B \begin{pmatrix} 0 \\ x \\ 0 \end{pmatrix},$$

mit der magnetischen Flußdichte  $B$ . Eingesetzt in (2.21) ergibt sich der Hamilton–Opera-

## 2. Die Azbel–Harper–Gleichung

tor für das Modellsystem:

$$\begin{aligned}\mathbf{H}^e &= V \left( e^{\frac{ia}{\hbar} p_x} + e^{-\frac{ia}{\hbar} p_x} + e^{\frac{ia}{\hbar} (p_y - \frac{e}{c} Bx)} + e^{-\frac{ia}{\hbar} (p_y - \frac{e}{c} Bx)} \right) \\ &= V \left( e^{a \frac{\partial}{\partial x}} + e^{-a \frac{\partial}{\partial x}} + e^{a \frac{\partial}{\partial y} - \frac{ie}{\hbar c} Bxa} + e^{-a \frac{\partial}{\partial y} + \frac{ie}{\hbar c} Bxa} \right).\end{aligned}$$

Weil  $\frac{\partial}{\partial y}$  und  $x$  kommutieren, folgt daraus der Hamilton–Operator in seiner endgültigen Form:

$$\mathbf{H}^e = V \left( e^{a \frac{\partial}{\partial x}} + e^{-a \frac{\partial}{\partial x}} + e^{-\frac{ie}{\hbar c} Bxa} e^{a \frac{\partial}{\partial y}} + e^{\frac{ie}{\hbar c} Bxa} e^{-a \frac{\partial}{\partial y}} \right). \quad (2.23)$$

Für ein verschwindendes Magnetfeld entspricht  $\mathbf{H}^e$  formal dem Hamiltonoperator des zweidimensionalen Tight–Binding–Modells  $\mathbf{H}^t$  (2.12) für  $\varepsilon_0 = 0$ . Die beiden in dieser Arbeit verwendeten Ansätze sind daher konsistent.

Durch die Einbandnäherung wird der Hilbertraum beschränkt, deshalb kann  $\psi(x, y)$  lediglich an Stützstellen berechnet werden [Ob2].

$$\begin{aligned}x &= ma \\ y &= na \\ \psi(ma, na) &= z_{m,n}.\end{aligned}$$

Ferner definieren wir:

$$\begin{aligned}\varepsilon &:= \frac{E}{E_0} \\ \alpha &:= \frac{a^2 B}{2\pi \frac{\hbar c}{e}}.\end{aligned}$$

$\varepsilon$  ist die auf die Bandenergie normierte Energie, sie liegt wegen (2.17) im zweidimensionalen System zwischen  $-4$  und  $4$ ,  $\alpha$  entspricht dem Fluß des Magnetfeldes durch eine Elementarzelle.

Setzt man diese Definitionen in die Schrödingergleichung des Systems ,

$$\mathbf{H}^e \psi(x, y) = \varepsilon \psi(x, y),$$

ein und nützt (2.22) aus, so ergibt sich eine zweidimensionale Differenzgleichung für

die Werte der Eigenfunktionen von  $\mathbf{H}^e$  an den Gitterpunkten:

$$z_{m+1,n} + z_{m-1,n} + e^{-2\pi i m \alpha} z_{m,n+1} + e^{2\pi i m \alpha} z_{m,n-1} = \epsilon z_{m,n}. \quad (2.24)$$

Geht man analog zum Landau–Ansatz für freie Teilchen im Magnetfeld vor und setzt die Bewegung in  $y$ –Richtung als freie Bewegung an, so läßt sich diese aufgrund der speziellen Eichung des Vektorpotentials abseparieren. Die Wellenfunktion in  $y$ –Richtung wird dann zu einer ebene Welle. Die Werte der Wellenfunktion  $z_{m,n}$  an den Stützstellen  $(am, an)$  werden zu

$$z_{m,n} = e^{i v n} g_m \quad (2.25)$$

mit der Bloch–Phase  $v$ . Eingesetzt in (2.24) ergibt sich die Azbel–Harper–Gleichung:

$$g_{m+1} + g_{m-1} + 2 \cos(2\pi m \alpha - v) g_m = \epsilon g_m \quad (2.26)$$

Sie beschreibt die Zustände eines Elektrons in einem periodischen Potential, das von einem homogenen Magnetfeld, das parallel zu einer Kristallachse orientiert ist, überlagert wird. Zum ersten mal wurde sie von P.G. Harper im Jahre 1955 aufgestellt [Har]. Andere Herleitungen als die hier skizzierte, z.B. [Wa2],[Ob1] und [Ra1], führen zu ähnlichen Gleichungen, die sich im Wesentlichen durch die Definition von  $\alpha$  unterscheiden. Deshalb liegt die Vermutung nahe, daß Gleichung (2.26) von universeller Natur ist. Schellnhuber und Obermair zeigen in [Sc2], [Sc3] und [Sc4], daß eine Betrachtung des vollen Hamiltonians für Festkörperelektronen im Magnetfeld zumindest für sogenannte pure cases mit rationalem  $\alpha = \frac{1}{q}$ ,  $q \in \mathbb{N}$  auf eine Gleichung der Form (2.26) führt.

In der mathematischen Physik wird Gleichung (2.26) wegen ihrer Ähnlichkeit zur Mathieuschen Differentialgleichung

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2}(\xi) + (\epsilon - 2\gamma \cos(2\xi)) \psi(\xi) = 0$$

als almost–Mathieu–Gleichung bezeichnet. Die Azbel–Harper–Gleichung stellt eine diskretisierte Form dieser Gleichung mit angelegtem Magnetfeld dar.

Die numerische Lösung der Azbel–Harper–Gleichung gelang zum ersten mal D. R. Hofstadter in seiner Dissertation aus dem Jahre 1976 [Hof2], bzw. [Hof1] mit Hilfe der sogenannten Transfermatrizen. In dieser Arbeit soll jedoch ein anderes Lösungsverfahren,

## 2. Die Azbel–Harper–Gleichung

wie von Wannier, Obermair und Ray in [Wa1] vorgeschlagen, verwendet werden.

Die Azbel–Harper–Gleichung (2.26) ist invariant unter

$$\alpha \rightarrow \alpha + 1. \quad (2.27)$$

Das bedeutet, daß das gesamte Modellsystem periodisch in  $\alpha$  mit der Periode 1 ist. Deshalb genügt es, die weiteren Betrachtungen auf  $\alpha \in [0, 1]$  zu reduzieren.

Wählt man  $\alpha$  in (2.26) rational,

$$\alpha = \frac{p}{q}, \quad (2.28)$$

so gilt mit  $p \in \mathbb{Z}$ ,  $q \in \mathbb{Z}$  und  $p, q$  teilerfremd, wegen (2.27) zusätzlich  $p \leq q$ . Damit werden die Koeffizienten  $2 \cos(2\pi m\alpha - v)$  in (2.26) periodisch in  $m$  mit der Periode  $q$ . Auf Differenzen– und Differentialgleichungen mit periodischen Koeffizienten ist das Floquet–Theorem [Col] anwendbar, eine allgemeine Form des Bloch–Theorems. Es besagt, daß jede Differenzgleichung mit periodischen Koeffizienten mindestens eine Lösung der Form

$$g_{l+q} = e^{iq\mu} g_l \quad (2.29)$$

hat. Der Faktor  $q$  im Exponenten wurde hier aus Gründen der Symmetrie eingeführt, wie später ersichtlich wird. Der Exponent  $\mu$  wird im Folgenden gelegentlich als Floquet–Phase bezeichnet.

Mit (2.26) und (2.29) läßt sich der effektive Hamiltonoperator  $\mathbf{H}^e$  für Bloch–Elektronen im Magnetfeld als  $(q \times q)$ -Matrix über  $\mathbb{C}$  darstellen:

$$\mathbf{H}^a := \begin{pmatrix} c_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & e^{iq\mu} \\ 1 & c_2 & 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & 0 & & & \ddots & 0 \\ 0 & \vdots & & \ddots & \ddots & 1 \\ e^{-iq\mu} & 0 & \cdots & 0 & 1 & c_q \end{pmatrix}; \quad c_j := 2 \cos(2\pi j\alpha - v). \quad (2.30)$$

In dieser Form ist  $\mathbf{H}^a$  als Azbel–Harper–Hamiltonian bzw. almost–Mathieu–Operator bekannt.

Die zugehörige Schrödingergleichung lautet:

$$\mathbf{H}^a \vec{\Psi}_k = \varepsilon_k \vec{\Psi}_k. \quad (2.31)$$

Die Eigenvektoren  $\vec{\Psi}_k$  zum Eigenwert  $\varepsilon_k$  hängen von  $\mu$  und  $\nu$  ab, sie sind Elemente von  $\mathbb{C}^q$ . Die  $m$ -te Komponente von  $\vec{\Psi}_k$  ist durch  $g_m$  aus (2.26) gegeben:

$$\vec{\Psi}_k = \begin{pmatrix} g_1^k \\ g_2^k \\ \vdots \\ g_q^k \end{pmatrix}; \quad g_i^k = g_i |_{\varepsilon=\varepsilon_k}. \quad (2.32)$$

Die Schrödingergleichung wird gelöst durch

$$|\varepsilon - \mathbf{H}^a| = 0.$$

Diese Determinante läßt sich als Polynom in  $\varepsilon$  darstellen, das zusätzlich von  $\nu$  und  $\mu$  abhängt. Die  $\mu$ -Abhängigkeit des Polynoms ergibt sich aus der Entwicklung von  $|\varepsilon - \mathbf{H}^a|$  als  $2 \cos(q\mu)$  (siehe Abschnitt 3.2.2). Wannier, Obermair und Ray zeigen in [Wa1], daß das Problem in  $\mu$  und  $\nu$  symmetrisch ist, deshalb kann das charakteristische Polynom von  $\mathbf{H}^a$  in Abhängigkeit von der Energie  $\lambda$  dargestellt werden als

$$|\lambda - \mathbf{H}^a| = P(\lambda) - 2 \cos(q\mu) - 2 \cos(q\nu). \quad (2.33)$$

Wie hier wird auch im Folgenden  $\lambda$  allgemein als Energie betrachtet, die Eigenwerte des Systems werden mit  $\varepsilon$  bezeichnet.

$P(\lambda)$  ist ein normiertes Polynom vom Grad  $q$  in  $\lambda$ , das weder von  $\mu$  noch von  $\nu$  abhängt. Im Folgenden wird  $P(\lambda)$  als *Hofstadtersches Spurpolynom* bezeichnet. Wie ich in meiner Diplomarbeit [Chm] zeigen konnte, ist  $P(\lambda)$  zur Spur der von Hofstadter verwendeten Transfermatrizenabbildung bis auf ein Vorzeichen äquivalent. Als abgekürzte Schreibweise definieren wir

$$P(\lambda, \mu, \nu) = P(\lambda) - 2 \cos(q\mu) - 2 \cos(q\nu). \quad (2.34)$$

## 2. Die Azbel–Harper–Gleichung

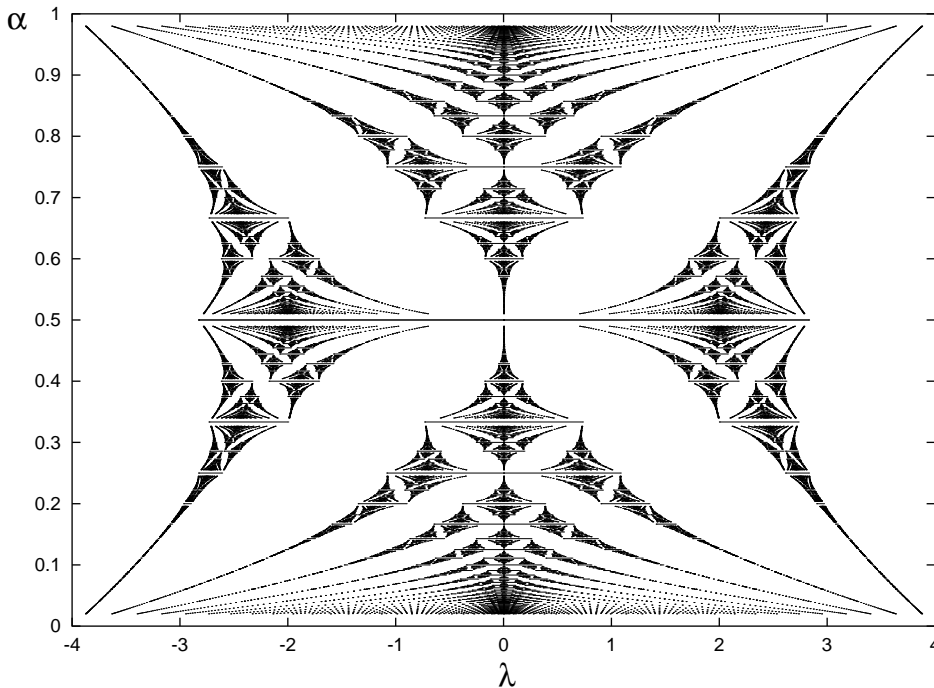


Abbildung 2.1.: Das Hofstadter–Spektrum, der sogenannte „Schmetterling“: Angetragen ist der magnetische Fluß pro Elementarzelle der Gitters  $\alpha$  gegen die Energie  $\lambda$ . Punkte im Bild entsprechen erlaubten Energien.

Die Eigenwerte  $\varepsilon$  von  $\mathbf{H}^a$  sind durch die Gleichung

$$P(\varepsilon) - 2 \cos(q\mu) - 2 \cos(q\nu) = 0 \quad (2.35)$$

bestimmt. Zu festen Werten von  $\mu$  und  $\nu$  ergibt die Lösung von (2.35) genau  $q$  verschiedene Eigenwerte [Hof2]. Für  $\mu, \nu \in [-\pi, \pi]$  hat  $\mathbf{H}^a$  immer dann einen Eigenwert, wenn gilt

$$P(\varepsilon) = 2 \cos(q\mu) + 2 \cos(q\nu) \leq 4. \quad (2.36)$$

Bei festem  $\mu, \nu$  besitzt  $\mathbf{H}^a$  ein Punktspektrum. Für beliebige  $\mu, \nu$  wird jeder dieser Punkte zu einem kontinuierlichen Bereich von Eigenwerten, einem sogenannten magnetischen Unterband aufgeweitet. Bei angelegtem Magnetfeld spaltet das Tight–Binding–Band in  $q$  disjunkte magnetische Unterbänder auf [Hof2]. Die  $2q$  Bandkanten ergeben sich aus (2.35) für  $\mu = 0, \nu = 0$  und  $\mu = \pi/q, \nu = \pi/q$  [Th1].

Mit der Bedingung (2.36) läßt sich das Spektrum des Azbel–Harper–Hamiltonians in Abhängigkeit von  $\alpha$  berechnen: der sogenannte *Hofstadter-Schmetterling*, wie in Abbildung

2.1 gezeigt. Diesem Bild kommt eine fast historische Bedeutung zu: Es war das erste fraktale Gebilde mit physikalischem Inhalt. Hofstadter untersuchte die geometrische Struktur des Spektrums in [Hof2]. Er wies unter anderem nach, daß das Spektrum selbstähnlich ist. Zahlreiche weitere Untersuchungen beschäftigen sich mit den Eigenschaften des Spektrums (z.B. [Cl3]). Die Rechnung wurde auf hexagonale [Cl2] und Dreiecksgitter übertragen [Be1] und gezeigt, daß das Spektrum für irrationale  $\alpha$  in eine Kantormenge übergeht (siehe z.B. [Rud]).

Eine besondere Eigenschaft des Azbel–Harper–Hofstadter–Spektrums liegt in seinen vielfältigen Symmetrien:

- Das Spektrum ist symmetrisch zu  $\lambda = 0$  [Hof2].
- Wie oben bereits erläutert ist es ebenfalls symmetrisch zu allen  $\alpha \in \mathbb{Z}$  [Hof2]. Deshalb reicht es aus, die Fälle  $\alpha = \frac{p}{q}$  mit  $1 \leq p \leq q$  zu untersuchen, um das gesamte Spektrum zu erfassen.
- Zusätzlich ist der Hofstadter–Schmetterling symmetrisch zu  $\alpha = \frac{p}{2}$ ,  $p \in \mathbb{Z}$ .

Die  $q$  magnetischen Unterbänder zu gegebenem  $\alpha$  sind durch  $q - 1$  Bandlücken getrennt, Ausnahmen von dieser Regel sind die Fälle von Unterbändern, die sich berühren, z.B. für gerade  $q$  bei  $\lambda = 0$ . Diese werden in der Literatur oft als „entartete Bänder“ oder „kissing Bands“ bezeichnet. Sie entstehen durch lokale Extrema von  $P(\lambda)$  mit  $|P(\lambda)| = 4$  an den Bandkanten. Das Spektrum zu  $\alpha = \frac{1}{2}$  besteht beispielsweise aus zwei entarteten Bändern, im Bild des Spektrums erscheinen sie jedoch als ein geschlossenes Band (siehe Abbildung 2.1).

Auffällig am Hofstadter–Spektrum ist, daß es sich nicht kontinuierlich mit  $\alpha$  ändert: Zwar überdecken die Unterbänder zu  $\alpha = \frac{1000}{3001}$  nahezu den gleichen Energiebereich wie die Bänder zu  $\alpha = \frac{1}{3}$ , das Spektrum ist aber in 3001 Unterbänder anstelle von 3 Unterbändern aufgespalten. Mit wachsendem  $q$  werden die Unterbänder (zumindest im Mittel) immer schmaler. Wie Thouless in [Th1], [Th2] und [Th3] zunächst numerisch und dann analytisch zeigen konnte, ist die Gesamtbreite aller Unterbänder proportional zu  $\frac{1}{q}$ . Die Unterbänder zu  $\alpha = \frac{1}{3}$  sind also etwa 1000 mal so breit wie die Unterbänder zu  $\alpha = \frac{1000}{3001}$ . Kontinuierlich mit  $\alpha$  ändert sich lediglich die Breite des von Bändern überdeckten Bereiches, nicht aber die Anzahl der Bänder. Die untere und obere Begrenzung des Spektrums und die Ränder der großen Bandlücken verlaufen stetig mit  $\alpha$  [Be2].

## 2. Die Azbel–Harper–Gleichung

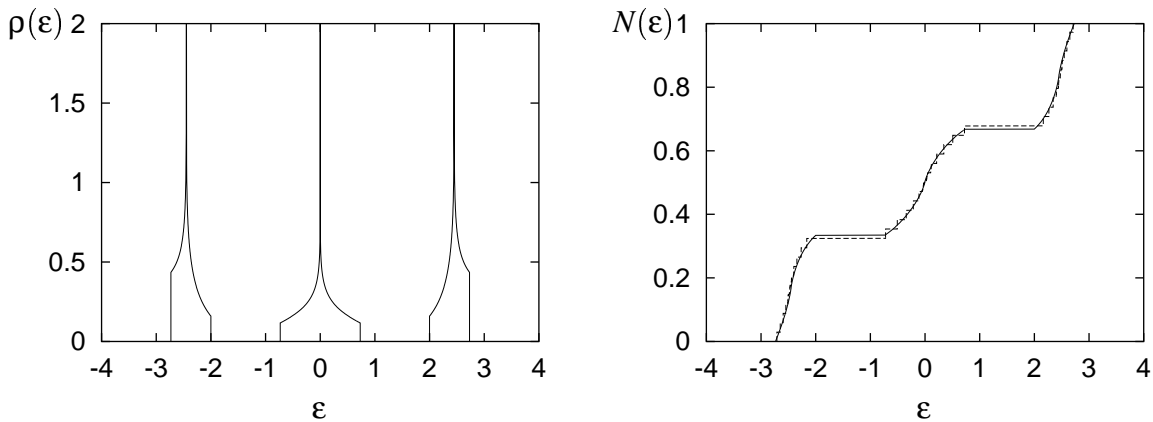


Abbildung 2.2.: Die Zustandsdichte  $\rho(\varepsilon)$  für  $\alpha = 1/3$  (links). Man sieht das Springen der Dichte auf einen endlichen Wert an den Rändern eines Unterbandes und die typische „Pagodenform“. Rechts ist die integrierte Zustandsdichte  $N(\varepsilon)$  für  $\alpha = \frac{1}{3}$  (durchgezogen) und  $\alpha = \frac{11}{34}$  (gestrichelt) dargestellt: Beide Kurven sind sich ähnlich, obwohl  $\rho(\varepsilon)$  zu  $\alpha = \frac{11}{34}$  insgesamt 34 Spitzen hat.

Wie in [Wa1] gezeigt wird, ist es für gegebenes  $\alpha$  möglich, die Mittelwerte physikalischer Größen, die nur von  $\varepsilon$  und den Quantenzahlen  $\mu$  und  $\nu$  abhängen, aus dem Polynom  $P(\varepsilon)$  zu berechnen. Zum Beispiel kann die Zustandsdichte  $\rho(\varepsilon)$  folgendermaßen dargestellt werden:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2 q} \left| \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right| K' \left( \frac{1}{4} |P(\varepsilon)| \right). \quad (2.37)$$

$K'$  ist dabei das komplementäre vollständige elliptische Integral (nach [Abr] bzw. [Byr]). Als Beispiel ist in Abbildung 2.2 (links) die Zustandsdichte für  $\alpha = 1/3$  gezeigt. Charakteristisch ist hierbei, daß die Dichte an den Rändern der Unterbänder auf einen endlichen Wert springt und im Inneren des Unterbandes unendlich wird. Wie die Bänder selbst verändert sich auch die Zustandsdichte  $\rho(\varepsilon)$  nicht kontinuierlich mit  $\alpha$ . Die integrierte Zustandsdichte

$$N(\varepsilon) = \int_{-4}^{\varepsilon} \rho(\varepsilon') d\varepsilon'$$

ändert sich dagegen kontinuierlich mit  $\alpha$  [Wa1]: Abbildung 2.2 (rechts) zeigt  $N(\varepsilon)$  für  $\alpha = \frac{1}{3}$  und  $\alpha = \frac{11}{34}$ . Wie man sieht, liegen die beiden Kurven sehr nah beisammen. Die integrierte Dichte zum Wert  $\alpha = \frac{11}{34}$  wäre von der zu  $\alpha = \frac{1}{3}$  in der Grafik schon nicht mehr zu unterscheiden.



Der Beiträge jedes magnetischen Unterbandes zu  $N(\varepsilon)$  sind identisch:

$$\int_{u_i}^{o_i} \rho(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{q}, \quad (2.38)$$

wobei  $u_i$  die Unterkante,  $o_i$  die Oberkante des jeweiligen Bandes angeben.

## 2. Die Azbel–Harper–Gleichung

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

In diesem Abschnitt wird die Greensfunktion zu den Hamiltonoperatoren  $\mathbf{H}^i$  und  $\mathbf{H}^a$ , wie sie im vorangehenden Kapitel hergeleitet wurden, berechnet. Die Greensfunktion oder auch Resolvente eines Operators enthält viele Informationen über das betreffende physikalische System, zusätzlich vereinfacht sie die Störungsrechnung an diesem System ganz erheblich. Diese Form der Störungsrechnung soll im weiteren Verlauf der Arbeit auf das Azbel–Harper–Modell angewendet werden.

Die Greensfunktion  $\mathbf{G}(\lambda)$ , oft auch als Resolvente bezeichnet, zu einem hermiteschen Operator  $\mathbf{H}$  ist für Werte von  $\lambda$ , die kein Eigenwert von  $\mathbf{H}$  sind, definiert durch

$$(\lambda - \mathbf{H}) \mathbf{G}(\lambda) = 1. \quad (3.1)$$

Sei  $|k\rangle$  ein vollständiger Satz von Eigenvektoren von  $\mathbf{H}$  und  $\varepsilon_k$  die zugehörigen Eigenwerte, so gilt für  $\lambda \neq \varepsilon_k$ :

$$\mathbf{G}(\lambda) = \sum_k \frac{|k\rangle \langle k|}{\lambda - \varepsilon_k}. \quad (3.2)$$

Für ein kontinuierliches Spektrum geht die Summe in ein Integral über [Eco].

Die Kenntnis der Greensfunktion eines Systems ermöglicht eine Reihe von Aussagen über das System: Die Pole der Resolventen entsprechen den isolierten Eigenwerten von  $\mathbf{H}$ . Das Residuum von  $\mathbf{G}$  für einen nicht entarteten Eigenwert  $\varepsilon_n$  erlaubt Aussagen über die zugehörige Wellenfunktion  $\psi_n(\vec{r})$  von  $\mathbf{H}$ :

$$\psi_n(\vec{r}) \psi_n^*(\vec{r}') = \text{Res}(\mathbf{G}(\varepsilon_n, \vec{r}, \vec{r}')). \quad (3.3)$$

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

Für entartete Eigenwerte ist der Grad der Entartung  $f_n$  von  $\varepsilon_n$  gegeben durch

$$f_n = \int \text{Res}(\varepsilon_n, \mathbf{G}(\vec{r}, \vec{r})) d^3 r. \quad (3.4)$$

Ist die Greensfunktion über einem ganzen Bereich von  $\lambda$  nicht definiert, so gehört dieser zum kontinuierlichen Spektrum von  $\mathbf{H}$ . Für diese Energien  $\varepsilon$  sind die Grenzwerte

$$\mathbf{G}^\pm(\varepsilon) = \lim_{s \rightarrow 0} \mathbf{G}(\varepsilon \pm is),$$

mit  $s > 0$  definiert. Der Imaginärteil von  $\mathbf{G}^\pm(\varepsilon)$  liefert die Zustandsdichte über dem Spektrum von  $\mathbf{H}$  [Eco]:

$$\rho(\varepsilon, \vec{r}) = \mp \frac{1}{\pi} \Im \mathbf{G}^\pm(\varepsilon, \vec{r}, \vec{r}). \quad (3.5)$$

In dem nun folgenden Abschnitt wird zunächst die Berechnung der Resolventen des Tight-Binding-Hamiltonians vorgeführt, das Vorgehen entspricht dabei im wesentlichen dem in [Eco] dargestellten. Daraufhin wird ein Ansatz zur Bestimmung der Greensfunktion für Elektronen im Quadratgitter bei angelegtem Magnetfeld vorgestellt. Die zur Azbel-Harper-Gleichung korrespondierende Resolvente wird berechnet und ausführlich diskutiert.

## 3.1. Die Greensfunktion des Tight-Binding-Modells

Die Greensfunktion für den Tight-Binding-Hamiltonian  $\mathbf{H}^t$  kann mit

$$\mathbf{G}^t(\lambda) = \sum_{\vec{k}} \frac{|\vec{k}\rangle \langle \vec{k}|}{\lambda - \varepsilon(\vec{k})}$$

bestimmt werden. Dabei sind  $\varepsilon(\vec{k})$  und  $|\vec{k}\rangle$  durch (2.17) bzw. (2.18) gegeben.

Ein Matrixelement von  $\mathbf{G}^t(\lambda)$  in einem  $d$ -dimensionalen System läßt sich mit

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{m}) &= \langle \vec{l} | \mathbf{G}^t(\lambda) | \vec{m} \rangle \\ &= \sum_{\vec{k}} \frac{\langle \vec{l} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \vec{m} \rangle}{\lambda - \varepsilon(\vec{k})} \end{aligned}$$

$$= \frac{\Omega_0}{(2\pi)^d} \int_{1.BZ} \frac{e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})}}{\lambda - \varepsilon(\vec{k})} d\vec{k} \quad (3.6)$$

berechnen, wobei  $\Omega_0$  das Volumen einer Elementarzelle repräsentiert. Das Integral ist auf die erste Brillouinzone beschränkt.

### 3.1.1. Quadratgitter

Wie in Abschnitt 2.2 dargestellt, ist das Modellsystem bei angelegtem Magnetfeld auf zwei Dimensionen reduziert. Um einen Vergleich mit dem Tight–Binding–Modell zu ermöglichen, muß die Greensfunktion des zweidimensionalen Tight–Binding–Modells bekannt sein. In diesem Abschnitt wird die Berechnung der Resolventen von  $\mathbf{H}^t$  analog zu [Eco] dargestellt.

Für ein Quadratgitter mit der Gitterkonstanten  $a$  ergeben sich nach (2.17) die Eigenwerte

$$\varepsilon(\vec{k}) = 2V (\cos(k_1 a) + \cos(k_2 a)). \quad (3.7)$$

Im Folgenden wird o.B.d.A.  $V = 1$  gesetzt. Die Matrixelemente der Greensfunktion werden damit zu:

$$\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{m}) = \frac{a^2}{4\pi^2} \int_{1.BZ} \frac{e^{i\vec{k}(\vec{l}-\vec{m})}}{\lambda - 2(\cos(k_1 a) + \cos(k_2 a))} d^2 k$$

mit

$$\vec{k}(\vec{l}-\vec{m}) = a(k_1(l_1 - m_1) + k_2(l_2 - m_2)),$$

$l_1, l_2, m_1, m_2 \in \mathbb{Z}$  sind die Indizes der Gitterplätze.

Nach der Substitution  $ak_i \rightarrow k'_i$  gilt:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{m}) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{i(k'_1(l_1 - m_1) + k'_2(l_2 - m_2))}}{\lambda - 2(\cos(k'_1) + \cos(k'_2))} dk'_1 dk'_2 \\ &= \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\cos(k'_1(l_1 - m_1)) \cos(k'_2(l_2 - m_2))}{\lambda - 2(\cos(k'_1) + \cos(k'_2))} dk'_1 dk'_2 \end{aligned}$$

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

Durch die Koordinatentransformation [Mor]

$$\begin{aligned}\vec{l}' &= \frac{1}{2}(\vec{l} + \vec{m}) \\ \vec{m}' &= \frac{1}{2}(\vec{l} - \vec{m})\end{aligned}$$

läßt sich zeigen, daß gilt:

$$\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{m}) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{\cos(k_1(l_1 - m_1 + l_2 - m_2)) \cos(k_2(l_1 - m_1 - l_2 + m_2))}{\lambda - 4 \cos(k_1) \cos(k_2)} dk_1 dk_2.$$

Die Diagonalelemente von  $\mathbf{G}^t$  ergeben sich damit als [Mor]

$$\begin{aligned}\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{\lambda - 4 \cos(k_1) \cos(k_2)} dk_1 dk_2 \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{\sqrt{\lambda^2 - (4)^2 \cos^2(k_1)}} dk_1 \\ &= \frac{1}{\pi\lambda} \int_0^\pi \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{4}{\lambda}\right)^2 \cos^2(k)}} dk.\end{aligned}$$

Dieses Integral wird gelöst durch

$$\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = \frac{2}{\pi\lambda} \mathbf{K} \left( \frac{4}{\lambda} \right). \quad (3.8)$$

Dabei ist  $\mathbf{K}$  das vollständige elliptische Integral erster Art [Byr].

Eine elementweise Betrachtung der Gleichung  $(\lambda - \mathbf{H}^t) \mathbf{G}^t = 1$  liefert Rekursionen für die Matrixelemente  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{m})$  ausgehend von den Elementen von  $\mathbf{G}^t$ , für die gilt  $l_1 - m_1 = l_2 - m_2$ . Diese können durch Rekursion aus den Elementen  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  und  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{m})$  mit  $l_1 - m_1 = l_2 - m_2 = 1$ , oft als  $\mathbf{G}^t(\lambda, 1)$  bezeichnet, bestimmt werden [Mor]:

$$\begin{aligned}\mathbf{G}^t(\lambda, 1) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\cos(2k_1)}{\sqrt{\lambda^2 - (4)^2 \cos^2(k_1)}} dk_1 \\ &= \frac{2}{\pi\lambda} \left( \left( \frac{2\lambda^2}{(4)^2} - 1 \right) \mathbf{K} \left( \frac{4}{\lambda} \right) - \frac{2\lambda^2}{(4)^2} \mathbf{E} \left( \frac{4}{\lambda} \right) \right) \quad (3.9)\end{aligned}$$

Wobei  $E$  das vollständige elliptische Integral zweiter Art ist.

Die Elemente der Greensfunktion  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{m})$  mit  $\vec{m} = \vec{l} + (1, 0)$ , also einen Gitterplatz neben  $\vec{l}$  ergeben sich als

$$\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{m}) = \frac{1}{4} \left( \lambda \mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) - 1 \right). \quad (3.10)$$

Aus (3.8) lassen sich mit der analytischen Fortsetzung des elliptischen Integrales über der komplexen Ebene

$$\mathbf{K}\left(\frac{1}{k}\right) = k \left( \mathbf{K}(k) + i\mathbf{K}(k') \right),$$

bzw.

$$\mathbf{E}\left(\frac{1}{k}\right) = \frac{1}{k} \left\{ \mathbf{E}(k) - i\mathbf{E}(k') - k'^2 \mathbf{K}(k) + ik^2 \mathbf{K}(k') \right\},$$

mit

$$k' = \sqrt{1 - k^2}$$

und

$$\frac{1}{k} = \frac{4}{\lambda - i\delta} = \frac{4}{\lambda} + i\delta$$

die Elemente der Greensfunktion  $\mathbf{G}^{t\pm}$  über dem Spektrum von  $\mathbf{H}^t$  berechnen. Die Diagonalelemente sind damit gegeben durch:

$$\Re \mathbf{G}^{t\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) = -\frac{1}{2\pi} \mathbf{K}\left(\frac{\varepsilon}{4V}\right), \quad -4 < \varepsilon < 0 \quad (3.11)$$

$$\Re \mathbf{G}^{t\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) = \frac{1}{2\pi} \mathbf{K}\left(\frac{\varepsilon}{4}\right), \quad 0 < \varepsilon < 4 \quad (3.12)$$

$$\Im \mathbf{G}^{t\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) = \mp \frac{1}{2\pi} \mathbf{K}\left(\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{4}\right)^2}\right), \quad |\varepsilon| < 4. \quad (3.13)$$

Real- und Imaginärteil von  $\mathbf{G}^t$  sind in Abbildung 3.1 angetragen.

Aus (3.13) läßt sich die Zustandsdichte berechnen. Es gilt für  $|\varepsilon| < 4$ :

$$\rho(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \Im \mathbf{G}^{t+}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) = \frac{1}{2\pi^2} \mathbf{K}\left(\sqrt{1 - \left(\frac{\varepsilon}{4}\right)^2}\right) = \frac{1}{2\pi^2} \mathbf{K}'\left(\frac{\varepsilon}{4}\right) \quad (3.14)$$

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

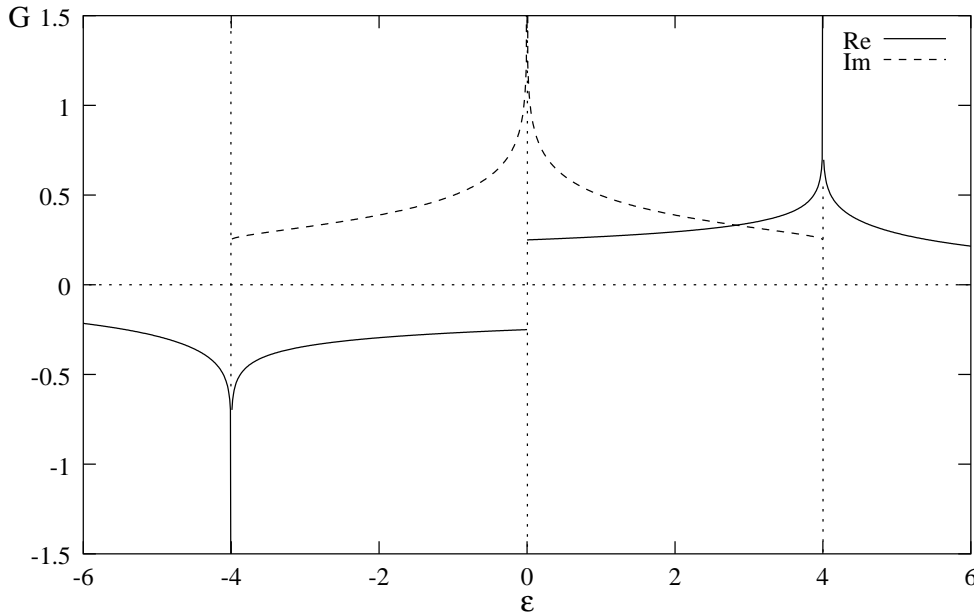


Abbildung 3.1.: Real- und Imaginärteil ( $\Im \mathbf{G}^{\pm}$ ) der Diagonalelemente der Greensfunktion zum zweidimensionalen Tight-Binding-Hamiltonian,  $V = 1.0$ .

Dabei ist  $K'$ , das komplementäre vollständige elliptische Integral erster Art, definiert als

$$K'(k) = K(k').$$

In Abbildung 3.2 wird die Zustandsdichte des zweidimensionalen Tight-Binding-Modells dargestellt.

Die Diagonalelemente der Greensfunktion (siehe Abbildung 3.1) zeigen die für ein zweidimensionales System charakteristischen Unstetigkeiten des Imaginärteils an den Bandkanten. Analog verhalten sich z.B. die Diagonalelemente der Greensfunktion für Dreiecksgitter und hexagonale Gitter in zwei Dimensionen [Hor]. Die Resolvente von  $\mathbf{H}^t$  lässt sich nach [Eco] auch direkt über die Zustandsdichte  $\rho(\varepsilon)$  berechnen, es gilt

$$\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\varepsilon)}{\lambda - \varepsilon} d\varepsilon. \quad (3.15)$$

Für endliche Werte von  $\rho(\varepsilon)$  an den Bandkanten führt dies zu einer logarithmischen Singularität des Realteils der Resolventen.



### 3.1. Die Greensfunktion des Tight–Binding–Modells

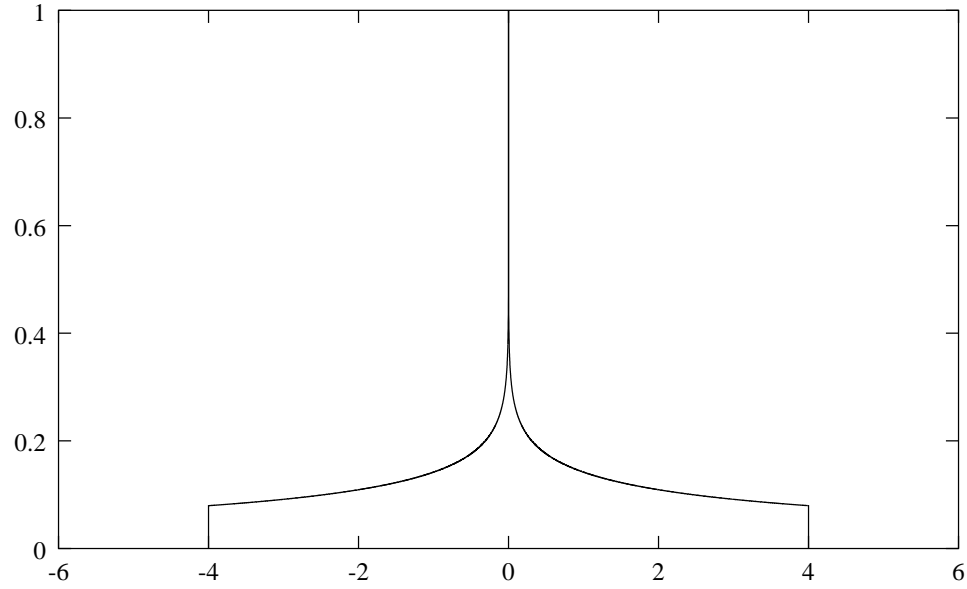


Abbildung 3.2.: Die Zustandsdichte des zweidimensionalen Tight–Binding–Modells ( $V = 1$ ) nach Gleichung (3.14). Angetragen ist die Zustandsdichte gegen die Energie.

Innerhalb der Bänder zeigt der Imaginärteil der Greensfunktion, und damit auch die Zustandsdichte, eine typische Van–Hove–Singulartät. Der Realteil wird an dieser Stelle unstetig. Die Singularitäten von  $\mathbf{G}^t$  innerhalb des Bandes werden durch die Sattelpunkte der Dispersionsrelation (3.7) verursacht [Van] [Ros].

Von zusätzlicher Bedeutung für die weiteren Betrachtungen sind die analytischen Eigenschaften der Diagonalelemente der Greensfunktion außerhalb des Bandes, wie sie durch (3.8) gegeben sind:

$$\begin{aligned} \lambda < 0 &\iff \mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) < 0, \\ \lambda > 0 &\iff \mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) > 0, \end{aligned} \tag{3.16}$$

$$\mathbf{G}^t(-\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = -\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}), \tag{3.17}$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \pm 4 \pm 0} \mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = \pm \infty \tag{3.18}$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \pm \infty} \mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = 0. \tag{3.19}$$

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

Über dem Band gilt entsprechend:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \pm 4} \Re \mathbf{G}^{\pm}(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = \pm \infty, \quad (3.20)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \pm 0} \Re \mathbf{G}^{\pm}(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = \pm \frac{1}{4}, \quad (3.21)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \pm 4} \Im \mathbf{G}^{+}(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = \frac{1}{4}, \quad (3.22)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \pm 0} \Im \mathbf{G}^{+}(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = \infty. \quad (3.23)$$

Bewiesen werden (3.16) bis (3.23) durch die Eigenschaften des elliptischen Integrales erster Art ([Abr] [Byr]). Zusätzlich ist  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  außerhalb des Spektrums vom  $\mathbf{H}^t$  streng monoton fallend:

$$\frac{d}{d\lambda} \mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) < 0 \quad (3.24)$$

denn

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) &= \langle \vec{l} | (\lambda - \mathbf{H}^t)^{-1} | \vec{l} \rangle \\ \frac{d}{d\lambda} \mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) &= \frac{d}{d\lambda} \langle \vec{l} | (\lambda - \mathbf{H}^t)^{-1} | \vec{l} \rangle \\ &= -\langle \vec{l} | (\lambda - \mathbf{H}^t)^{-2} | \vec{l} \rangle < 0. \end{aligned}$$

#### 3.1.2. Einfach kubisches Gitter

Zum Vergleich mit dem zweidimensionalen Modell sei hier kurz die Berechnung der Greensfunktion für den dreidimensionalen Tight-Binding-Hamiltonian erwähnt. Weitere Erläuterungen finden sich in [Eco].

Die Greensfunktion für ein einfach kubisches Gitter mit der Gitterkonstanten  $a$  erhält man durch Einsetzen von (2.17) in (3.6). Nach Substitution  $ak_i \rightarrow k_i$  ergibt sich:

$$\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{m}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos((l_1 - m_1)k_1 + (l_2 - m_2)k_2 + (l_3 - m_3)k_3)}{\lambda - 2(\cos(k_1) + \cos(k_2) + \cos(k_3))} dk_1 dk_2 dk_3.$$

Für die Diagonalelemente wird der Zähler von  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  zu 1. Die Integration über  $k_2$

### 3.2. Die Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian

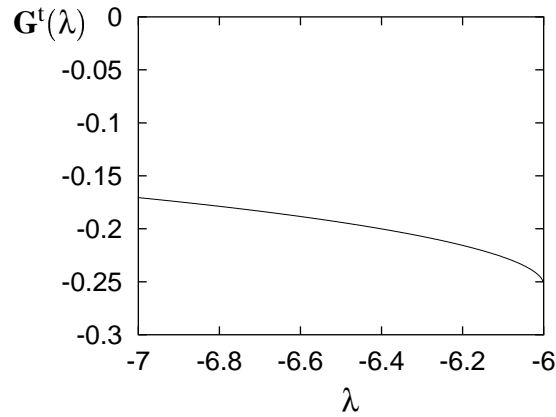


Abbildung 3.3.: Die Greensfunktion für das dreidimensionale Tight–Binding–Modell ( $V = 1$ ): Dargestellt ist  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  unterhalb der Bandkante bei  $\lambda = -6$ . An der Bandkante hat  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  einen endlichen Wert ( $\approx 0.25$ )

und  $k_3$  kann dann wie im zweidimensionalen Fall sofort ausgeführt werden:

$$\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \frac{4}{\lambda - 2\cos(k_1)} \mathbf{K} \left( \frac{4}{\lambda - 2\cos(k_1)} \right) dk_1.$$

Dieses sogenannte *Watson–Integral* muß numerisch berechnet werden. Charakteristisch für dreidimensionale Systeme ist dabei, daß  $\mathbf{G}^t$  an den Bandkanten einen endlichen Wert annimmt, denn das Watson–Integral divergiert nicht. Daraus ergibt sich mit (3.15), daß die Zustandsdichte an den Bandkanten gleich 0 ist.

## 3.2. Die Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian

In diesem Abschnitt soll die Greensfunktion für Elektronen im Quadratgitter bei angelegtem Magnetfeld untersucht werden. Dabei werden zwei Ansätze verfolgt: Zunächst wird die Resolvente des Peierls–Onsager–Hamiltonians  $\mathbf{H}^e$  berechnet. Sie ist über dem ganzen Gitter definiert. Im Anschluß wird die Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian  $\mathbf{H}^a$  aufgestellt. Sie ist wegen des Landau–Ansatzes (2.25) und der Verwendung des Floquet–Theorems (2.29) auf eine Kristallachse und eine magnetische Brillouinzone beschränkt. In einem Vergleich beider Ansätze wird gezeigt, daß sie über dem Definitionsbereich von  $\mathbf{H}^a$  identische Ergebnisse liefern.

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

Im Anschluß wird die Berechnung von  $\mathbf{G}^a$ , der Resolventen von  $\mathbf{H}^a$  soweit als möglich analytisch und dann numerisch durchgeführt. Die Ergebnisse werden jeweils eingehend diskutiert.

#### 3.2.1. Die Greensfunktion für den gesamten Kristall

Um die Greensfunktion für Blochelektronen im Magnetfeld aufzustellen, gehen wir zunächst von Gleichung (2.24) aus. Der betrachtete Kristall sei ideal kubisch und bestehe in  $x$ - und  $y$ -Richtung aus jeweils  $N$  Atomen. Dementsprechend hat der zu (2.24) gehörige Hamilton-Operator  $\mathbf{H}^e_N$   $N^2$  Eigenwerte  $\varepsilon_{k,l}$  mit  $k, l = 1, \dots, N$  und Eigenfunktionen  $\frac{1}{N} \underline{z}^{k,l}$ . Dabei entspricht  $\underline{z}^{k,l}$  den Lösungen von (2.24), diese müssen auf die Größe des Kristalls normiert werden, sonst würde die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Kristallelektronen für sehr große Kristalle divergieren<sup>1</sup>.

Das Element der Greensfunktion zu den Gitterplätzen  $\vec{a} = (m, n)$  und  $\vec{a}' = (m', n')$  wird mit (3.1) berechnet:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^e_N(\lambda, \vec{a}, \vec{a}') &= (\lambda - \mathbf{H}^e_N)^{-1} \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{z_{m,n}^{k,l} z_{m',n'}^{k,l}}{\lambda - \varepsilon_{k,l}}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Um die Berechnung zu vereinfachen werden die  $z_{m,n}^{k,l}$  auf die Lösungen der Azbel-Harper-Gleichung (2.26) zurückgeführt. Wegen (2.25) gilt:

$$z_{m,n}^{k,l} = e^{iv(k)n} g_m^l.$$

In einem endlichen Kristall mit  $N$  Atomen in  $y$ -Richtung nimmt  $v$  nur die diskreten Werte

$$v = \frac{2\pi}{N} k \quad \text{mit} \quad k = 1, \dots, N \quad (3.26)$$

an. Deshalb gilt in diesem Fall

$$z_{m,n}^{k,l} = e^{i\frac{2\pi}{N}kn} g_m^l. \quad (3.27)$$

---

<sup>1</sup>Diese Normierung entspricht der Vorgehensweise bei der Behandlung eines Teilchens im Kasten.

Einsetzen der Bedingungen (3.26) und (3.27) in (3.25) führt zu folgender Gleichung:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^e_N(\lambda, \vec{a}, \vec{a}') &= \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \frac{e^{i\frac{2\pi}{N}kn} g_m^l e^{-i\frac{2\pi}{N}kn'} \bar{g}_{m'}^l}{\lambda - \varepsilon_{k,l}} \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^N e^{i\frac{2\pi}{N}k(n-n')} \sum_{l=1}^N \frac{g_m^l \bar{g}_{m'}^l}{\lambda - \varepsilon_{k,l}}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Wegen (2.29) gilt:

$$g_m^l = e^{iq(m \operatorname{div} q)\mu(l)} g_{m \bmod q}^{l \bmod q}.$$

Der Operator  $\operatorname{div}$  bezeichnet hier die Division ganzer Zahlen ohne Rest, das Ergebnis von  $m \operatorname{div} q$  ist also der ganzzahlige Anteil von  $\frac{m}{q}$ ,  $\bmod$  ist der Modulo–Operator, das Ergebnis ist Rest einer Division ganzer Zahlen. Der Kristall ist endlich, deshalb nimmt  $\mu$  nur die diskreten Werte

$$\mu = \frac{2\pi}{N}d \quad \text{mit} \quad d = 1, \dots, \frac{N}{q}$$

an. Die Summe über alle  $l$  in (3.28) läßt sich damit durch zwei Summen, eine über die  $d$  magnetischen Brillouinzone und eine über die  $q$  verschiedenen Eigenwerte in jeder magnetischen Brillouinzone ausdrücken:

$$\mathbf{G}^e_N(\lambda, \vec{a}, \vec{a}') = \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^N e^{i\frac{2\pi}{N}k(n-n')} \sum_{l=1}^{\frac{N}{q}} e^{iq((m-m') \operatorname{div} q)\frac{2\pi}{N}l} \sum_{j=1}^q \frac{g_{m \bmod q}^j \bar{g}_{m' \bmod q}^j}{\lambda - \varepsilon_{k,l,j}}.$$

Im Grenzfall ( $N \rightarrow \infty$ ) — dieser kommt den realen Bedingungen sehr nahe — gehen die Summen in Integrale über:

$$\mathbf{G}^e(\lambda, \vec{a}, \vec{a}') = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(v(n-n') + q\mu((m-m') \operatorname{div} q))} \sum_{j=1}^q \frac{g_{m_q}^j(\mu, v) \bar{g}_{m'_q}^j(\mu, v)}{\lambda - \varepsilon_j(\mu, v)} dv d\mu \quad (3.29)$$

mit  $m_q = m \bmod q$ .

### 3.2.2. Die Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian

Bei der Herleitung des Azbel–Harper–Hamiltonians wurden einige Vereinfachungen gemacht: Mit Hilfe der Bloch–Phase  $v$  und der Floquet–Phase  $\mu$  wurde der Hamilton–Operator mit Rang  $\infty$  über dem zweidimensionalen Gitter auf einen eindimensionalen

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

Operator vom Rang  $q$  reduziert. Wie wirken sich diese Vereinfachungen auf die Greensfunktion aus?

Die Greensfunktion  $\mathbf{G}^a(\lambda)$  zu  $\mathbf{H}^a$  ist für festes  $\mathbf{v}_0$  und  $\mu_0$ :

$$\mathbf{G}^a(\lambda, \mu_0, \mathbf{v}_0) = \sum_{k=1}^q \frac{\vec{\Psi}_k(\mu_0, \mathbf{v}_0) \vec{\Psi}_k^+(\mu_0, \mathbf{v}_0)}{\lambda - \varepsilon_k(\mu_0, \mathbf{v}_0)}. \quad (3.30)$$

Dabei hängen  $\Psi_k$  und  $\varepsilon_k$  von  $\mathbf{v}$  und  $\mu$  ab. Die Werte von  $\mathbf{v}$  und  $\mu$  liegen für einen „unendlich ausgedehnten“ Kristall kontinuierlich im Intervall  $[-\pi, \pi]$ . Analog zum Vorgehen in Abschnitt 3.2.1 ist deshalb über alle möglichen Werte von  $\mu$  und  $\mathbf{v}$  zu integrieren:

$$\mathbf{G}^a(\lambda) = \frac{1}{4\pi^2} \sum_{k=1}^q \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\vec{\Psi}_k(\mu, \mathbf{v}) \vec{\Psi}_k^+(\mu, \mathbf{v})}{\lambda - \varepsilon_k(\mu, \mathbf{v})} d\mu d\mathbf{v}. \quad (3.31)$$

Ein Element der Greensfunktion kann damit durch

$$\mathbf{G}^a(\lambda, m, n) = \frac{1}{4\pi^2} \sum_{k=1}^q \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{g_m^k(\mu, \mathbf{v}) \bar{g}_n^k(\mu, \mathbf{v})}{\lambda - \varepsilon_k(\mu, \mathbf{v})} d\mu d\mathbf{v} \quad (3.32)$$

berechnet werden.

Ein Vergleich mit der Greensfunktion für den gesamten Kristall  $\mathbf{G}^e$  (3.29) zeigt, daß die beiden Operatoren zumindest dann gleich sind, wenn die beiden Gitterpunkte  $\vec{a}$  und  $\vec{a}'$  auf der selben Kristallachse in  $x$ -Richtung ( $n - n' = 0$ ) und in der selben magnetischen Brillouinzone ( $(m - m') \operatorname{div} q = 0$ ) liegen. Insbesondere sind die Diagonalelemente gleich:

$$\mathbf{G}^e(\lambda, \vec{a}, \vec{a}) = \mathbf{G}^a(\lambda, m, m). \quad (3.33)$$

Wie beschrieben, wird  $\mathbf{H}^a$  durch eine  $(q \times q)$ -Matrix über  $\mathbb{C}$  dargestellt, ebenso  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$ . Deshalb kann die Greensfunktion  $\mathbf{G}^a$  zu  $\mathbf{H}^a$  auch direkt durch (3.1) bestimmt werden:

$$\mathbf{G}^a(\lambda) = (\lambda - \mathbf{H}^a)^{-1}.$$

Mit (3.30) werden die Elemente der Inversen von  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$  berechnet. Die Elemente der Inversen können auch mit der Cramerschen Regel berechnet werden. Für festes  $\mathbf{v}_0$  und  $\mu_0$  ergibt sich:

$$\mathbf{G}^a(\lambda, m, n, \mu_0, \nu_0) = \frac{A_{m,n}}{|(\lambda - \mathbf{H}^a)|} \quad (3.34)$$

$$= \frac{A_{m,n}}{P(\lambda, \mu_0, \nu_0)} \quad (3.35)$$

dabei ist  $A_{m,n}$  die klassische Adjunkte zu  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$ , also die Determinante der Matrix, die aus  $(\lambda - \mathbf{H})$  durch Streichen der  $m$ -ten Zeile und der  $n$ -ten Spalte entsteht, multipliziert mit  $(-1)^{l+m}$ .

Der Vergleich von (3.30) und (3.35) ergibt:

$$\sum_{k=1}^q \frac{g_l^k \bar{g}_m^k}{\lambda - \varepsilon_k} = \frac{A_{l,m}}{P(\lambda, \mu, \nu)}, \quad (3.36)$$

$$\frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{k=1}^q \frac{g_l^k \bar{g}_m^k}{\lambda - \varepsilon_k} d\mu d\nu = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{A_{l,m}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu.$$

Für einen „unendlich großen“ Kristall hat  $\mathbf{G}^a$  demnach die Form

$$\mathbf{G}^a(\lambda, m, n) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{A_{m,n}}{|(\lambda - \mathbf{H}^a)|} d\nu d\mu. \quad (3.37)$$

### Eigenschaften von $\mathbf{G}^a$

Zur genaueren Bestimmung der Struktur von  $\mathbf{G}^a$  werden zunächst einige Eigenschaften dieser speziellen Greensfunktion untersucht. Diese werden es ermöglichen, die Diagonalelemente und die Elemente der ersten Nebendiagonalen analytisch zu berechnen.

Die Elemente der Resolventen  $\mathbf{G}^a$  können entweder mit Hilfe der Eigenvektoren von  $\mathbf{H}^a$  (3.32) oder mit Hilfe der Adjunkten  $A_{i,j}$  (3.37) berechnet werden. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird vor allem die Berechnung über die Adjunkten von besonderer Bedeutung sein. Für sie gelten folgende Eigenschaften:

Sei  $\mathbf{M} = (\lambda - \mathbf{H}^a)$ , die Elemente von  $\mathbf{M}$  seien  $a_{i,j}$ , dann gilt

$$\frac{d|\mathbf{M}|}{da_{i,j}} = \frac{d}{da_{i,j}} \sum_{i=1}^q a_{i,j} A_{i,j} = A_{i,j} \quad (3.38)$$

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

und analog:

$$\frac{d|\mathbf{M}|}{dc_i} = -A_{i,i}, \quad (3.39)$$

mit den  $c_i = 2 \cos(2\pi i\alpha - \nu)$  wie in (2.30) definiert. Zusätzlich gilt:

$$\begin{aligned} \frac{d|\mathbf{M}|}{d\lambda} &= \sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^q \frac{d|\mathbf{M}|}{da_{i,j}} \frac{da_{i,j}}{d\lambda} \\ &= \sum_{i=1}^q \frac{d|\mathbf{M}|}{da_{i,i}} \frac{da_{i,i}}{d\lambda} \\ &= \sum_{i=1}^q A_{i,i}, \\ \frac{d|\mathbf{M}|}{d\lambda} &= \frac{dP(\lambda)}{d\lambda} = \sum_{i=1}^q A_{i,i}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Von hier an wird in diesem Abschnitt der einfacheren Darstellung halber  $\mathbf{G} = \mathbf{G}^a$  gesetzt. Zudem wird  $(\mathbf{H}^a - \lambda)$  anstelle von  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$  betrachtet, einfach um weniger Vorzeichen in den Matrizen schreiben zu müssen. Für die Determinanten gilt dann

$$|\lambda - \mathbf{H}^a| = (-1)^q |\mathbf{H}^a - \lambda|. \quad (3.41)$$

Die Adjunkten sind entsprechend mit  $(-1)^{q-1}$  zu multiplizieren.

Die Matrix  $(\mathbf{H}^a - \lambda)$  ist für  $\lambda \in \mathbb{R}$  hermitesch. Die Hermiteschen Matrizen mit nicht verschwindender Determinante bilden eine Gruppe bezüglich der Multiplikation. Die Determinante von  $(\mathbf{H}^a - \lambda)$  verschwindet nicht, wenn  $\lambda$  kein Eigenwert von  $\mathbf{H}^a$  ist. Also muß auch die Inverse von  $(\mathbf{H}^a - \lambda)$  hermitesch sein. Insbesondere ist

$$\mathbf{G}(\lambda) = \bar{\mathbf{G}}^T(\lambda). \quad (3.42)$$

Im Folgenden soll gezeigt werden, daß die Elemente jeder Diagonalen (Hauptdiagonale und alle Nebendiagonalen) der Greensfunktion  $\mathbf{G}$  zu  $\mathbf{H}^a$  jeweils gleich sind. Dazu ist zunächst zu untersuchen, wie sich ein zyklisches Vertauschen der  $c_i$  in  $\mathbf{H}^a$  auf die Determinante von  $(\mathbf{H}^a - \lambda)$  und auf die Adjunkten  $A_{i,j}$  auswirkt.

Diese Untersuchung wird hier für die Determinante und für die  $(\mathbf{H}^a - \lambda)$  explizit durchgeführt. Die Betrachtung der Adjunkten verläuft prinzipiell ähnlich, sie ist im Anhang A dargestellt.



### 3.2. Die Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian

Sei  $v' = v - 2\pi\alpha$ . Dann ist für  $i = 2, \dots, q-1$

$$\begin{aligned}
 c'_i &:= c_i(v') \\
 &= 2\cos(2\pi\alpha i - v') \\
 &= 2\cos(2\pi\alpha i - v + 2\pi\alpha) \\
 &= 2\cos(2\pi\alpha(i+1) - v) \\
 &= c_{i+1}, \\
 c'_1 &= c_q.
 \end{aligned}$$

Die Substitution  $v' = v - 2\pi\alpha$  entspricht also einem zyklischen Vertauschen der  $c_i$ .

Zur besseren Übersicht definieren wir ferner

$$\begin{aligned}
 e &:= e^{iq\mu} \\
 b_i &:= c_i - \lambda \\
 b'_i &:= c'_i - \lambda = c_{i+1} - \lambda = b_{i+1}
 \end{aligned}$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} c_1 & 1 & 0 & \cdots & e \\ 1 & c_2 & \ddots & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & & & 1 & c_{q-1} & 1 \\ \bar{e} & 0 & \cdots & 0 & 1 & c_q \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}' := \mathbf{H}(v') = \begin{pmatrix} c'_1 & 1 & 0 & \cdots & e \\ 1 & c'_2 & \ddots & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & & & 1 & c'_{q-1} & 1 \\ \bar{e} & 0 & \cdots & 0 & 1 & c'_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_2 & 1 & 0 & \cdots & e \\ 1 & c_3 & \ddots & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & & & 1 & c_q & 1 \\ \bar{e} & 0 & \cdots & 0 & 1 & c_1 \end{pmatrix}$$

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

Behauptung:

$$|\mathbf{H} - \lambda| = |\mathbf{H}' - \lambda| \quad (3.43)$$

Beweis:

$(\mathbf{H} - \lambda)$  und  $(\mathbf{H}' - \lambda)$  haben eine gemeinsame Submatrix der Größe  $(q-1) \times (q-1)$ .

Diese wird im Folgenden als

$$X := \begin{pmatrix} b_2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \ddots & \ddots & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 1 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & b_q \end{pmatrix}$$

bezeichnet.  $(\mathbf{H} - \lambda)$  und  $(\mathbf{H}' - \lambda)$  haben dann die Gestalt:

$$(\mathbf{H} - \lambda) = \begin{pmatrix} b_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & e \\ 1 & \boxed{\phantom{X}} & & & & \\ 0 & & \boxed{\phantom{X}} & & & \\ \vdots & & & \boxed{\phantom{X}} & & \\ 0 & & & & \boxed{\phantom{X}} & \\ \bar{e} & & & & & \boxed{\phantom{X}} \end{pmatrix} \quad (\mathbf{H}' - \lambda) = \begin{pmatrix} & & & & & e \\ & & & & & 0 \\ & & \boxed{\phantom{X}} & & & \vdots \\ & & & \boxed{\phantom{X}} & & 0 \\ & & & & \boxed{\phantom{X}} & 1 \\ \bar{e} & 0 & \cdots & 0 & 1 & b_1 \end{pmatrix}$$

Führen wir nun folgende Bezeichnung ein:

$$\begin{aligned} X^i &= X, i\text{-te Zeile gestrichen} \\ X_j &= X, j\text{-te Spalte gestrichen} \end{aligned}$$

Dann gilt für die Determinante  $|\mathbf{H} - \lambda|$  bei einer Entwicklung nach der ersten Zeile:

$$|\mathbf{H} - \lambda| = b_1 |X| - \underbrace{\begin{vmatrix} 1 & & & \\ 0 & & & \\ \vdots & & X_1 & \\ 0 & & & \\ \bar{e} & & & \end{vmatrix}}_{\text{nach 1. Spalte entwickeln}} + (-1)^{q+1} e \underbrace{\begin{vmatrix} 1 & & & \\ 0 & & & \\ \vdots & & X_{q-1} & \\ 0 & & & \\ \bar{e} & & & \end{vmatrix}}_{\text{nach 1. Spalte entwickeln}}$$

$$\begin{aligned} |\mathbf{H} - \lambda| &= b_1 |X| - |X_1^1| - (-1)^q \bar{e} |X_1^{q-1}| + (-1)^{q+1} e |X_{q-1}^1| + (-1)^{q+1} e (-1)^q \bar{e} |X_{q-1}^{q-1}| \\ &= b_1 |X| - |X_1^1| + (-1)^{q+1} (\bar{e} |X_1^{q-1}| + e |X_{q-1}^1|) - e \bar{e} |X_{q-1}^{q-1}| \end{aligned}$$

Nun ist  $e\bar{e} = 1$  und  $|X_{q-1}^1| = |X_1^{q-1}| = 1$ , denn  $X_{q-1}^1$  ist eine untere Dreiecksmatrix deren Diagonalelemente alle gleich 1 sind,  $X_1^{q-1}$  eine obere Dreiecksmatrix mit der gleichen Eigenschaft. Es folgt

$$|\mathbf{H} - \lambda| = b_1 |X| - |X_1^1| - |X_{q-1}^{q-1}| + (-1)^{q-1} (e + \bar{e}).$$

Für die Berechnung von  $|\mathbf{H}' - \lambda|$  gehen wir analog vor: Wir entwickeln  $(\mathbf{H}' - \lambda)$  zunächst nach der letzten Spalte:

$$|\mathbf{H}' - \lambda| = b_1 |X| - \underbrace{\begin{vmatrix} & & & & \\ & & & & \\ & & X^{q-1} & & \\ & & & & \\ \bar{e} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{vmatrix}}_{\text{nach letzter Zeile entwickeln}} + (-1)^{q+1} e \underbrace{\begin{vmatrix} & & & & \\ & & & & \\ & & X^1 & & \\ & & & & \\ \bar{e} & 0 & \dots & 0 & 1 \end{vmatrix}}_{\text{nach letzter Zeile entwickeln}}$$

$$\begin{aligned} |\mathbf{H}' - \lambda| &= b_1 |X| - (-1)^q \bar{e} |X_1^{q-1}| - (-1)^{2q} |X_{q-1}^{q-1}| \\ &\quad + (-1)^{q+1} (-1)^q e \bar{e} |X_1^1| + (-1)^{q+1} (-1)^{2q} e |X_{q-1}^1| \\ &= b_1 |X| - |X_1^1| - |X_{q-1}^{q-1}| + (-1)^{q+1} (e + \bar{e}) \end{aligned}$$

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

Deshalb gilt:

$$|\mathbf{H}(\mathbf{v}) - \lambda| = |\mathbf{H}'(\mathbf{v}) - \lambda| = |\mathbf{H}(\mathbf{v}') - \lambda|.$$

Womit die Behauptung bewiesen ist.

Das Hofstadtersche Spurpolynom ist also invariant gegenüber einer zyklischen Vertauschung der  $c_i$ . Daraus folgt u.a., daß die Eigenwerte von  $\mathbf{H}^a$  unabhängig vom Ort sind.

Wie in Anhang A explizit gezeigt wird, gilt ferner für alle  $i, j$  ( $1 \leq i < q, 1 \leq j < q$ )

$$A_{i,j}(\mathbf{v}) = A'_{i-1,j-1}(\mathbf{v}) = A_{i-1,j-1}(\mathbf{v}'). \quad (3.44)$$

Die zyklische Vertauschung der  $c_i$  entspricht also einer „Verschiebung“ der Adjunkten.

Die Adjunkte  $A_{i,j}$  ist periodisch in  $\mathbf{v}$  mit der Periode  $2\pi$ , denn  $\mathbf{H}^a(\mathbf{v}) = \mathbf{H}^a(\mathbf{v}')$  für  $\mathbf{v}' = \mathbf{v} + 2\pi$ . Das Hofstadtersche Spurpolynom  $P(\lambda) - 2\cos(q\mathbf{v}) - 2\cos(q\mu)$  ist offensichtlich periodisch in  $\mathbf{v}$  mit der Periode  $2\pi/q$ . Deshalb ist auch

$$\mathbf{G}(\lambda, i, j, \mu, \mathbf{v}) = \frac{A_{i,j}(\mu, \mathbf{v})}{P(\lambda) - 2\cos(q\mathbf{v}) - 2\cos(q\mu)}$$

periodisch in  $\mathbf{v}$  mit der Periode  $2\pi$ .

Das Integral über eine Periode einer periodischen Funktion ist unabhängig von den Integrationsgrenzen:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \mathbf{G}(\lambda, i, j, \mathbf{v}, \mu) d\mathbf{v} = \int_{-\pi-a}^{\pi-a} \mathbf{G}(\lambda, i, j, \mathbf{v}, \mu) d\mathbf{v}.$$

Deshalb gilt:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\lambda, i, j) &= \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{A_{i,j}(\mathbf{v})}{P(\lambda) - 2\cos(q\mathbf{v}) - 2\cos(q\mu)} d\mathbf{v} d\mu \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi+2\pi\alpha}^{\pi+2\pi\alpha} \frac{A_{i-1,j-1}(\mathbf{v}')}{P(\lambda) - 2\cos(q\mathbf{v}') - 2\cos(q\mu)} d\mathbf{v}' d\mu \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{A_{i-1,j-1}(\mathbf{v}')}{P(\lambda) - 2\cos(q\mathbf{v}') - 2\cos(q\mu)} d\mathbf{v}' d\mu \\ &= \mathbf{G}(\lambda, i-1, j-1). \end{aligned}$$

Wenn nun jedes Element einer Diagonale der Greensfunktion gleich dem nächsten (bzw.

vorhergehenden) auf dieser Diagonale ist, müssen alle Elemente in einer Diagonale gleich sein.

Nach den Gleichungen (A.6) und (A.8) hat der Imaginärteil der Greensfunktion immer die Form

$$\Im(\mathbf{G}(\lambda, i, j)) = \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\pm \sin(q\mu) f(\lambda, i, j, \nu)}{P(\lambda) - 2 \cos(q\nu) - 2 \cos(q\mu)} d\nu d\mu.$$

Dabei ist  $f$  die Determinante einer Matrix, die  $\mu$  nicht enthält. Der Integrand des Imaginärteils ist also der Quotient einer in  $\mu$  ungeraden und einer in  $\mu$  geraden Funktion. Der Quotient einer ungeraden und einer geraden Funktion ist selbst wieder ungerade. Das Integral über eine Periode (oder das ganzzahlige Vielfache einer Periode) einer ungeraden Funktion ergibt immer 0, deshalb gilt:

$$\Im(\mathbf{G}(\lambda, i, j)) = 0. \quad (3.45)$$

Mit der Hermitizität von  $\mathbf{H}^a$  (3.42) folgt:

$$\mathbf{G}(\lambda, i, j) = \mathbf{G}(\lambda, j, i). \quad (3.46)$$

Die Greensfunktion  $\mathbf{G}^a(\lambda)$  zum Azbel–Harper Hamiltonian  $\mathbf{H}^a$  hat also für alle  $\lambda \in \mathbb{R}$ , die keine Eigenwerte von  $\mathbf{H}^a$  sind, folgende Eigenschaften:

1. Die Elemente der Greensfunktion  $\mathbf{G}^a(\lambda, i, j)$  sind für alle  $i, j$  reell (3.45).
2.  $\mathbf{G}^a$  ist symmetrisch (3.46).
3. Die Diagonalelemente von  $\mathbf{G}^a$  sind identisch:

$$\mathbf{G}^a(\lambda, l, l) = \mathbf{G}^a(\lambda, m, m) \quad (1 \leq l, m \leq q). \quad (3.47)$$

4. Die Elemente jeder  $j$ -ten Nebendiagonale sind untereinander gleich:

$$\mathbf{G}(\lambda, l, l+j) = \mathbf{G}(\lambda, m, m+j) \quad (1 \leq l \leq m \leq q). \quad (3.48)$$

Um  $\mathbf{G}^a$  vollständig anzugeben, genügt die Kenntnis von maximal  $q$  Elementen von  $\mathbf{G}^a$ . Diese Aussage gilt nur für die verwendete Landau-Eichung des Vektorpotentials und für das auf eine Dimension und eine magnetische Brillouinzone reduzierte System.

### 3.2.3. Berechnung der Diagonalelemente

Im vorangegangenen Abschnitt wurden eine Reihe von Eigenschaften der Resolventen von  $\mathbf{H}^a$  hergeleitet. Mit (3.37) und (3.47) lassen sich die Diagonalelemente von  $\mathbf{G}^a(\lambda)$  berechnen:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{G}^a(\lambda, l, l) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{A_{l,l}}{|\mathbf{M}|} dv d\mu \\
 &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{q} \sum_{j=1}^q \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{A_{j,j}}{|\mathbf{M}|} dv d\mu \\
 &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{q} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sum_{j=1}^q A_{j,j}}{|\mathbf{M}|} dv d\mu \\
 &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{q} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dP}{|\mathbf{M}|} dv d\mu \\
 &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{q} \frac{dP}{d\lambda} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{P(\lambda) - 2\cos(q\mu) - 2\cos(q\nu)} dv d\mu. \quad (3.49)
 \end{aligned}$$

Die Lösung dieses Integrals ist bekannt: Sie tritt auch bei der Berechnung der Greensfunktion  $\mathbf{G}^t$  für ein Teilchen im periodischen Potential ohne Magnetfeld auf (siehe Abschnitt 3.1),

$$\begin{aligned}
 \mathbf{G}^t(\lambda, l, l) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{\lambda - 2\cos(\phi_1) - 2\cos(\phi_2)} d\phi_1 d\phi_2 \\
 &= \frac{2}{\pi\lambda} \mathbf{K}\left(\frac{4}{\lambda}\right),
 \end{aligned}$$

mit dem elliptischen Integral erster Art nach [Byr]. Ersetzt man  $\lambda$  durch  $P(\lambda)$ , so erhält man die Lösung des Integrals (3.49). Die Diagonalelemente der Greensfunktion werden zu

$$\mathbf{G}^a(\lambda, l, l) = \frac{2}{\pi q} \frac{1}{P(\lambda)} \frac{dP(\lambda)}{d\lambda} \mathbf{K}\left(\frac{4}{P(\lambda)}\right), \quad (3.50)$$

für alle  $\lambda$  außerhalb des Spektrums von  $\mathbf{H}^a$ .

Das Spektrum von  $\mathbf{H}^a$  ist mit (3.50) sofort bestimmt: Das elliptische Integral erster Art ist

nur für Argumente, die kleiner oder gleich 1 sind, definiert. Deshalb sind alle  $\varepsilon$ , für die

$$P(\varepsilon) \leq 4$$

gilt, Eigenwerte von  $\mathbf{H}^a$ . Dies deckt sich mit (2.36).

Liegt  $\lambda$  im Spektrum von  $\mathbf{H}^a$ , so ist  $\mathbf{G}^a$  nicht definiert. Man betrachtet stattdessen die Grenzwerte

$$\mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon) = \lim_{s \rightarrow \pm 0} \mathbf{G}^a(\varepsilon + is).$$

Diese werden wie im Fall ohne Magnetfeld aus der analytischen Fortsetzung des elliptischen Integrals über der komplexen Ebene berechnet [Mor][Byr]. Damit erhält man für  $\mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon)$  über dem Spektrum von  $\mathbf{H}^a$ :

$$\Re \mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon, l, l) = -\frac{1}{2\pi q} \frac{1}{d\varepsilon} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K} \left( \frac{P(\varepsilon)}{4} \right), \quad -4 < P(\varepsilon) < 0, \quad (3.51)$$

$$\Re \mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon, l, l) = \frac{1}{2\pi q} \frac{1}{d\varepsilon} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K} \left( \frac{P(\varepsilon)}{4} \right), \quad 0 < P(\varepsilon) < -4, \quad (3.52)$$

$$\Im \mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon, l, l) = \mp \frac{1}{2\pi q} \frac{1}{d\varepsilon} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K} \left( \frac{1}{4} \sqrt{1 - P(\varepsilon)^2} \right), \quad -4 < P(\varepsilon) < 4, \quad (3.53)$$

Die Abbildungen 3.4 bis 3.6 zeigen Real- und Imaginärteil der Greensfunktion für verschiedene Werte von  $\alpha$ .

Die Zustandsdichte läßt sich aus dem Imaginärteil der Greensfunktion berechnen:

$$\begin{aligned} \rho(\varepsilon) &= \mp \frac{1}{\pi} \Im \mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon, l, l) \\ &= \frac{1}{2\pi^2 q} \frac{1}{d\varepsilon} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K} \left( \frac{1}{4} \sqrt{1 - P(\varepsilon)^2} \right) \\ &= \frac{1}{2\pi^2 q} \frac{1}{d\varepsilon} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K}' \left( \frac{|P(\varepsilon)|}{4} \right) \end{aligned}$$

siehe [Byr]. Diese ist identisch mit der bereits bekannten Zustandsdichte aus [Wa1] (2.37).

Physikalisch interessant an dieser Rechnung ist die Tatsache, daß die Diagonalelemente der Greensfunktion des Systems ohne Magnetfeld die gleiche mathematische Struktur haben wie diejenigen der Resolventen des Systems mit Magnetfeld. Die Diagonalelemente

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

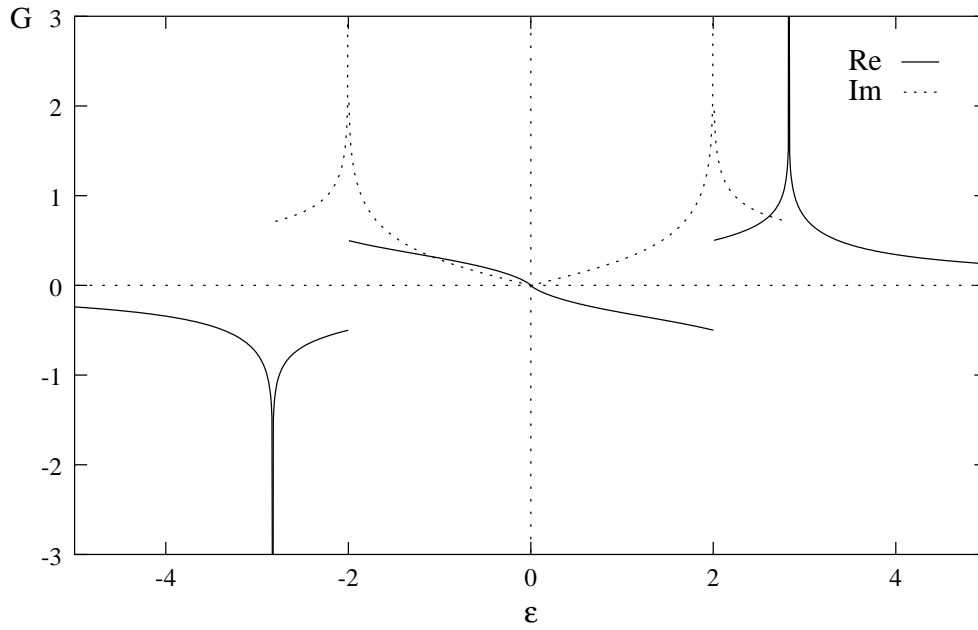


Abbildung 3.4.: Real- und Imaginärteil ( $\Im \mathbf{G}^{a-}(\epsilon, l, l)$ ) eines Diagonalelements der Greensfunktion zu  $\alpha = \frac{1}{2}$ .

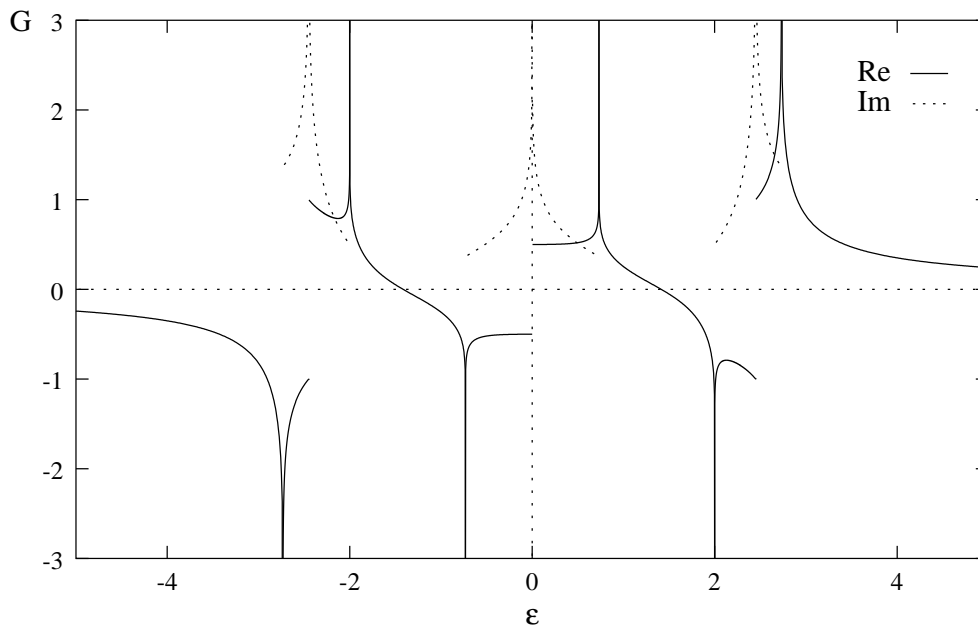


Abbildung 3.5.: Real- und Imaginärteil ( $\Im \mathbf{G}^{a-}(\epsilon, l, l)$ ) eines Diagonalelements der Greensfunktion zu  $\alpha = \frac{1}{3}$ .



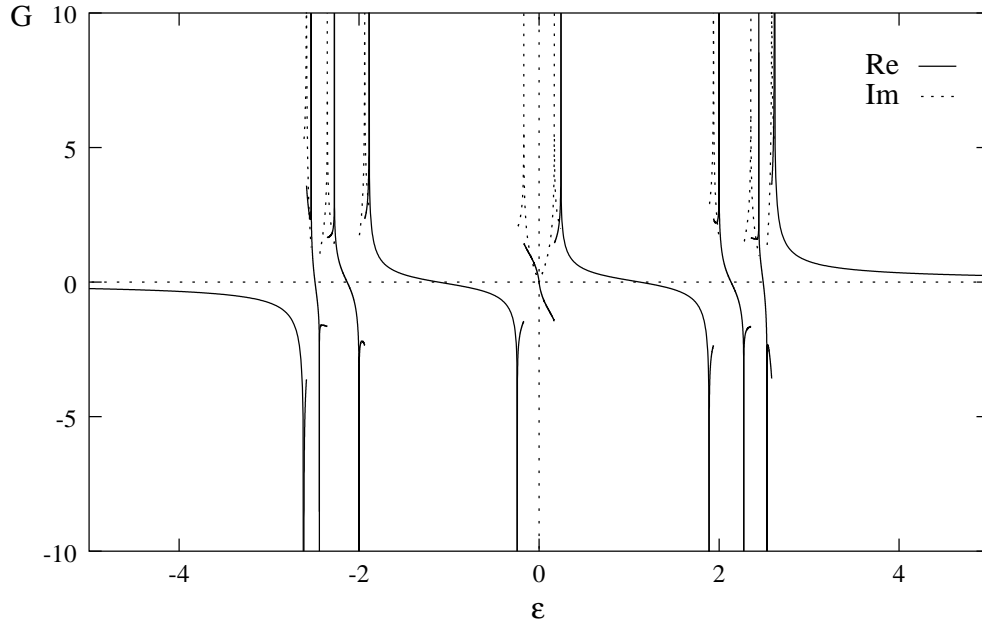


Abbildung 3.6.: Beispiel für eine komplexere Unterbandstruktur: Real- und Imaginärteil ( $\Im \mathbf{G}^{\alpha^-}(\varepsilon, l, l)$ ) eines Diagonalelements der Greensfunktion zu  $\alpha = \frac{3}{8}$ .

der Greensfunktion beider Modelle, ob bei angelegtem Magnetfeld oder ohne, können als

$$\begin{aligned}
 \mathbf{G}(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) &= \frac{2}{\pi q} \frac{1}{P(\lambda)} \frac{dP(\lambda)}{d\lambda} \mathbf{K} \left( \frac{4}{P(\lambda)} \right) \quad \text{für } |P(\lambda)| > 4, \\
 \Re \mathbf{G}^{\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) &= \frac{P(\varepsilon)}{|P(\varepsilon)|} \frac{1}{2\pi q} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K} \left( \frac{P(\varepsilon)}{4} \right) \quad \text{für } -4 < P(\varepsilon) < 4, \\
 \Im \mathbf{G}^{\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) &= \mp \frac{1}{2\pi q} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K}' \left( \frac{|P(\varepsilon)|}{4} \right) \quad \text{für } -4 < P(\varepsilon) < 4,
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

dargestellt werden. Im Fall ohne Magnetfeld ist

$$P(\lambda) = \lambda,$$

und  $\vec{l}$  bezeichnet einen Platz auf dem Gitter in zwei Dimensionen. Bei angelegtem Magnetfeld bezeichnet  $\vec{l}$  einen Ort auf der  $x$ -Achse.

Es gilt also die Äquivalenz

$$\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = \mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})_{\alpha=0}. \tag{3.55}$$

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

Anders betrachtet wird das Anlegen eines Magnetfeldes durch die Transformation

$$\hat{p} \rightarrow \hat{p} + e\vec{A}$$

mit dem Übergang

$$\lambda \rightarrow P(\lambda)$$

in der Greensfunktion beschrieben.

Die Diagonalelemente der Greensfunktion „leben“ also nach Anlegen des Magnetfeldes auf dem Polynom  $P(\lambda)$  statt auf  $\lambda$ .

Die Äquivalenz (3.55) läßt sich auch noch von einer anderen Seite betrachten: Die Diagonalelemente von  $\mathbf{G}^a$  lassen sich aus der Zustandsdichte berechnen:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^a(\lambda, l, l) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\varepsilon)}{\lambda - \varepsilon} d\varepsilon \\ &= \sum_{i=1}^q \int_{u_i}^{o_i} \frac{\rho_i(\varepsilon)}{\lambda - \varepsilon} d\varepsilon. \end{aligned}$$

Dabei sind  $u_i$  und  $o_i$  die Unter- bzw. Oberkante des  $i$ -ten magnetischen Unterbandes und  $\rho_i(\varepsilon)$  die Zustandsdichte dieses Bandes. Die Diagonalelemente der Greensfunktion zu  $\mathbf{H}^a$  entsprechen also der Summe über die Diagonalelemente der Greensfunktionen zu den  $q$  magnetischen Unterbändern, wenn man sie als isoliert betrachtet.

Die Zustandsdichte eines magnetischen Unterbandes unterscheidet sich nur in zwei Punkten von der eines Tight-Binding-Bandes: Zum einen ist sie nicht mehr symmetrisch, denn die Dispersionsrelation  $\varepsilon(\vec{k})$  im Unterband ist nicht mehr proportional zu  $\cos(k_1x) + \cos(k_2y)$ . Zum anderen ist das Integral über die Zustandsdichte nicht mehr 1, sondern  $\frac{1}{q}$ . Bildlich ausgedrückt besteht die Greensfunktion zu  $\mathbf{H}^a$  aus einer Summe von  $q$  Greensfunktionen zu „verzerrten“ Tight-Binding-Bändern.

Mit dieser Erkenntnis läßt sich eine Näherung der Greensfunktion  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, l)$  für Werte von  $\alpha$  mit großem Nenner  $q$  machen. Für große  $q$  sind die magnetischen Unterbänder sehr schmal, bei Werten von  $q \approx 100$  ist die Breite der meisten Unterbänder kleiner als  $10^{-16}$  also nah an der numerischen Rechengenauigkeit. Die Zustandsdichte über diesen „unendlich“ schmalen magnetischen Unterbändern hat im wesentlichen die Gestalt eines Peaks. Zum Integral über die Zustandsdichte trägt lediglich die Van-Hove-Singularität

bei. Deshalb kann  $\rho_i(\varepsilon)$  für große  $q$  bei sehr schmalen Unterbändern gut durch eine  $\delta$ -Funktion genähert werden. Als Approximation der Resolventen von  $\mathbf{H}^a$  ergibt sich daraus

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^a(\lambda, l, l) &= \sum_{i=1}^q \int_{u_i}^{o_i} \frac{\rho_i(\varepsilon)}{\lambda - \varepsilon} d\varepsilon \\ &\approx \sum_{i=1}^q \int_{u_i}^{o_i} \frac{\frac{1}{q} \delta(\varepsilon - \lambda)}{\lambda - \varepsilon} d\varepsilon \\ &= \frac{1}{q} \sum_{i=1}^q \frac{1}{\lambda - \varepsilon}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Diese Näherung ist sinnvoll, denn für große Werte von  $q$  wird die Berechnung des Hofstadterschen Spurpolynoms besonders in den Bandlücken sehr aufwendig und numerisch ungenau, da  $P$  sehr große Werte annehmen kann.

### Eigenschaften der Diagonalelemente

Für die späteren Betrachtungen sind die analytischen Eigenschaften der Diagonalelemente der Greensfunktion des Azbel–Harper–Hamiltonians von Bedeutung. Deshalb wird hier ein Überblick über diese Eigenschaften gegeben. Zum Teil ergeben sie sich aus der oben genannten Äquivalenz (3.55), sie sollen hier der Vollständigkeit halber dennoch angeführt werden.

- Die Diagonalelemente der Greensfunktion sind ungerade Funktionen in  $\lambda$ :

$$\mathbf{G}^a(-\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = -\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l}), \quad (3.57)$$

denn wegen

$$\begin{aligned} P(-\lambda) &= \begin{cases} P(\lambda) & q \text{ gerade} \\ -P(\lambda) & q \text{ ungerade} \end{cases} \\ \frac{dP(-\lambda)}{d\lambda} &= \begin{cases} +\frac{dP(\lambda)}{d\lambda} & q \text{ gerade} \\ -\frac{dP(\lambda)}{d\lambda} & q \text{ ungerade} \end{cases} \\ \mathbf{K}\left(\frac{4}{P(-\lambda)}\right) &= \mathbf{K}\left(\frac{4}{P(\lambda)}\right) \end{aligned}$$

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

ist  $\mathbf{G}^a$  immer ein Produkt aus einer ungeraden und zwei geraden Funktionen.

- Der Imaginärteil von  $\mathbf{G}^a(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l})$  über einem Band hat an der Bandkante  $\varepsilon_k$  einen endlichen Grenzwert, falls  $\frac{dP(\varepsilon=\varepsilon_k)}{d\varepsilon} \neq 0$ . Denn

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} \Im \mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) &= \mp \lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} \frac{1}{2\pi q} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K}'\left(\frac{P(\varepsilon)}{4}\right) \\ &= \mp \frac{2}{2\pi q} \frac{dP(\varepsilon=\varepsilon_k)}{d\varepsilon} \lim_{P(\varepsilon) \rightarrow 4} \mathbf{K}\left(\frac{P(\varepsilon)}{4}\right) \end{aligned}$$

also

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} \Im \mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) = \mp \frac{1}{2q} \frac{dP(\varepsilon=\varepsilon_k)}{d\varepsilon}. \quad (3.58)$$

Die Ableitung  $\frac{dP(\varepsilon=\varepsilon_k)}{d\varepsilon}$  verschwindet an der Bandkante nur für entartete Bänder, deshalb gilt (3.58) für alle nicht entarteten Unterbänder.

- Zum Zentrum des Bandes mit  $P(\varepsilon) = 0$  hin divergiert der Imaginärteil der Greensfunktion:

$$\lim_{P(\varepsilon) \rightarrow 0} \Im \mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) = \mp \lim_{P(\varepsilon) \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi q} \frac{1}{q} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K}'\left(\frac{|P(\varepsilon)|}{4}\right) = \mp \infty \quad (3.59)$$

denn  $\mathbf{K}'(x)$  divergiert für  $x \rightarrow 0$ .

- $\Re \mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l})$  hat im Zentrum des Bandes  $P(\varepsilon_z) = 0$  einen endlichen Grenzwert:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_z} \Re \mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) &= \pm \lim_{P(\varepsilon) \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi q} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K}\left(\frac{P(\varepsilon)}{4}\right) \\ &= \pm \frac{1}{4q} \frac{dP(\varepsilon=\varepsilon_z)}{d\varepsilon} \end{aligned} \quad (3.60)$$

- Der Realteil der Diagonalelemente der Greensfunktion divergiert an den Bandkanten  $\varepsilon_k$ . Außerhalb eines Bandes gilt:

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow \varepsilon_k} \mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) &= \lim_{\lambda \rightarrow \varepsilon_k} \frac{2}{\pi q} \frac{1}{P(\lambda)} \frac{dP(\lambda)}{d\lambda} \mathbf{K}\left(\frac{4}{P(\lambda)}\right) \\ &= \frac{2}{\pi q} \frac{1}{\pm 4} \frac{dP(\lambda=\varepsilon_k)}{d\lambda} \lim_{P(\lambda) \rightarrow 4} \mathbf{K}\left(\frac{4}{P(\lambda)}\right) \\ &= \pm \infty. \end{aligned} \quad (3.61)$$

### 3.2. Die Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian

Innerhalb eines Bandes gilt für  $\frac{dP(\varepsilon=\varepsilon_k)}{d\varepsilon} \neq 0$  (d.h. endliche Bandlücke jenseits der Bandkante):

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} \Re \mathbf{G}^{a\pm}(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} \frac{1}{2\pi q} \frac{dP(\varepsilon)}{d\varepsilon} \mathbf{K} \left( \frac{P(\varepsilon)}{4} \right) \\ &= \frac{1}{2\pi q} \frac{dP(\varepsilon=\varepsilon_k)}{d\varepsilon} \lim_{P(\varepsilon) \rightarrow 4} \mathbf{K} \left( \frac{P(\varepsilon)}{4} \right) \\ &= \pm \infty. \end{aligned}$$

Diese Eigenschaft läßt sich auch mit dem endlichen Grenzwert des Imaginärteils von  $\mathbf{G}^a(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l})$  an der Bandkante erklären (3.15).

- Sind zwei Bänder entartet, so gilt zwischen den Bändern  $\frac{dP(\varepsilon=\varepsilon_k)}{d\varepsilon} = 0$  und damit:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} \Re \mathbf{G}^a(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) = 0 \quad (3.62)$$

bzw.

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} \Im \mathbf{G}^a(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) = 0. \quad (3.63)$$

- Für  $|\lambda| \rightarrow \infty$  verschwinden die Diagonalelemente der Greensfunktion:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = 0 \quad (3.64)$$

und

$$\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) = 0. \quad (3.65)$$

- Für isolierte Bänder ist  $\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  unterhalb der unteren Bandkante immer negativ. Denn gemäß (2.36) gilt:

$$|P(\lambda)| \leq 4.$$

*Unterhalb* einer Bandkante gilt also entweder

$$P(\lambda) < -4 \quad \text{und} \quad \frac{dP(\lambda)}{d\lambda} > 0$$

oder

$$P(\lambda) > 4 \quad \text{und} \quad \frac{dP(\lambda)}{d\lambda} < 0.$$

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

Das Produkt  $P(\lambda) \frac{dP(\lambda)}{d\lambda}$  ist damit immer negativ.  $K\left(\frac{4}{P(-\lambda)}\right)$  ist immer positiv. Die Diagonalelemente der Greensfunktion  $\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  sind unterhalb eines Bandes immer negativ.

- Für isolierte Bänder ist  $\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  oberhalb der oberen Bandkante immer positiv. Denn *oberhalb* einer Bandkante gilt entweder

$$P(\lambda) < -4 \quad \text{und} \quad \frac{dP(\lambda)}{d\lambda} < 0$$

oder

$$P(\lambda) > 4 \quad \text{und} \quad \frac{dP(\lambda)}{d\lambda} > 0.$$

Das Produkt  $P(\lambda) \frac{dP(\lambda)}{d\lambda}$  ist deshalb immer positiv. Mit  $K\left(\frac{4}{P(-\lambda)}\right) > 0$  folgt, daß die Diagonalelemente der Greensfunktion  $\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  oberhalb eines Bandes immer positiv sind.

- Außerhalb des Spektrums von  $\mathbf{H}^a$  ist  $\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  streng monoton fallend, denn

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) &= \langle \vec{l} | (\lambda - \mathbf{H}^a)^{-1} | \vec{l} \rangle, \\ \frac{d}{d\lambda} \mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) &= \frac{d}{d\lambda} \langle \vec{l} | (\lambda - \mathbf{H}^a)^{-1} | \vec{l} \rangle \\ &= -\langle \vec{l} | (\lambda - \mathbf{H}^a)^{-2} | \vec{l} \rangle < 0. \end{aligned} \quad (3.66)$$

#### 3.2.4. Die Nebendiagonalelemente

Wie im vorangehenden Abschnitt gezeigt, können die Diagonalelemente der Greensfunktion des Azbel–Harper–Hamiltonians in Abhängigkeit vom Hofstadterschen Spurpolynom analytisch ausgedrückt werden (Gleichungen (3.50) bis (3.53)). Die Diagonalelemente der Resolventen zum Tight–Binding–Modell ergeben sich im Grenzfall verschwindenden Magnetfelds (3.54).

Für die weiteren Abschnitte sind zusätzlich zu den Diagonalelementen auch die Nebendiagonalelemente der Greensfunktion des Azbel–Harper–Hamiltonians von Bedeutung. Ihre Berechnung soll im folgenden erläutert werden.

Die Greensfunktion  $\mathbf{G}^a(\lambda)$  (für feste  $\nu, \mu$ ) ist definiert durch:

$$(\lambda - \mathbf{H}^a) \mathbf{G}^a(\lambda, \mu, \nu) = 1.$$

Daraus folgt für die Adjunkten  $A_{i,j}$  von  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$

$$\frac{1}{P(\lambda, \mu, \nu)} \left( A_{i+1,j} + A_{i-1,j} - (\lambda - c_i) A_{i,j} \right) = -\delta_{i,j} \quad (3.67)$$

mit

$$P(\lambda, \mu, \nu) = P(\lambda) - 2 \cos(q\nu) - 2 \cos(q\mu).$$

Ebenso gilt natürlich

$$\mathbf{G}^a(\lambda, \nu, \mu)(\lambda - \mathbf{H}^a) = 1$$

und damit

$$\frac{1}{P(\lambda, \mu, \nu)} \left( A_{i,j+1} + A_{i,j-1} - (\lambda - c_j) A_{i,j} \right) = -\delta_{i,j}. \quad (3.68)$$

Also

$$\frac{1}{P(\lambda, \mu, \nu)} \left( A_{i,j+1} + A_{i,j-1} + A_{i+1,j} + A_{i-1,j} \right) = (2\lambda - c_i - c_j) \frac{A_{i,j}}{P(\lambda, \mu, \nu)} - 2\delta_{i,j}.$$

Nach Integration ergibt sich

$$\begin{aligned} & \mathbf{G}^a(\lambda, i+1, j) + \mathbf{G}^a(\lambda, i-1, j) + \mathbf{G}^a(\lambda, i, j+1) + \mathbf{G}^a(\lambda, i, j-1) \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (2\lambda - c_i - c_j) \frac{A_{i,j}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu - 2\delta_{i,j}. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Wenn man das Integral

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} c_i \frac{A_{i,j}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu \quad (3.70)$$

für alle  $i, j$  lösen könnte, wäre damit eine Rekursion für die Elemente der Greensfunktion analog zur rekursiven Berechnung der Elemente von  $\mathbf{G}^t(\lambda)$  (siehe Abschnitt 3.1.1) gegeben. Leider ist (3.70) nicht allgemein lösbar. Ebenso ist es auch nicht für alle  $i, j$  möglich, die Rekursion des Modells ohne Magnetfeld auf das Azbel–Harper–Modell zu übertragen. Lediglich die Elemente der ersten Nebendiagonale von  $\mathbf{G}^a(\lambda)$  können aus den Diagonalelementen berechnet werden, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird.

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

#### Erste Nebendiagonale

Um ein Element der ersten Nebendiagonale von  $\mathbf{G}^a(\lambda)$  zu berechnen, nutzt man die Gleichheit der Elemente in einer Diagonalen (3.48) und die Symmetrie von  $\mathbf{G}^a(\lambda)$  (3.46) aus. Die linke Seite von (3.69) wird damit zu

$$\mathbf{G}^a(\lambda, i+1, i) + \mathbf{G}^a(\lambda, i-1, i) + \mathbf{G}^a(\lambda, i, i+1) + \mathbf{G}^a(\lambda, i, i-1) = 4\mathbf{G}^a(\lambda, i, i+1).$$

In (3.69) eingesetzt ergibt sich

$$\mathbf{G}^a(\lambda, i, i+1) = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (\lambda - c_i) \frac{A_{i,i}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu - 1 \right).$$

Dieses Integral ist lösbar, denn es gilt

$$\begin{aligned} \lambda \mathbf{G}^a(\lambda, i, i) + 1 &= \lambda \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{A_{i,i}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu + 1 \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\lambda A_{i,i} + P(\lambda, \mu, \nu)}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Für  $q \geq 3$  findet man die Beziehung

$$\begin{aligned} &\frac{1}{q} \sum_{i=1}^q \lambda A_{i,i} + P(\lambda, \mu, \nu) - 2(\lambda - c_i) A_{i,i} \\ &= \frac{1}{q} \sum_{i=1}^q \lambda A_{i,i} - 2(\lambda - c_i) A_{i,i} + (\lambda - c_i) A_{i,i} - A_{i,i-1} - A_{i,i+1} \\ &= \frac{1}{q} \sum_{i=1}^q c_i A_{i,i} - A_{i,i-1} - A_{i,i+1} \\ &= 2 \cos(q\nu) - 2 \cos(q\mu). \end{aligned} \quad (3.72)$$

Die letzte Identität konnte ich nicht beweisen, sie hielt jedoch sämtlichen analytischen und numerischen Überprüfungen stand<sup>2</sup>.

---

<sup>2</sup>Überprüft wurde analytisch mit dem Programm Maple für alle  $\alpha$  bis  $q = 9$ , sowie numerisch mit Stichproben bis  $q = 100$ .



Analog zum Beweis der Gleichheit der Diagonalelemente (3.47) läßt sich zeigen, daß

$$\frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} 2(\lambda - c_i) \frac{A_{i,i}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} 2(\lambda - c_{i+1}) \frac{A_{i+1,i+1}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu$$

gilt.

Mit (3.72) und (3.71) folgt:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} 2(\lambda - c_i) \frac{A_{i,i}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu \\ &= \frac{1}{q} \sum_{i=1}^q \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} 2(\lambda - c_i) \frac{A_{i,i}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu \\ &= \frac{1}{q} \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sum_{i=1}^q 2(\lambda - c_i) A_{i,i}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu \\ &= \frac{1}{q} \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sum_{i=1}^q \lambda A_{i,i} + P(\lambda, \mu, \nu) - 2 \cos(q\nu) + 2 \cos(q\mu)}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu \\ &= \frac{1}{q} \sum_{i=1}^q \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\lambda A_{i,i} + P(\lambda, \mu, \nu)}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu \\ &\quad - \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{2 \cos(q\nu)}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu + \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{2 \cos(q\mu)}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\nu d\mu \\ &= \lambda \mathbf{G}^a(\lambda, i, i) + 1. \end{aligned}$$

Die Elemente der ersten Nebendiagonale von  $\mathbf{G}^a(\lambda)$  ergeben sich damit zu

$$\mathbf{G}^a(\lambda, i, i+1) = \frac{1}{4} (\lambda \mathbf{G}^a(\lambda, i, i) - 1). \quad (3.73)$$

Dies entspricht der Berechnung der Elemente  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l} + (1, 0))$  (3.10).  $\mathbf{G}^t$  ist auf dem Gitter definiert,  $\mathbf{G}^a$  dagegen nur auf der  $x$ -Achse. Das  $(\vec{l}, \vec{l} + (1, 0))$ -Element von  $\mathbf{G}^t$  entspricht also dem  $(i, i+1)$ -Element von  $\mathbf{G}^a$ . Die Äquivalenz (3.55) läßt sich also auch auf die Elemente der ersten Nebendiagonale anwenden. In Abbildung 3.7 wird die erste Nebendiagonale der Resolventen für  $\alpha = \frac{1}{3}$  dargestellt: An den Bandkanten divergiert

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

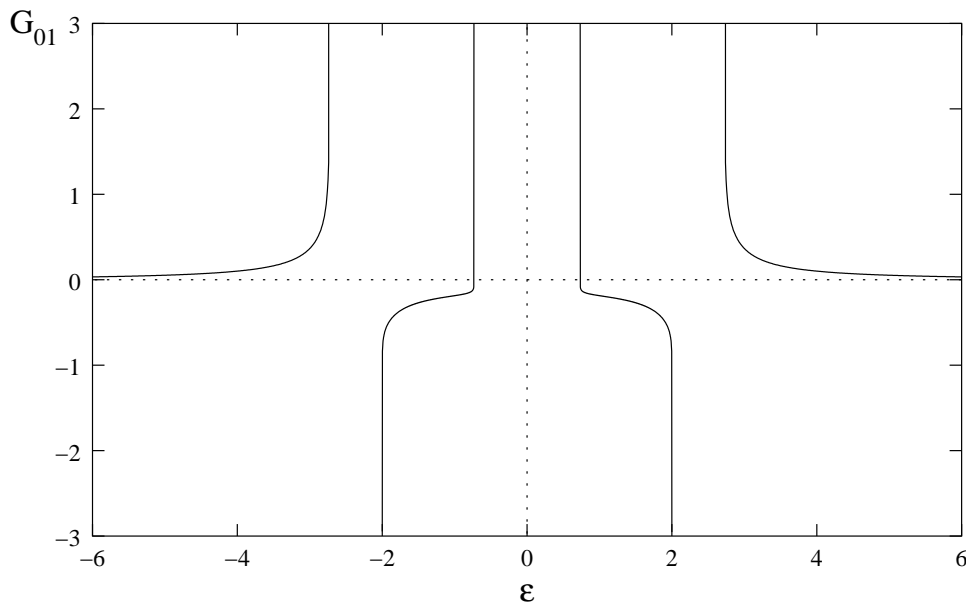


Abbildung 3.7.: Die erste Nebendiagonale der Greensfunktion zu  $\alpha = \frac{1}{3}$  nach (3.73).

$\mathbf{G}^a(\lambda, l, l+1)$  wie  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, l)$ . Nach (3.73) wird die erste Nebendiagonale als Produkt zweier ungerader Funktionen gebildet, deshalb ist sie symmetrisch zu  $\lambda = 0$ .

Im Tight-Binding-Modell können die Elemente der Greensfunktion rekursiv berechnet werden, wie in Abschnitt 3.1.1 ansatzweise dargestellt und in [Mor] detailliert beschrieben. Das ist, wie oben beschrieben, für die Elemente von  $\mathbf{G}^a$  leider nicht möglich, deshalb müssen die weiteren Nebendiagonalelemente numerisch berechnet werden.

#### Weitere Nebendiagonalelemente

Die Elemente  $\mathbf{G}^a(\lambda, i, j)$  mit  $j > i + 1$  werden numerisch bestimmt. Dabei kann man entweder die Eigenvektoren von  $\mathbf{H}^a$  berechnen und diese dann in (3.32) einsetzen, oder  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$  invertieren und (3.37) anwenden. In der Praxis erwies sich die zweite Möglichkeit als wesentlich schneller, denn zum einen sind die Routinen zur Berechnung der Inversen effizienter als die zur Berechnung der Eigenwerte, zum anderen fällt die Summation unter dem Integral weg, was zusätzliche Laufzeitvorteile bringt.

Die Integration erwies sich als relativ schwierig: In der Mitte der Unterbandlücken reichen einfache Verfahren, wie z.B. der Gauß-Legendre Algorithmus leicht aus. Nahe den

Bandkanten aber entwickelt der Integrand scharfe Peaks, die wesentlich zum Integral beitragen. Bei vielen „höherwertigen“ Algorithmen, welche die Integration beispielsweise durch Approximation des Integranden oder über seine Fourier–Entwicklung durchführen, werden diese Spitzen geglättet. Deshalb wird das Verhalten der Greensfunktion an den Bandkanten von diesen Algorithmen nicht richtig wiedergegeben. Als zuverlässig erwies sich ein selbst entwickeltes Verfahren, eine Art dynamischer Simpson–Algorithmus, der die Peaks detektiert und deshalb nicht glättet. Dieses Vorgehen hatte zusätzlich den Vorteil, daß die Integration für alle Diagonalen parallel ausgeführt werden konnte dadurch verbesserte sich das Laufzeitverhalten erheblich, denn die Invertierung von  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$  mußte so nur noch einmal für jedes  $\lambda$  durchgeführt werden.

Bei Werten von  $q \leq 9$  bot sich ein weiteres Verfahren an: Die Adjunkten von  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$  wurden analytisch mit Maple berechnet und dann numerisch mit eigenen Routinen integriert. So ließ sich die Genauigkeit besonders an den Bandkante weiter steigern. Leider war dieses Vorgehen für  $q > 9$  nicht möglich, denn die Determinanten von „analytischen“ Matrizen dieser Größe konnten mit Maple nicht berechnet werden.

Mit dieser Methode wurden die Elemente der Greensfunktion zu  $\alpha = \frac{1}{9}$  in Abbildung 3.8 berechnet. Zwei allgemeine Aussagen lassen sich für  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, m)$  treffen: Zum einen ist  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, m)$  für gerade  $|l - m|$  immer eine ungerade und für ungerade  $|l - m|$  immer eine gerade Funktion. Zum anderen nimmt der Betrag von  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, m)$  zu gegebenem  $\lambda$  mit wachsendem  $|l - m|$  innerhalb einer Periode des magnetischen Übergitters im Mittel ab, wie in Abbildung 3.9 dargestellt.

Für einige der weiteren Betrachtungen ist es sinnvoll, Werte von  $|l - m|$  zu berücksichtigen, die größer als  $q$  sind. Für diese Fälle läßt sich, wie in Anhang B dargestellt, eine Fortsetzung von  $\mathbf{G}^a$  angeben:

$$\mathbf{G}^a(\lambda, l, m) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{iq\mu((l-m)\text{div}q)} \frac{A_{l,m_q}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\mu d\nu \quad (3.74)$$

mit  $m_q = m \bmod q$ .

Auch die Elemente dieser Fortsetzung sind reell (siehe Anhang B). Von besonderer Bedeutung ist das Verhalten von  $\mathbf{G}^a$  für große  $|l - m|$ . In Abbildung 3.10 wird  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, m)$  in Abhängigkeit von  $|l - m|$  dargestellt. Die Elemente nehmen schon innerhalb weniger Perioden des magnetischen Übergitters sehr stark ab.

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

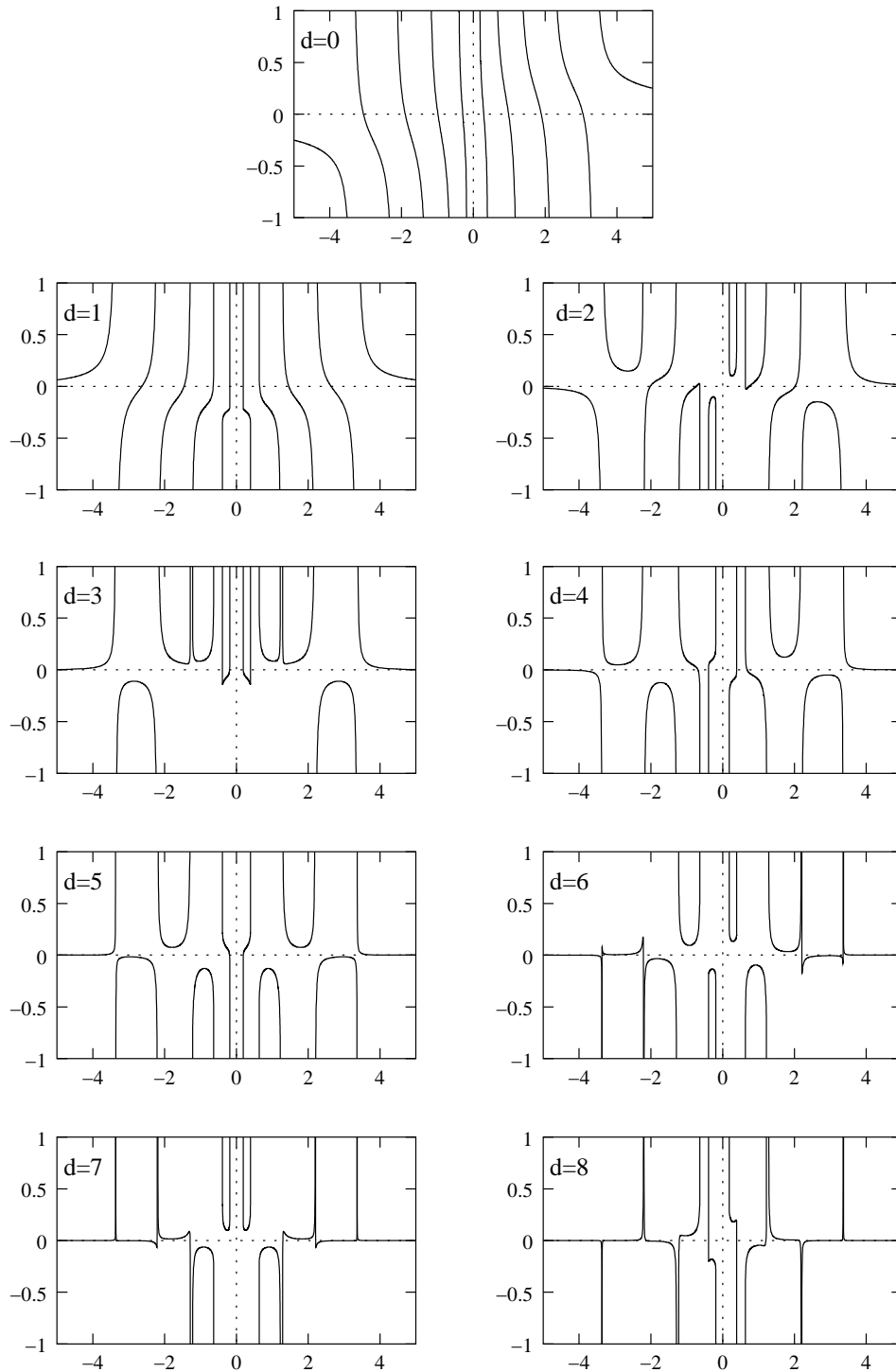


Abbildung 3.8.: Alle verschiedenen Elemente  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, m)$  der Greensfunktion zu  $\alpha = \frac{1}{9}$ : Angetragen ist jeweils  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, l + d)$  gegen  $\lambda$  in Einheiten der skalierten Energie.

### 3.2. Die Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian

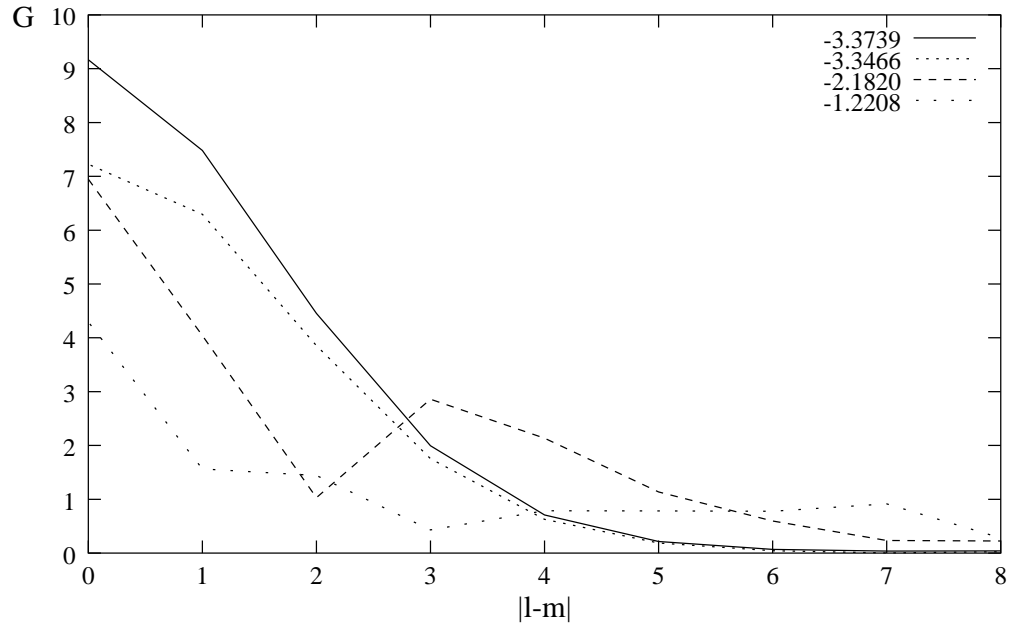


Abbildung 3.9.: Die Greensfunktion  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, m)$  zu  $\alpha = \frac{1}{9}$  bei gegebenem  $\lambda$  in Abhängigkeit von  $|l - m|$ .

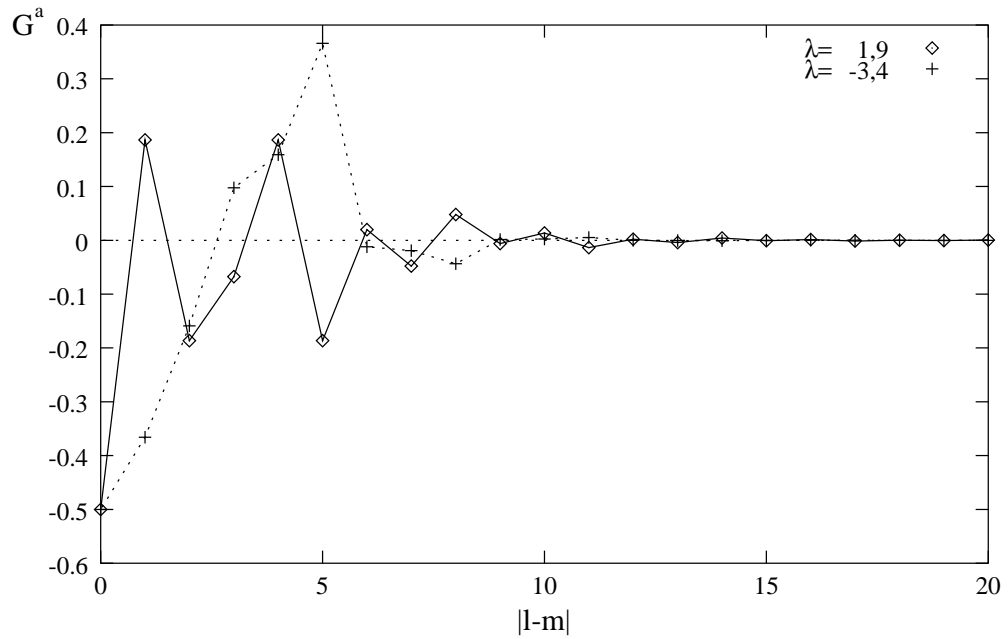


Abbildung 3.10.: Die Greensfunktion  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, m)$  zu  $\alpha = \frac{1}{3}$  in Abhängigkeit von  $|l - m|$  über mehrere Perioden des magnetischen Übergitters.  $\lambda$  ist jeweils angegeben.

### 3. Die Greensfunktion für Teilchen im Kristallgitter

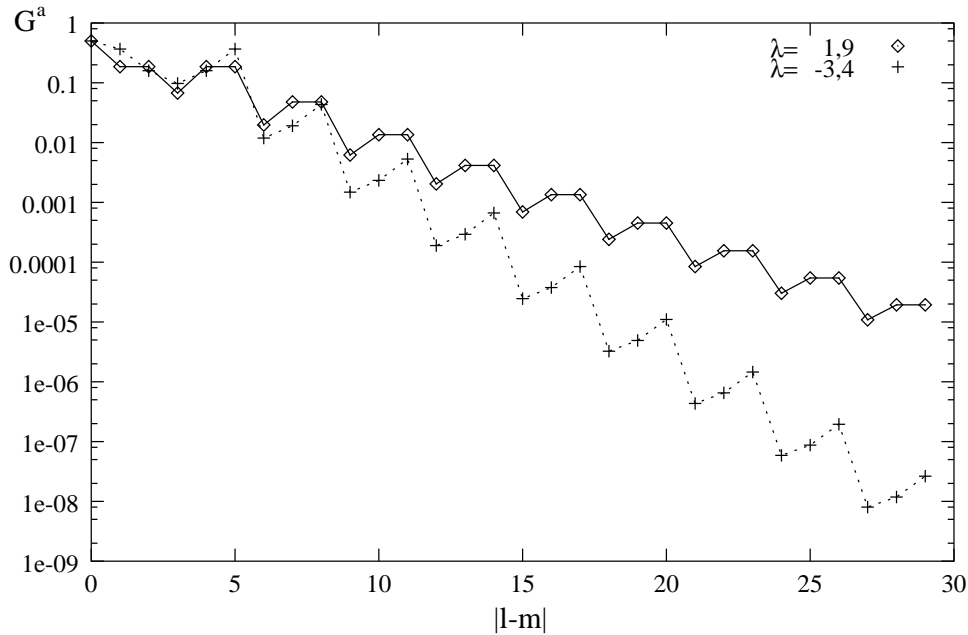


Abbildung 3.11.: Der Betrag der Greensfunktion  $|G^a(\lambda, l, m)|$  zu  $\alpha = \frac{1}{3}$  in Abhängigkeit von  $|l - m|$  über mehrere Perioden des magnetischen Übergitters logarithmisch angetragen.  $\lambda$  ist jeweils angegeben.

In den Fällen, für die  $m = l \pm hq$  gilt, tritt im Zähler von (3.74) die Adjunkte  $A_{l,l}$  von  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$  auf, sie hängt nicht von  $\mu$  ab. Deshalb ist es möglich, die  $d\mu$  Integration in (3.74) explizit durchzuführen, das Ergebnis hängt wie  $e^{-|h|}$  von  $h$  ab (B.8). Es liegt daher nahe, daß sich auch  $G^a(\lambda, l, m)$  näherungsweise wie  $e^{-|h|}$  verhält.

Diese Vermutung wird durch die numerische Rechnung bestätigt. Das Konvergenzverhalten wird deutlich, wenn man  $|G^a(\lambda, l, m)|$  logarithmisch gegen  $|l - m|$  anträgt, wie in Abbildung 3.11 dargestellt. Die Punkte mit  $m = l + i + hq$  lassen sich in dieser Antragung zumindest für  $|l - m| > q$  jeweils durch eine Gerade verbinden.

Die Elemente von  $G^a(\lambda, l, m)$  konvergieren damit zumindest im Mittel wie

$$G^a(\lambda, l, m) \sim e^{-|l-m|}. \quad (3.75)$$

## 4. Störstellen im Kristall

Im letzten Kapitel wurde die Greensfunktion des Azbel–Harper–Hofstadter Modells hergeleitet und diskutiert. Mit Hilfe dieser Ergebnisse soll nun der Einfluß eines Fremdatoms im Kristallgitter auf das Spektrum des Systems berechnet werden.

Die Methode zur Berechnung von Störstellenniveaus im Kristallgitter mit Hilfe der Resolventen von  $\mathbf{H}^a$  stammt ursprünglich von Kostner und Slater aus dem Jahr 1954 [Kos1] [Kos2]. Eine sehr gute Einführung in die Störungsrechnung mit Hilfe der Greensfunktion, auch für Kristallgitter, wird in [Eco] gegeben. Die Idee, dieses Verfahren auf das Azbel–Harper–Hofstadter Modell zu übertragen, hatte Gustav Obermair im Jahr 1996. In der Diplomarbeit von Michael Klein [Kle] wurden erste numerische Ergebnisse dieser Rechnungen vorgestellt.

Im nun folgenden Abschnitt soll zunächst die Störungsrechnung an periodischen Systemen erklärt werden. Durch die einfache Form des Störterms im Hamiltonoperator läßt sich die Auswirkung eines Fremdatoms auf das Spektrum leicht bestimmen: Zusätzliche erlaubte Energien, sogenannte Störstellenniveaus, treten auf. Daraufhin wird die Störungsrechnung im Tight–Binding–Modell vorgeführt und im Anschluß auf das Azbel–Harper–Hofstadter–Modell angewandt.

### 4.1. Die Greensfunktion des gestörten Systems

Der Hamiltonoperator für ein Elektron im Kristallgitter mit einem Fremdatom müßte strenggenommen analog zum Tight–Binding–Hamiltonian aus den einzelnen Hamiltonoperatoren jedes Gitteratoms berechnet werden (siehe Abschnitt 2.1). Im Folgenden wählen wir einen einfacheren, aus plausiblen Überlegungen hergeleiteten Hamiltonoperator.

#### 4. Störstellen im Kristall

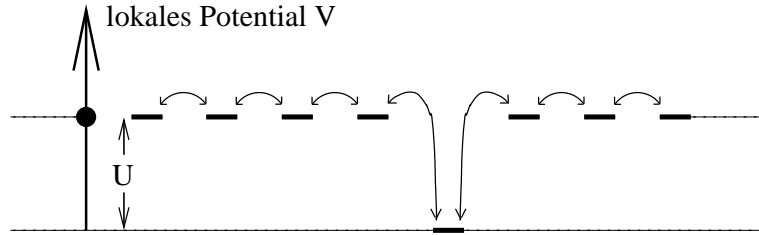


Abbildung 4.1.: Im Modell wird eine Störstelle im Kristall (i.A. ein Fremdatom) beschrieben, indem das lokale Potential  $V$  am Ort  $\vec{l}$  um die Energie  $U$  verändert wird.

Ein Band in einem Festkörper setzt sich aus den Orbitalen aller Gitteratome zusammen. Das Atom am Gitterplatz  $\vec{l}$  einer Störstelle unterscheidet sich von allen anderen dadurch, daß das Orbital, das zum Band beiträgt um die Energie  $U$  gegenüber allen anderen verschoben ist. Das Gitterpotential am Ort  $\vec{l}$  wird im Modell entsprechend verändert (siehe Abbildung 4.1). Der Hamiltonoperator des gestörten Systems läßt sich damit als

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1$$

mit dem Störterm

$$\mathbf{H}_1 = |\vec{l}\rangle U \langle \vec{l}| \quad (4.1)$$

darstellen.  $\mathbf{H}_0$  entspricht dabei dem Hamilton-Operator des ungestörten Modells (2.12) oder (2.30).

Ausgehend von der Greensfunktion  $\mathbf{G}_0$  des ungestörten Systems wird die Resolvente des gestörten Systems berechnet:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\lambda) &= (\lambda - \mathbf{H})^{-1} \\ &= (\lambda - \mathbf{H}_0 - \mathbf{H}_1)^{-1} \\ &= \left( (\lambda - \mathbf{H}_0) \left( 1 - (\lambda - \mathbf{H}_0)^{-1} \mathbf{H}_1 \right) \right)^{-1} \\ &= (1 - \mathbf{G}_0(\lambda) \mathbf{H}_1)^{-1} \mathbf{G}_0(\lambda). \end{aligned}$$

Mit von Neumannschen Reihe

$$(1 - \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1)^{-1} = 1 + \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 + \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 + \dots$$



folgt die Entwicklung von  $\mathbf{G}(\lambda)$ , die sogenannte Dyson–Reihe:

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0 + \dots \quad (4.2)$$

$$= \mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 (\mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0 + \dots) \quad (4.3)$$

$$= \mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 \mathbf{G}. \quad (4.4)$$

Die Greensfunktion des gestörten Systems ist also durch eine Integralgleichung vollständig bestimmt.

Zur weiteren Rechnung wird die sogenannte  $\mathbf{T}$ –Matrix

$$\mathbf{T}(\lambda) := \mathbf{H}_1 \mathbf{G}(\lambda) (\lambda - \mathbf{H}_0)$$

definiert. Sie läßt sich als Reihenentwicklung in den bekannten Operatoren  $\mathbf{G}_0$  und  $\mathbf{H}_1$  darstellen:

$$\mathbf{T} = \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0 \mathbf{H}_1 + \dots \quad (4.5)$$

Mit Hilfe von  $\mathbf{T}$  läßt sich die Greensfunktion des gestörten Systems  $\mathbf{G}$  ausdrücken als

$$\mathbf{G}(\lambda) = \mathbf{G}_0(\lambda) + \mathbf{G}_0(\lambda) \mathbf{T}(\lambda) \mathbf{G}_0(\lambda). \quad (4.6)$$

Wegen der einfachen Struktur von  $\mathbf{H}_1$  in (4.1) kann  $\mathbf{T}$  mit (4.5) leicht berechnet werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(\lambda) &= \mathbf{H}_1 \mathbf{G}(\lambda) (\lambda - \mathbf{H}_0) \\ &= \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0(\lambda) \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0(\lambda) \mathbf{H}_1 \mathbf{G}_0(\lambda) \mathbf{H}_1 + \dots \\ &= |\vec{l}\rangle U \langle \vec{l}| + |\vec{l}\rangle U \langle \vec{l}| \mathbf{G}_0(\lambda) |\vec{l}\rangle U \langle \vec{l}| \\ &\quad + |\vec{l}\rangle U \langle \vec{l}| \mathbf{G}_0(\lambda) |\vec{l}\rangle U \langle \vec{l}| \mathbf{G}_0(\lambda) |\vec{l}\rangle U \langle \vec{l}| + \dots \\ &= |\vec{l}\rangle U \left( 1 + U \mathbf{G}_0(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) + (U \mathbf{G}_0(\lambda, \vec{l}, \vec{l}))^2 + \dots \right) \langle \vec{l}| \\ &= |\vec{l}\rangle \frac{U}{1 - U \mathbf{G}_0(\lambda, \vec{l}, \vec{l})} \langle \vec{l}|. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Dabei wurde:

$$\mathbf{G}_0(\lambda, \vec{m}, \vec{m}') := \langle \vec{m} | \mathbf{G}_0(\lambda) | \vec{m}' \rangle$$

definiert.

#### 4. Störstellen im Kristall

Durch Einsetzen von (4.8) in (4.6) läßt sich die Greensfunktion des gestörten Systems sofort angeben:

$$\mathbf{G}(\lambda, \vec{m}, \vec{m}') = \mathbf{G}_0(\lambda, \vec{m}, \vec{m}') + U \frac{\mathbf{G}_0(\lambda, \vec{m}, \vec{l}) \mathbf{G}_0(\lambda, \vec{l}, \vec{m}')}{1 - U \mathbf{G}_0(\lambda, \vec{l}, \vec{l})}. \quad (4.9)$$

Das Spektrum von  $\mathbf{H}$  ergibt sich direkt aus den Eigenschaften der Greensfunktion: Alle  $\lambda$ , für die  $\mathbf{G}$  nicht definiert ist, sind erlaubte Energien des gestörten Systems. Die Resolvente des gestörten Systems (4.9) hat Singularitäten für die Energien, für die auch die Resolvente des ungestörten Systems singular wird. Das Spektrum des ungestörten Systems wird also in dem des gestörten Systems enthalten sein.

Zusätzlich treten Pole von  $\mathbf{G}$  bei den Energien  $\varepsilon_s$  auf, für die gilt:

$$\mathbf{G}_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{l}) = \frac{1}{U}. \quad (4.10)$$

Diese  $\varepsilon_s$  sind isolierte Eigenwerte von  $\mathbf{H}$ . Im Vorgriff auf spätere Rechnungen soll hier erwähnt werden, daß (4.10) im Tight-Binding-Modell genau eine Lösung hat, im Fall des Modellsystems mit angelegtem Magnetfeld genau  $q$  verschiedene Lösungen. Diese zusätzlichen Energien werden durch die gestörte Periodizität des Systems erlaubt. Die Störstellenniveaus müssen außerhalb eines Bandes liegen, denn im Band hat die Greensfunktion einen endlichen Imaginärteil, die Bedingung (4.10) kann also nicht erfüllt werden.

Um das Störstellenniveau mit der Energie  $\varepsilon_s$  weiter zu charakterisieren, benötigen wir das Residuum von  $\mathbf{G}(\varepsilon_s, \vec{m}, \vec{m}')$  an der Stelle  $\varepsilon_s$ . Weil der Nenner von (4.9) bei  $\lambda = \varepsilon_s$  eine einfache Nullstelle hat, ist dieses Residuum gegeben durch [Jän]:

$$\text{Res}(\mathbf{G}(\varepsilon_s, \vec{m}, \vec{m}')) = - \frac{\mathbf{G}_0(\varepsilon_s, \vec{m}, \vec{l}) \mathbf{G}_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{m}')}{\mathbf{G}'_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{l})}, \quad (4.11)$$

wobei  $\mathbf{G}'_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{l})$  die Ableitung von  $\mathbf{G}_0(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  nach  $\lambda$  an der Stelle  $\varepsilon_s$  ist. Mit (3.4) kann die Entartung des Störstellenniveaus mit der Energie  $\varepsilon_s$  berechnet werden:

$$f_s = \int \text{Res}(\mathbf{G}(\varepsilon_s, \vec{m}, \vec{m})) d\vec{m}.$$

Die Greensfunktion ist auf dem Gitter definiert, deshalb kann  $f_s$  durch eine Summe aus-

gedrückt werden [Eco]:

$$\begin{aligned}
 f_s &= \sum_{\vec{m}} \text{Res}(\mathbf{G}(\varepsilon_s, \vec{m}, \vec{m})) \\
 &= -\frac{1}{\mathbf{G}'_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{l})} \sum_{\vec{m}} \mathbf{G}_0(\varepsilon_s, \vec{m}, \vec{l}) \mathbf{G}_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{m}) \\
 &= -\frac{1}{\mathbf{G}'_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{l})} \sum_{\vec{m}} \langle \vec{l} | \mathbf{G}_0 \mathbf{G}_0 | \vec{l} \rangle \\
 &= \langle \vec{l} | \frac{(\lambda - \mathbf{H})^{-1} (\lambda - \mathbf{H})^{-1}}{(\lambda - \mathbf{H})^{-2}} | \vec{l} \rangle \\
 &= 1.
 \end{aligned}$$

Jedes isolierte Niveau  $\varepsilon_s$  ist also nicht entartet. Deswegen läßt sich mit (3.3) der zu  $\varepsilon_s$  korrespondierende Eigenzustand berechnen [Eco]:

$$\Psi_s = \sum_{\vec{m}} \frac{\mathbf{G}_0(\varepsilon_s, \vec{m}, \vec{l})}{\sqrt{-\mathbf{G}'_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{l})}} |\vec{m}\rangle, \quad (4.12)$$

wobei  $\mathbf{G}'_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{l}) < 0$  (3.66) gilt. Die Elemente der Greensfunktion nehmen, im Fall mit Magnetfeld zumindest im Mittel, mit wachsendem  $|\vec{l} - \vec{m}|$  exponentiell ab (siehe (3.75) und Abbildung 3.9). Die Wellenfunktionen sind also am Ort der Störstelle maximal und verschwinden im Unendlichen. Die Zustände zu den Störstellenniveaus sind damit lokalisiert.

#### 4.1.1. Die Zustandsdichte des gestörten Systems

Wie erläutert, enthält das Spektrum des gestörten Systems alle Eigenwerte des ungestörten. Die Lage dieser Eigenwerte im Spektrum wird durch das Fremdatom nicht beeinflußt. Die Störstelle hat aber Auswirkungen auf die Zustandsdichte des gestörten Systems.

Die Zustandsdichte  $\rho_0$  des ungestörten Systems über dem Band ist durch den Imaginärteil der Greensfunktion  $-\frac{1}{\pi} \Im \mathbf{G}_0^+$  (3.5) gegeben. Mit (4.9) läßt sich die Zustandsdichte  $\rho$  des gestörten Systems berechnen:

$$\rho(\varepsilon, \vec{m}) = -\frac{1}{\pi} \Im \left\{ \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{m}, \vec{m}) + U \frac{\mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{m}, \vec{l}) \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{m})}{1 - U \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l})} \right\}$$

#### 4. Störstellen im Kristall

Offensichtlich ist die Zustandsdichte nun vom Ort abhängig. Die Elemente der Greensfunktion  $\mathbf{G}_0(\varepsilon, \vec{m}, \vec{l})$  nehmen sowohl im Tight–Binding–Modell als auch im Azbel–Harper–Modell, mit wachsendem  $|\vec{m} - \vec{l}|$  ab. Deshalb wird die Auswirkung eines Fremdatoms auf die Zustandsdichte am Ort der Störstelle  $\vec{l}$  am stärksten sein. Wie in Anhang C (Gleichung (C.2)) gezeigt wird, gilt

$$\rho(\varepsilon, \vec{l}) = \frac{\rho_0(\varepsilon)}{|1 - U\mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l})|^2}. \quad (4.13)$$

Mit den Eigenschaften der Greensfunktion für das Tight–Binding–Modell (Gleichungen (3.16) bis (3.19)) bzw. für das Azbel–Harper–Modell ((3.58) bis (3.61)) lassen sich aus (4.13) die Grenzwerte der Zustandsdichte des gestörten Systems an den Bandkanten berechnen (siehe (C.5)):

$$\lim_{|P(\varepsilon)| \rightarrow 4} \rho(\varepsilon, \vec{l}) = 0. \quad (4.14)$$

Gleiches gilt für den Grenzwert der Zustandsdichte im Zentrum des Bandes, bei  $P(\varepsilon_z) = 0$ . Hier hatte die Zustandsdichte des ungestörten Systems eine Singularität (vergleiche (C.8)); im Gestörten dagegen gilt

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_z} \rho(\varepsilon, \vec{l}) = 0. \quad (4.15)$$

Die Zustandsdichte des gestörten Systems verschwindet also zu den Bandkanten hin. Daraus folgt mit (3.15), daß die Greensfunktion des gestörten Systems an den Bandkanten im Gegensatz zu der des ungestörten nicht divergiert. Zudem ist  $\rho(\varepsilon_{ps_z}, \vec{l}, \vec{l}) = 0$  und damit nicht mehr singulär. Durch das Einfügen eines Fremdatoms in das Kristallgitter verliert die Zustandsdichte am Ort des Fremdatoms charakteristische Eigenschaften zweidimensionaler Systeme.

Einzig die Van–Hoove–Singularität im Bandzentrum bleibt erhalten. Für ihre Existenz genügt es, daß die Ableitung der Zustandsdichte im Band divergiert.

Wie bereits erwähnt, hat (4.10) innerhalb des Bandes keine Lösung, denn  $\mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l})$  hat einen nicht verschwindenden Imaginärteil. Es kann aber ein lokales Maximum der Zustandsdichte für

$$1 - U\Re\left(\mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l})\right) \approx 0 \quad (4.16)$$

aufzutreten, besonders dann, wenn

$$\left( U \mathfrak{S} \mathbf{G}_0^+ (\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) \right)^2 \ll 1$$

gilt. Diese lokalen Maxima, sie werden Resonanzniveaus genannt [Eco], treten, besonders bei schwachen Störstellen als scharfe Peaks auf.

Mit dem Betrag der Wellenfunktion zum Störstellenniveau  $\varepsilon_s$  (4.12) läßt sich der Beitrag des isolierten Eigenwertes zur Zustandsdichte berechnen, denn es gilt [Eco]

$$\begin{aligned} \rho(\varepsilon, \vec{m}) &= \psi_s^*(\vec{m}) \psi_s(\vec{l}) \delta(\varepsilon - \varepsilon_s) \\ &= - \frac{\mathbf{G}_0(\varepsilon_s, \vec{m}, \vec{l}) \mathbf{G}_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{m}')}{\mathbf{G}'_0(\varepsilon_s, \vec{l}, \vec{l})} \delta(\varepsilon - \varepsilon_s). \end{aligned}$$

Die Zustandsdichte ist normiert,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\varepsilon, \vec{m}) d\varepsilon = 1,$$

deshalb muß der Beitrag des Störstellenniveaus zur Zustandsdichte die Dichte über dem Band reduzieren.

In den nun folgenden beiden Abschnitten wird die Lösung von (4.10) für das Tight–Binding und das Azbel–Harper–Hofstadter–Modell berechnet und diskutiert.

## 4.2. Störstellen im Tight–Binding–Modell

Mit den Berechnungen aus dem vorangehenden Abschnitt sind die Auswirkungen einer Störstelle im Tight–Binding–Modell einfach zu bestimmen. Setzen wir die Diagonalelemente der Greensfunktion des ungestörten Tight–Binding–Modells (3.8) in die Gleichung (4.10) ein,

$$\frac{2}{\pi \varepsilon_s} \mathbf{K} \left( \frac{4}{\varepsilon_s} \right) = \frac{1}{U}, \quad (4.17)$$

so erhalten wir eine Bedingung für die zusätzlichen Eigenwerte, die Störstellenniveaus.

Die Störstellenniveaus werden mit (4.17) numerisch bestimmt (siehe Abbildung 4.2). Aus den Eigenschaften (3.16) bis (3.24) der Diagonalelemente von  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  lassen sich die

#### 4. Störstellen im Kristall

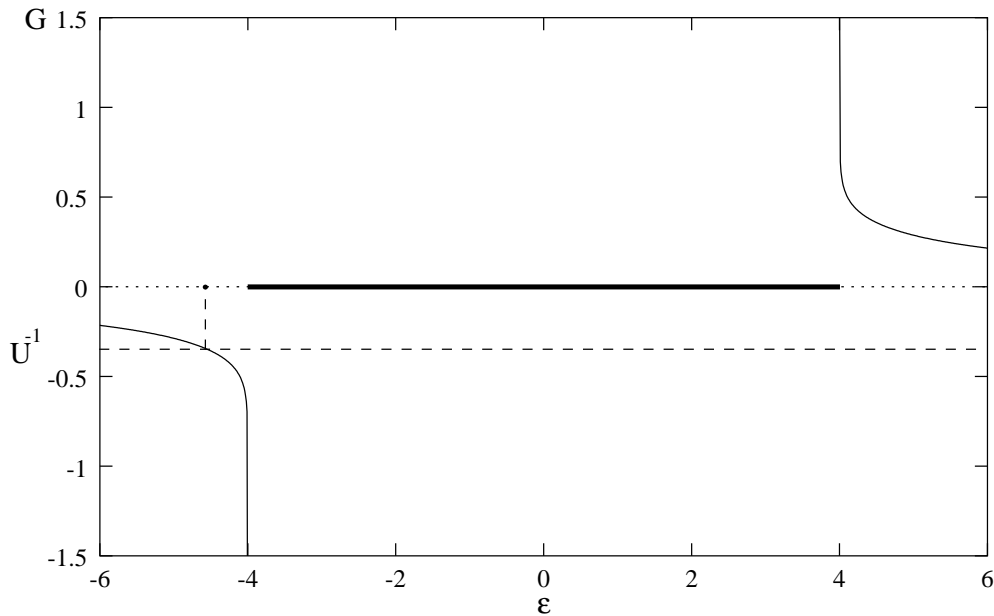


Abbildung 4.2.: Bestimmung der Störstellenniveaus im zweidimensionalen Tight-Binding-Modell: durch die Bedingung (4.17) entsteht ein zusätzliches Niveau außerhalb des Bandes des ungestörten Systems.

Störstellenniveaus im zweidimensionalen Tight-Binding-Modell bereits charakterisieren, zur Veranschaulichung dient Abbildung 4.2:

1. Wegen (3.24) sind die Diagonalelemente der Resolventen immer streng monoton fallend, unterhalb des Bandes sind sie immer negativ, oberhalb immer positiv (3.16). Für positive  $U$  hat deshalb (4.17) genau eine Lösung oberhalb des Bandes, negative  $U$  ergeben genau ein Störstellenniveau unterhalb des Bandes.
2. Weil  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  streng monoton fällt, wächst der Abstand des Störstellenniveaus von der Bandkante stetig mit dem Betrag von  $U$ , wie in Abbildung 4.3 gezeigt.
3. Die Diagonalelemente der Greensfunktion divergieren an den Bandkanten (3.18), deshalb liefert (4.17) für alle  $U$  eine reelle Lösung. Selbst infinitesimal kleine Störungen der Periodizität bewirken ein abgespaltenes Störstellenniveau, auch wenn diese Abspaltung infinitesimal klein werden kann.

Das Auftreten isolierter Niveaus bei sehr schwachen Störstellen ist charakteristisch für zweidimensionale Systeme. In drei Dimensionen haben die Diagonalelemente der Greensfunktion einen endlichen Grenzwert. Wie in Abschnitt 3.1.2 erläutert,

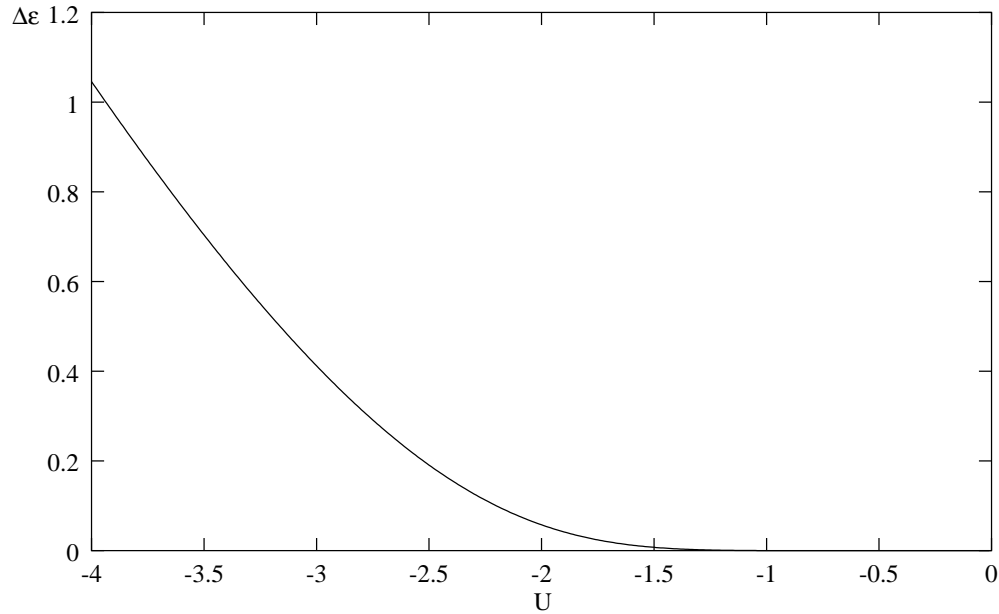


Abbildung 4.3.: Der Abstand des Störstellenniveaus von der Bandkante  $\Delta\varepsilon$  beim zweidimensionalen Tight-Binding-Modell. Angetragen ist der Abstand in Abhängigkeit von der Störstellenstärke  $U$  für negative  $U$ .

wird ihr Betrag an den Bandkanten maximal. Das führt zu einer minimalen Störstellenstärke  $U_{min}$ : nur für  $U > U_{min}$  spalten Störstellenniveaus vom Band ab.

4.  $\mathbf{G}^t(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  ist punktsymmetrisch zum Ursprung (3.17). Deshalb gilt für die Störstellenniveaus:

$$\varepsilon_s(-U) = -\varepsilon_s(U).$$

Es genügt also, nur Akzeptoren ( $U < 0$ ) zu betrachten, alle Aussagen gelten (evtl. mit umgekehrten Vorzeichen) ebenso für Donatoren.

Die Zustandsdichte des gestörten Tight-Binding-Modells am Ort der Störstelle lässt sich berechnen, indem man Real- und Imaginärteil der Greensfunktion zu  $\mathbf{H}^t$ , (3.11) bzw. (3.13), in (4.13) einsetzt:

$$\rho(\varepsilon, \vec{l}) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{1}{2\pi} \mathbf{K}'\left(\frac{\varepsilon}{4}\right)}{\left(1 \pm \frac{U}{2\pi} \mathbf{K}\left(\frac{\varepsilon}{4}\right)\right)^2 + \left(\frac{U}{2\pi} \mathbf{K}'\left(\frac{\varepsilon}{4}\right)\right)^2}$$

Das Ergebnis ist in Abbildung 4.4 für verschiedene Werte von  $U$  dargestellt. Für schwache  $U$  ist die Zustandsdichte des gestörten Systems der des ungestörten noch sehr ähnlich,

#### 4. Störstellen im Kristall

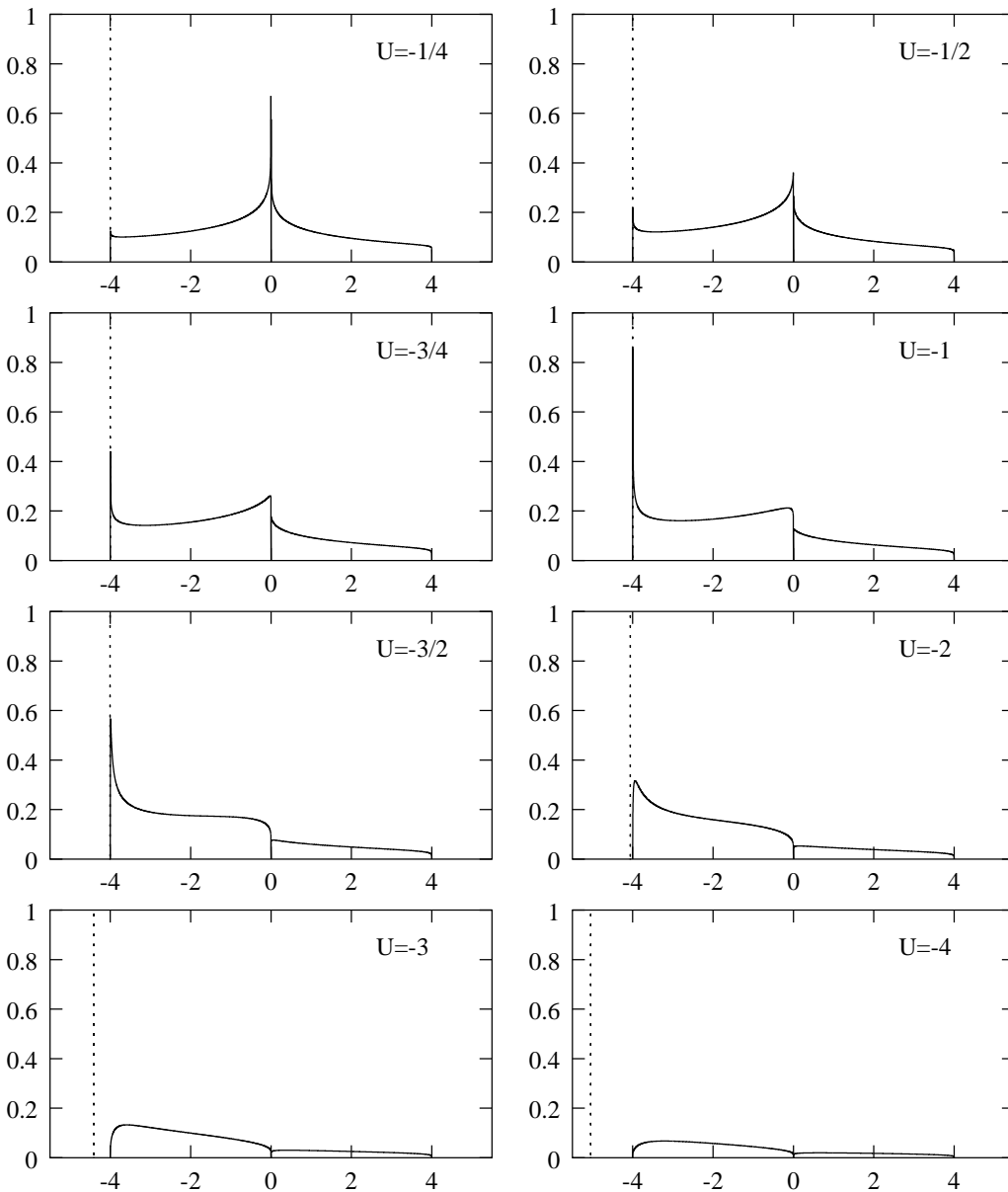


Abbildung 4.4.: Die Zustandsdichte des zweidimensionalen Tight-Binding-Modells ( $V = 1$ ) am Ort der Störstelle nach (4.13) für verschiedene Störstellenstärken  $U$ . Angetragen ist die Zustandsdichte gegen die Energie. Der Beitrag der Störstelle zur Zustandsdichte ist als  $\delta$ -Peak (gestrichelt) eingezeichnet, dieser liegt immer außerhalb des Bandes, was erst ab  $U < -2$  in der Grafik aufgelöst wird. Ein Vergleich mit Abbildung 3.2 zeigt deutlich, wie die außerhalb des Bandes liegende Störstelle die Zustandsdichte über dem Band verändert.



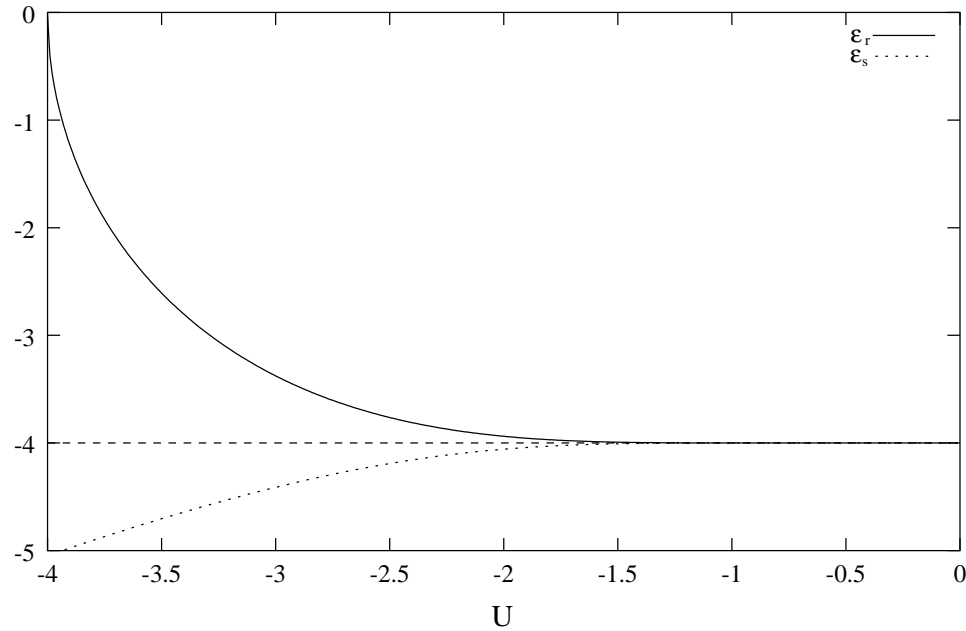


Abbildung 4.5.: Lage des Resonanz- und Störstellenniveaus ( $\varepsilon_r$  bzw.  $\varepsilon_s$ ) im Tight-Binding-Modell ( $V = 1$ ) in Abhängigkeit von der Störstellenstärke  $U < 0$ , angegeben in Einheiten der skalierten Energie.

mit wachsendem  $U$  verschwindet diese Ähnlichkeit. Das Integral über die Zustandsdichte wird immer kleiner, da der Beitrag des Störstellenniveaus mit  $U$  wächst. Auffällig ist die Asymmetrie der Zustandsdichte: Die Elektronen scheinen Energien nahe dem Störstellenniveau zu bevorzugen. Diese Asymmetrie wird hauptsächlich durch die Resonanzen im Band verursacht. Resonanzniveaus treten immer dann auf, wenn (4.16) gilt. Im Falle des Tight-Binding Modells also für alle  $\varepsilon = \varepsilon_r$  mit

$$\frac{1}{2\pi} \mathbf{K}(\varepsilon_r, \vec{l}, \vec{l}) \approx \frac{1}{U}.$$

Resonanzniveaus sind demnach nur für  $|U| \leq 4$  möglich (3.21). Analog zu den Störstellenniveaus wächst der Abstand des Resonanzniveaus von der Bandkante mit  $|U|$  (siehe Abbildung 4.5). Besonders scharfe Resonanzniveaus treten, wie beschrieben, für

$$\left( U \frac{1}{2\pi^2} \mathbf{K}'\left(\frac{\varepsilon}{4}\right) \right)^2 \ll 1$$

auf. Sie sind also für kleine  $U$  am stärksten ausgeprägt, denn die Zustandsdichte des ungestörten Systems wird an den Bandkanten minimal.

#### 4. Störstellen im Kristall

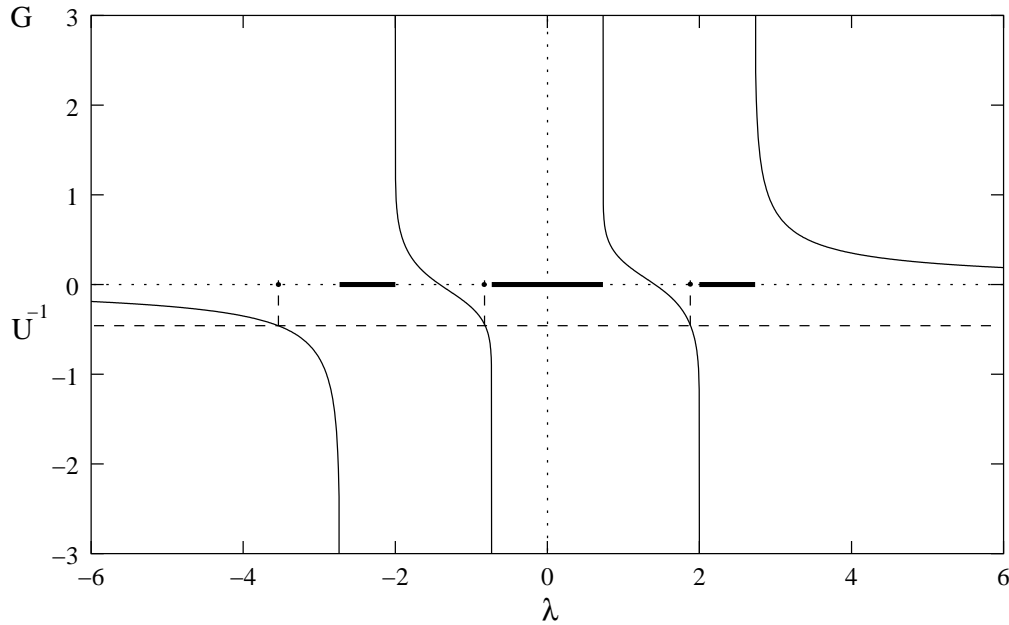


Abbildung 4.6.: Bestimmung der Störstellenniveaus für  $\alpha = \frac{1}{3}$  und einer Störstellenstärke  $U = 2,4$ . Die durchgezogenen dicken Linien entsprechen den magnetischen Unterbändern, die Punkte zeigen die Lage der Störstellenniveaus. Unterhalb jedes magnetischen Unterbandes entsteht durch die Fehlstelle ein diskretes Niveau.

### 4.3. Störstellen im Azbel–Harper–Modell

Nach der Störungsrechnung am Tight–Binding–Modell soll das in Abschnitt 4.1 beschriebene Verfahren nun auf das Azbel–Harper–Hofstadter Modell angewendet werden. So wird es möglich, die Auswirkungen eines Fremdatoms im Kristall bei angelegtem Magnetfeld zu bestimmen. Die Rechnungen in 4.1 setzen keine spezielle Eigenschaft der Greensfunktion oder des Hamilton–Operators des ungestörten Systems voraus, die Ergebnisse sind deshalb ohne Einschränkungen auf das Azbel–Harper–Modell übertragbar.

Das Spektrum des Hofstadter–Modells mit einer Störstelle setzt sich, wie erläutert, aus dem Spektrum des Modells für einen reinen Kristall und zusätzlichen Eigenwerten bei den Energien  $\varepsilon_s$  zusammen. Diese werden bestimmt durch

$$\mathbf{G}^a(\varepsilon_s, m_0, m_0) = \frac{1}{U},$$

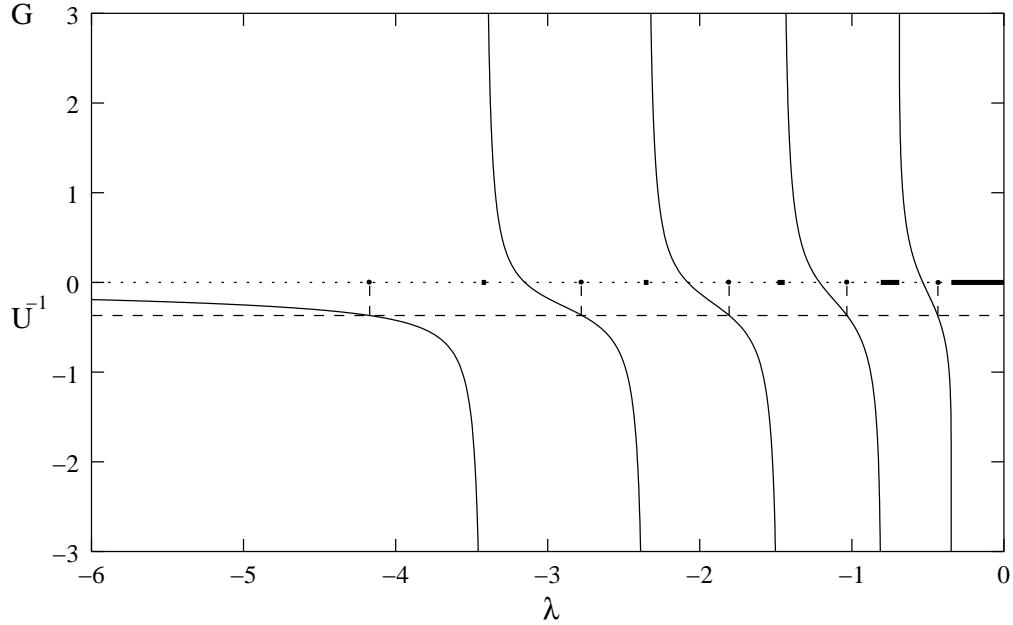


Abbildung 4.7.: Wie Abbildung 4.6 zu  $\alpha = \frac{1}{10}$ . Der besseren Übersichtlichkeit halber wurde nur der negative Energiebereich dargestellt  $\lambda < 0$ .

mit (3.50) ergibt sich:

$$\frac{2}{\pi q} \frac{1}{P(\epsilon_s)} \frac{dP(\epsilon_s)}{d\epsilon_s} \mathbf{K} \left( \frac{4}{P(\epsilon_s)} \right) = \frac{1}{U}. \quad (4.18)$$

Aus (4.18) werden die Störstellenniveaus numerisch oder grafisch bestimmt, wie in den Abbildungen 4.6 und 4.7 dargestellt. Aufgrund der Struktur der Diagonalelemente der Greensfunktion (siehe Abschnitt 3.2.3) lassen sich einige grundsätzliche Aussagen über die Störstellenniveaus im behandelten System treffen:

- Unterhalb des untersten magnetischen Unterbandes fällt  $\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  streng monoton (3.66) mit dem Wertebereich  $]0, -\infty[$  (3.65) (3.61). Für  $U < 0$  hat (4.18) also genau eine Lösung unterhalb des magnetischen Unterbandespektrums.
- Zwischen zwei nicht entarteten magnetischen Unterbändern fällt  $\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  streng monoton (3.66) mit dem Wertebereich  $]\infty, -\infty[$  (3.61), die Bedingung (4.18) hat zwischen den beiden Bändern genau eine Lösung.
- Bei zwei entarteten magnetischen Unterbändern verschwinden sowohl der Real- als auch der Imaginärteil von  $\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  am „Berührungspunkt“ der beiden Bänder

#### 4. Störstellen im Kristall

(3.62) (3.63). Die Bedingung für die Existenz eines Störstellenniveaus wird also nicht erfüllt.

- Oberhalb des magnetischen Unterbandspektrums fällt  $\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  streng monoton mit dem Wertebereich  $] \infty, 0[$  (3.61) (3.64). Falls die Störstellenstärke  $U$  größer als 0 ist, hat (4.18) hier wiederum genau eine Lösung.

In jeder Bandlücke mit endlicher Breite hat (4.18) also genau eine Lösung. Zwischen zwei nicht entarteten Bändern liegt immer genau ein Störstellenniveau, zwischen zwei entarteten Bändern keines. Zusätzlich tritt für  $U < 0$  noch eine erlaubte Energie unterhalb des untersten magnetischen Unterbandes auf, für  $U > 0$  eine oberhalb des obersten magnetischen Unterbandes.

Wenn zu gegebenem  $\alpha$  keine entarteten Bänder auftreten, hat das gestörte Systems also  $q$  zusätzliche Niveaus. Das eine Störstellenniveau, das im Fall ohne Magnetfeld auftritt wird also an jedes (isolierte) magnetische Unterband projiziert.

Wegen der Punktsymmetrie von  $\mathbf{G}(\lambda, m_0, m_0)$  gilt

$$\begin{aligned}\mathbf{G}(-\varepsilon_s, m_0, m_0) &= -\mathbf{G}(\varepsilon_s, m_0, m_0) \\ \Rightarrow \varepsilon_s(U) &= -\varepsilon_s(-U).\end{aligned}$$

Die Symmetrie der Diagonalelemente der Greensfunktion gilt also auch für die Störstellenniveaus.

Wie im Fall ohne Magnetfeld divergiert  $K\left(\frac{4}{P(\lambda)}\right)$  an jeder Bandkante. Die Störstellenniveaus treten also schon bei infinitesimal schwachen Störstellen auf.

##### 4.3.1. Lage zu den Bandkanten

Die Lage eines Störstellenniveaus im Hofstadter–Spektrum ist durch (4.18) vollständig bestimmt. Sie ist eine Funktion des Hofstadterschen Spurpolynoms und dessen Ableitung. Eine analytische Lösung von (4.18) bei gegebenem  $\alpha$  und  $U$  ist nicht möglich, deshalb muß die Lage der Störstellenniveaus aus (4.18) numerisch bestimmt werden.

Im folgenden Abschnitt soll die Lage der Störstellenniveaus zu den Bandkanten, die Ionisierungsenergien der einzelnen Niveaus, in Abhängigkeit von  $U$  und  $\alpha$  untersucht werden.

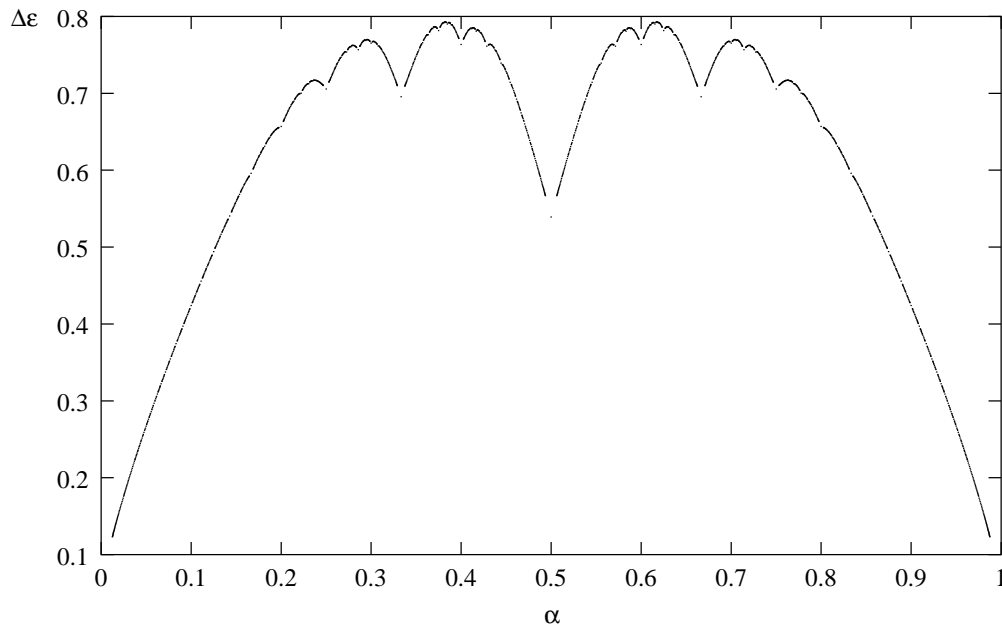


Abbildung 4.8.: Abstand  $\Delta\varepsilon$  des niedrigsten Störstellenniveaus von der jeweils untersten Bandkante zu jeweils gegebenem  $\alpha$  bei einer Störstellenstärke von  $U = -2$ , angegeben in Einheiten der skalierten Energie. Die Berechnung wurde für einzelne Werte von  $\alpha = \frac{p}{q}$  mit  $2 \leq q \leq 80$  und  $1 \leq p \leq q - 1$  durchgeführt.

Es zeigt sich für negative  $U$ , daß ein Störstellenniveau unabhängig von der Flußdichte des angelegten Magnetfeldes auftritt, das Donator–Niveau des untersten magnetischen Unterbandes. Dieses Niveau bleibt selbst für  $\alpha = 0$  erhalten.

Betrachten wir zunächst die Lage dieses untersten Störstellenniveaus für  $U < 0$ . Die Ionisierungsenergie  $\Delta\varepsilon$ , ist in Abbildung 4.8 in Abhängigkeit von  $\alpha$  angetragen. Die resultierende Kurve ist dem Verlauf des Randes des magnetischen Unterbandspektrums sehr ähnlich.

In Abbildung 4.9 wird ein Ausschnitt für  $\alpha \approx \frac{1}{2}$  gezeigt:  $\Delta\varepsilon$  verläuft stetig, aber nicht stetig differenzierbar in  $\alpha$ , entsprechend dem Rand des Unterbandspektrums [Hof2].

Für verschwindendes  $\alpha$  müßte die Ionisierungsenergie des untersten Störstellenniveaus in den energetischen Abstand der Störstelle im Tight–Binding Fall übergehen.

Der Grenzwert der Ionisierungsenergie des untersten Störstellenniveaus  $\Delta\varepsilon$  für  $\alpha \rightarrow 0$  ist analytisch nicht bestimmbar. Numerisch läßt er sich aber sehr genau abschätzen: Mit Hilfe der Näherung (3.56) von  $\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{l}, \vec{l})$  für große  $q$  läßt sich  $\Delta\varepsilon$  bis  $q = 2000$  bestimmen. Die Approximation (3.56) ist für so große Werte von  $q$  und  $|\lambda| > 1$  sehr genau, denn die magnetischen Unterbänder sind hier im Rahmen der Rechengenauigkeit punktförmig.

#### 4. Störstellen im Kristall

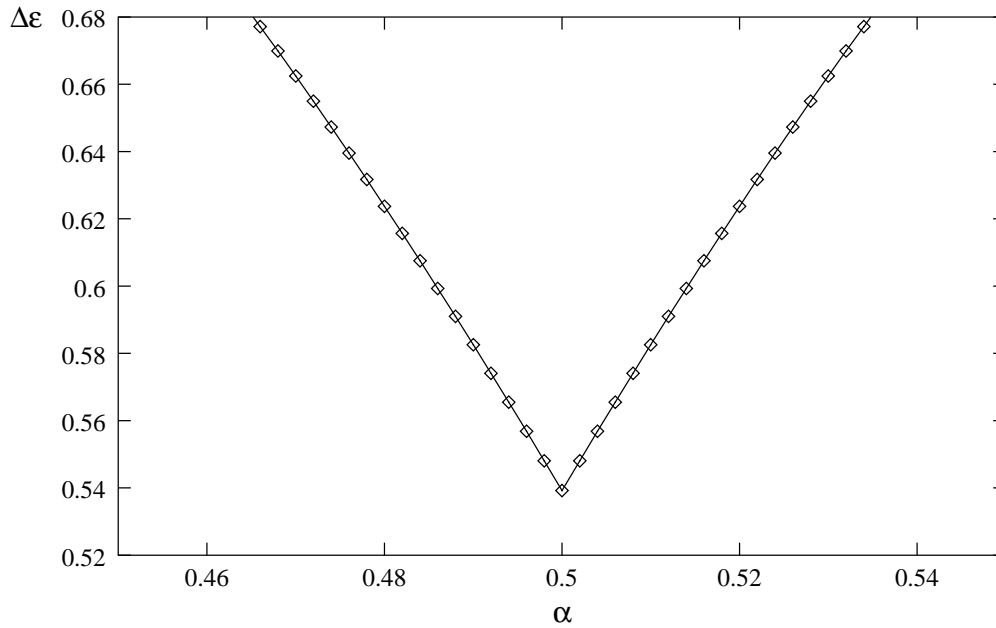


Abbildung 4.9.: Ein Ausschnitt aus Abbildung 4.8. Die Ionisierungsenergie verläuft bei  $\alpha = \frac{1}{2}$  stetig, aber nicht stetig differenzierbar. (Berechnung mit  $q \leq 500$ )

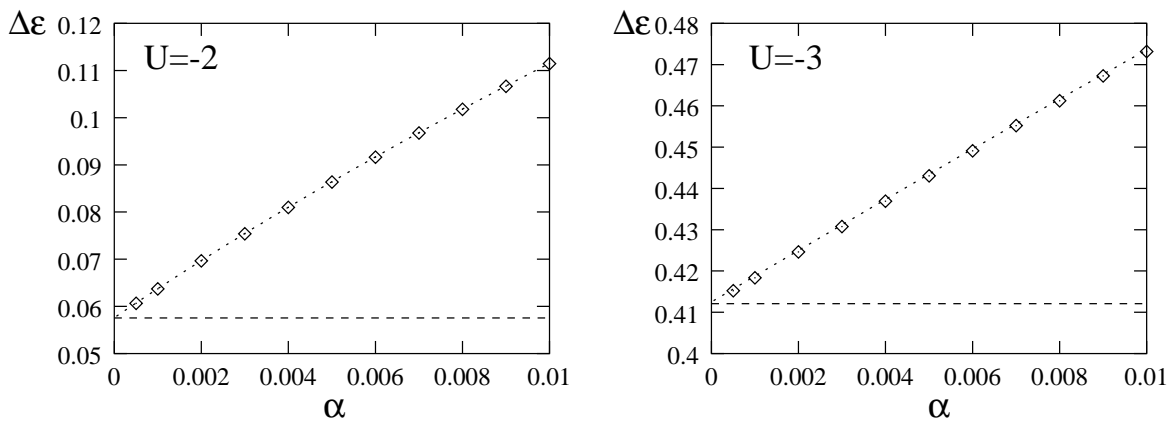


Abbildung 4.10.: Wie Abbildung 4.8 jedoch ein Ausschnitt bei kleinen  $\alpha$  ( $\alpha \geq \frac{1}{2000}$ ) zu Störstellenstärken  $U = -2$  (links) bzw.  $U = -3$  (rechts). Eingezeichnet sind jeweils die errechneten Werte von  $\Delta\varepsilon$ , ein Fit dieser Werte mit einer Parabel vierten Grades (punktiert) sowie die Ionisierungsenergie für  $\alpha = 0$  (gestrichelt). Die Ionisierungsenergie des niedrigsten Niveaus geht für kleine  $\alpha$  in die Ionisierungsenergie des Stöstellenniveaus im Tight-Binding-Modell über, die Abweichung des Fits bei  $\alpha = 0$  vom tatsächlichen Wert beträgt  $1,0 \cdot 10^{-5}$  ( $U = -2, 0$ ) bzw.  $2,0 \cdot 10^{-5}$  ( $U = -3, 0$ ).

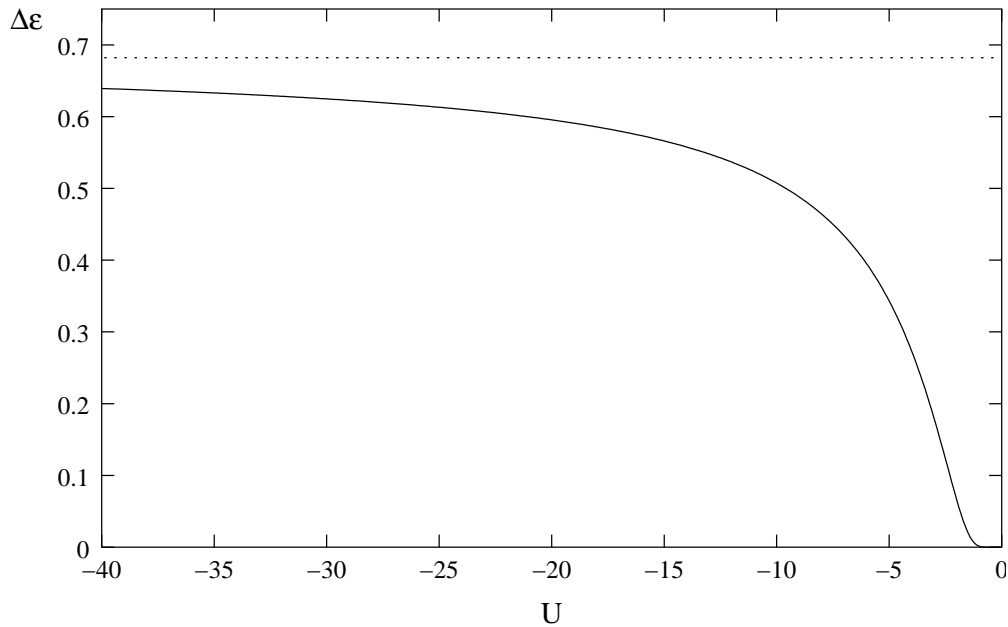


Abbildung 4.11.: Die Ionisierungsenergie  $\Delta\varepsilon$  des Störstellenniveaus in der ersten Bandlücke bei  $\alpha = \frac{1}{3}$  in Abhängigkeit von  $U$ : Die Diagonalelemente von  $\mathbf{G}^a$  haben in den Bandlücken eine Nullstelle, deshalb strebt der Abstand gegen einen endlichen Grenzwert (ca. 0,68216).

Um den Grenzwert zu berechnen wird die durch  $\Delta\varepsilon$  zu  $\alpha = \frac{1}{2000}, \frac{1}{1000}, \frac{1}{500} \dots$  gegebene Kurve mit einem Polynom vierten Grades in  $\alpha$  gefittet, wie in Abbildung 4.10 für  $U = -2$  und  $U = -3$  dargestellt. Das Polynom nimmt für  $\alpha = 0$  einen endlichen Wert an. Dieser stimmt bis auf einen Fehler  $\leq 2,0 \cdot 10^{-5}$  mit der Ionisierungsenergie des Niveaus im Tight–Binding–Modell überein (in Abbildung 4.10 als gestrichelte Linie eingezeichnet).

Für diese eine Größe trifft der bekannte Ausspruch „natura non facit saltus“ von Linné also zu.  $\Delta\varepsilon$  ändert sich selbst bei verschwindendem Magnetfeld kontinuierlich mit  $\alpha$ .

Zwischen zwei nicht entarteten magnetischen Unterbändern tritt jeweils genau ein Störstellenniveau auf. Im Folgenden soll die Lage dieses Niveaus bei gegebenem  $\alpha$  in Abhängigkeit von  $U$ ,  $\lambda$  und den lokalen Eigenschaften des Spektrums untersucht werden. Wir gehen dabei wieder von einem Donator ( $U < 0$ ) aus, die Ergebnisse gelten analog auch für Akzeptoren.

Die Ionisierungsenergie in Abhängigkeit von  $U$  verhält sich innerhalb einer Unterbandlücke anders als im Fall ohne Magnetfeld: Die Diagonalelemente von  $\mathbf{G}^a$  haben in den Bandlücken jeweils eine Nullstelle. Für  $|U| \rightarrow \infty$  wird  $\Delta\varepsilon$  also gegen einen endlichen Grenzwert streben. Abbildung 4.11 zeigt dieses Verhalten am Beispiel der ersten Band-

#### 4. Störstellen im Kristall

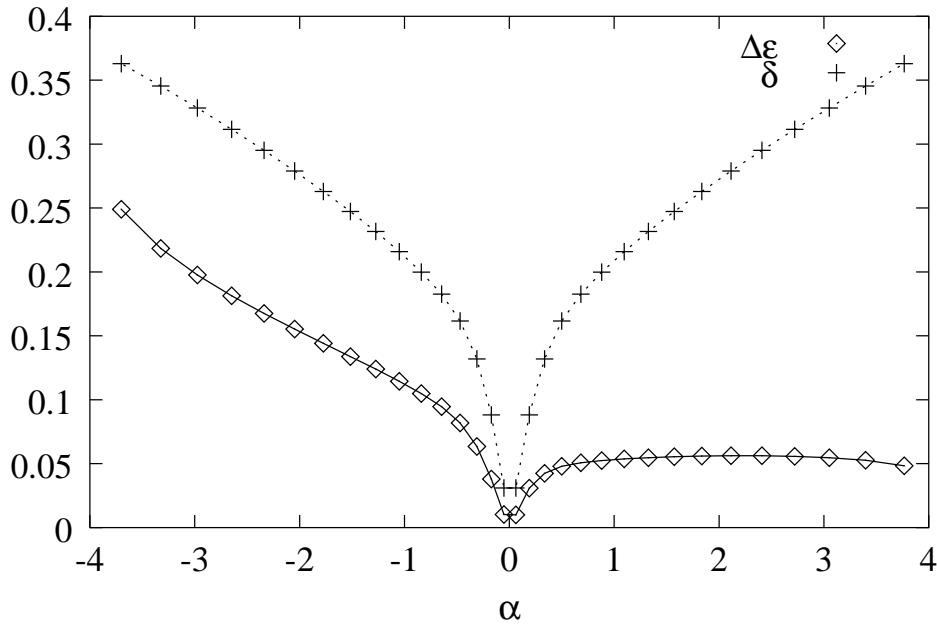


Abbildung 4.12.: Die Ionisierungsenergie der Störstellenniveaus  $\Delta \epsilon$  und die Breite der jeweiligen Bandlücke  $\delta$  für  $\alpha = \frac{1}{33}$  und  $U = -5.0$  in Abhängigkeit von  $\lambda$ .

lücke im Spektrum von  $\alpha = \frac{1}{3}$ . Der Abstand der Nullstelle von  $\mathbf{G}^a(\lambda, l, l)$  von der Unterkante des mittleren magnetischen Unterbandes beträgt ca. 0,68216 in Einheiten der skalierten Energie.

Sowohl die Störstellenniveaus als auch die Bänder sind durch das Hofstadtersche Spurpolynom  $P(\lambda)$  eindeutig bestimmt. Deshalb muß ein direkter Zusammenhang zwischen den magnetischen Unterbändern bzw. den Unterbandlücken und den Störstellenniveaus bestehen. In der grafischen Darstellung zeigt sich diese Abhängigkeit: Die Ionisierungsenergie  $\Delta \epsilon$  in einer Bandlücke und die Breite der jeweiligen Bandlücke sind für  $\alpha = \frac{1}{33}$  und  $U = -5.0$  in Abbildung 4.12 dargestellt. Die Ähnlichkeit beider Kurven, zumindest wenn man die Bereiche  $\lambda < 0$  und  $\lambda > 0$  isoliert betrachtet fällt auf. Für andere Werte von  $\alpha$  und  $U$  ist dieses Verhalten reproduzierbar. Abbildung 4.13 zeigt als Beispiel eine komplexere Bandstruktur ( $\alpha = \frac{10}{33}$ ), auch hier verlaufen  $\delta$  und  $\Delta \epsilon$  nahezu synchron.

Die Ionisierungsenergie im Spektrum hängt zusätzlich von  $U$  ab: Mit wachsendem  $|U|$  strebt sie kontinuierlich gegen den oben erwähnten Grenzwert (vergleiche Abbildung 4.11). In Abbildung 4.14 ist  $\Delta \epsilon(\lambda)$  für verschiedene Werte von  $U$  angetragen. Ein Vergleich mit der Breite der Bandlücken (siehe Abbildung 4.12) zeigt, daß die „Verzerrung“ von  $\Delta \epsilon(\lambda)$  gegenüber  $\delta(\lambda)$  mit wachsendem  $U$  zunimmt.



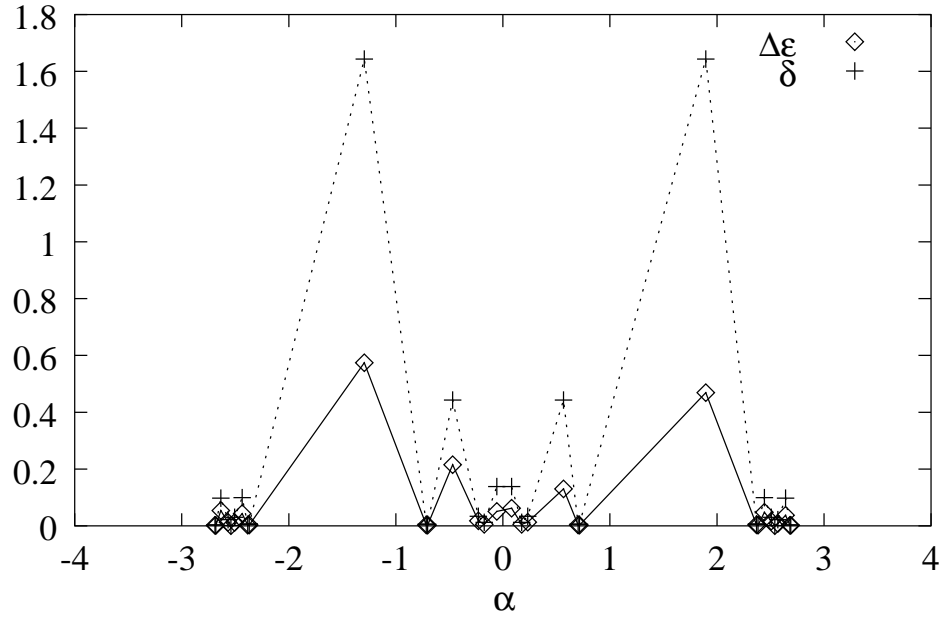


Abbildung 4.13.: Wie Abbildung 4.12,  $\alpha = \frac{10}{33}$ ,  $U = -5.0$ .

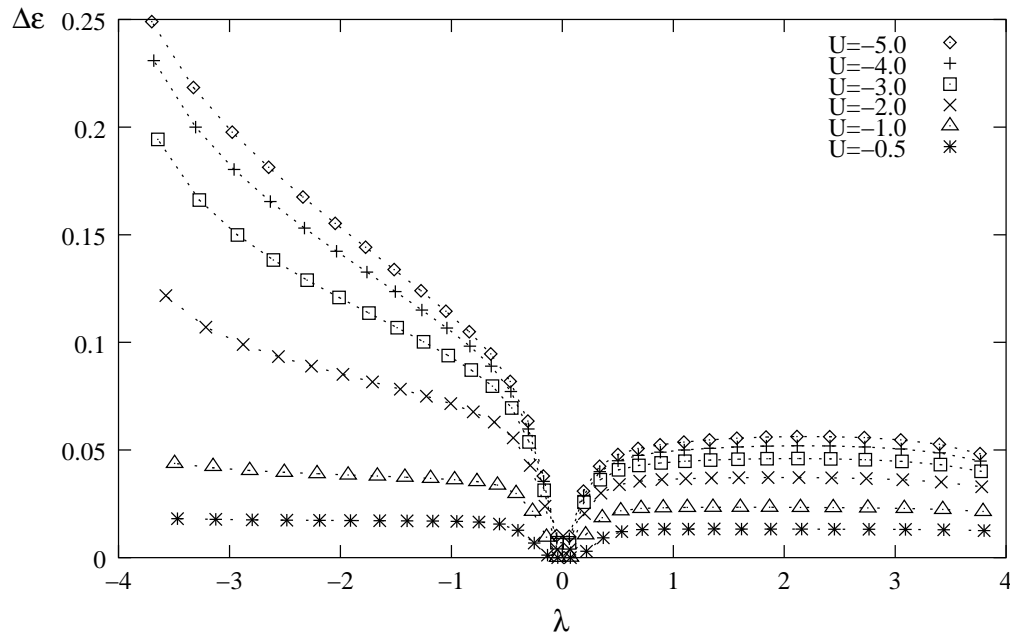


Abbildung 4.14.: Die Ionisierungsenergie  $\Delta\varepsilon$  der Störstellenniveaus in den Bandlücken zu  $\alpha = \frac{1}{33}$ , bei verschiedenen Werten von  $U < 0$  in Anhängigkeit von der Lage im Spektrum.

#### 4. Störstellen im Kristall

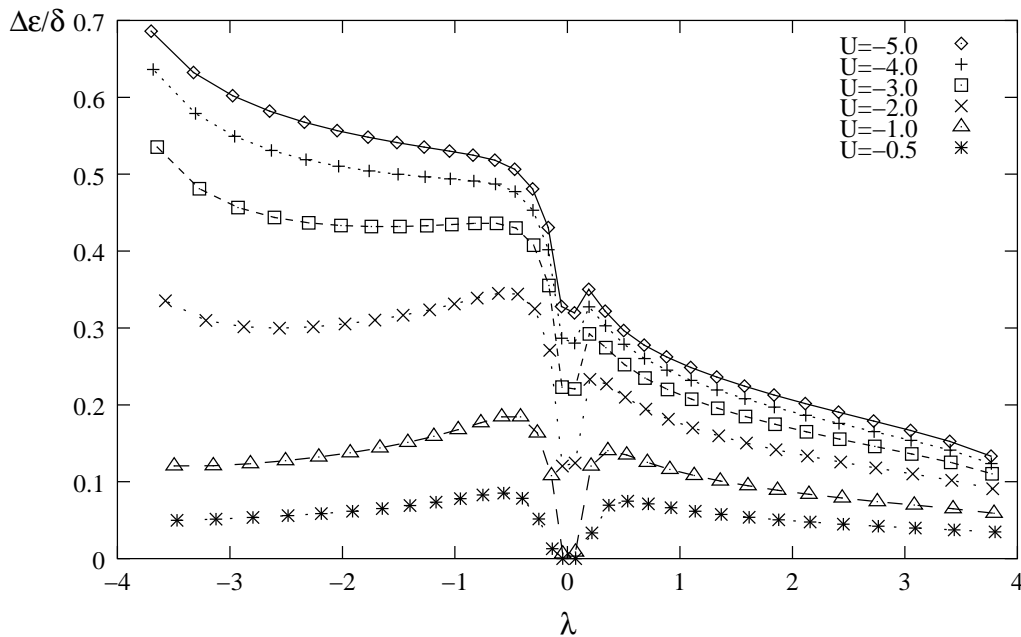


Abbildung 4.15.: Wie Abbildung 4.14, die Ionisierungsenergie wurde auf die Breite der jeweiligen Unterbandlücke normiert.

Michael Klein zeigt in seiner Diplomarbeit [Kle], daß die Ionisierungsenergie in jeder Unterbandlücke, normiert auf deren Breite, für pure-cases bei großem  $U$  zumindest stückweise linear von  $\alpha$  abhängt. Diese normierte Ionisierungsenergie  $\frac{\Delta\varepsilon}{\lambda}$  ist in Abbildung 4.15 bei  $\alpha = \frac{1}{33}$  für verschiedene Werte von  $U$  dargestellt. Allgemein ist der von Klein festgestellte Zusammenhang selbst bei pure-cases nicht gegeben.

Abbildung 4.15 zeigt eine Besonderheit des betrachteten Systems: Für Werte von  $U \leq -3$  kann  $\frac{\Delta\varepsilon}{\lambda}$  bei  $\alpha = \frac{1}{33}$  größer als  $\frac{1}{2}$  werden. Das Störstellenniveau liegt dann näher an der Oberkante des nächst niedrigeren Bandes als an der Unterkante des nächst höheren. Aus einem Donator ist damit ein Akzeptor geworden. Das Störstellenniveau verändert sein physikalisches Verhalten in Abhängigkeit von  $\lambda$  und, wie nähere Untersuchungen gezeigt haben, von  $\alpha$ .

#### Das Störstellenspektrum

Aus den Beobachtungen im vorangehenden Abschnitt läßt sich das Spektrum des gestörten Systems berechnen. Abbildung 4.16 zeigt den Hofstadter-Schmetterling mit einer Störstelle der Stärke  $U = -1$ . Der Unterschied zum Spektrum des ungestörten Modells

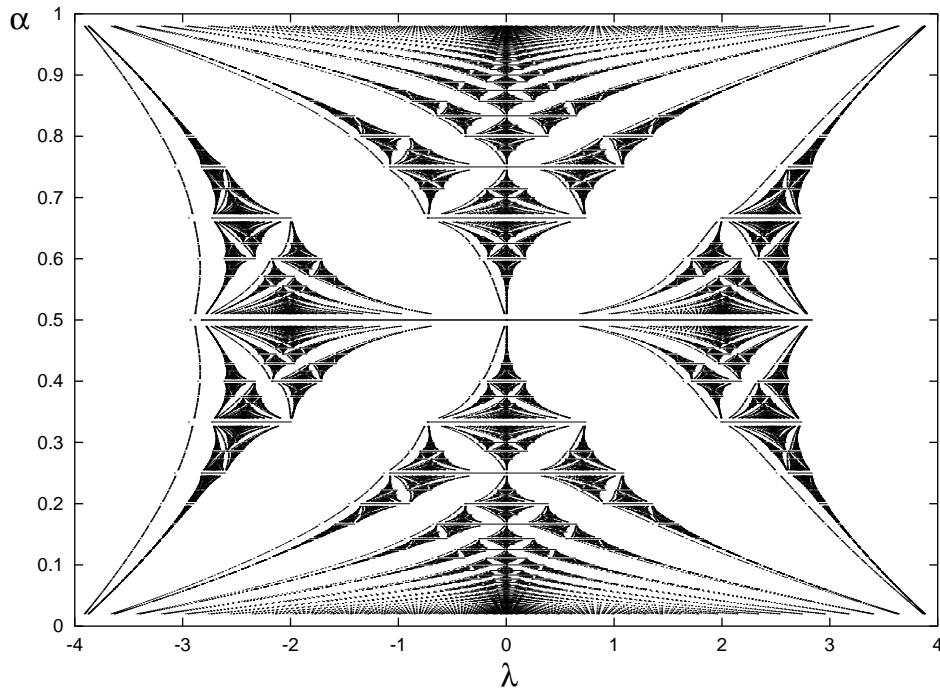


Abbildung 4.16.: Das Gesamtspektrum des Gestörten Azbel–Harper–Hofstadter Modells bei einer Störstellenstärke von  $U = -1.0$ . Im Vergleich mit dem ungestörten Spektrum (Abbildung 2.1) sind die Störstellenniveaus deutlich zu erkennen.

ist leicht beschrieben. Es besteht aus den Eigenwerten des ungestörten Systems und zusätzlich noch einem Störstellenniveau für jedes nicht entartete Unterband. Abbildung 4.17 zeigt dieses “Störstellenspektrum”, die Differenz zwischen dem ungestörten und dem gestörten Hofstadter-Spektrum.

Weil bei gegebenem  $\alpha$  und  $U$  sowohl das Spektrum des ungestörten Systems als auch die Störstellenniveaus eindeutig durch das Hofstadtersche Spurpolynom bestimmt sind, muß eine funktionale Beziehung zwischen dem Hofstadter–Schmetterling und dem Störstellenspektrum bestehen. Allerdings ist die Bedingung (4.18) nicht analytisch lösbar. Auch empirisch ist ein direkter Zusammenhang zwischen den Eigenwerten von  $\mathbf{H}^a$  und den Störstellenniveaus nicht erkennbar.

Die Betrachtung des Spektrums mit dem „bloßen Auge“ zeigt, daß die geometrische Struktur des Störstellenspektrums, abgesehen von der Symmetrie, im wesentlichen der des Hofstadter–Schmetterlings entspricht. Vor allen Dingen ist das Störstellenspektrum in gleicher Weise wie das Hofstadterspektrum selbstähnlich. Deshalb müßte es sich, wie von Hofstadter in [Hof2] beschrieben, aus den pure-cases mit  $\alpha = \frac{1}{q}$  konstruieren lassen.

#### 4. Störstellen im Kristall

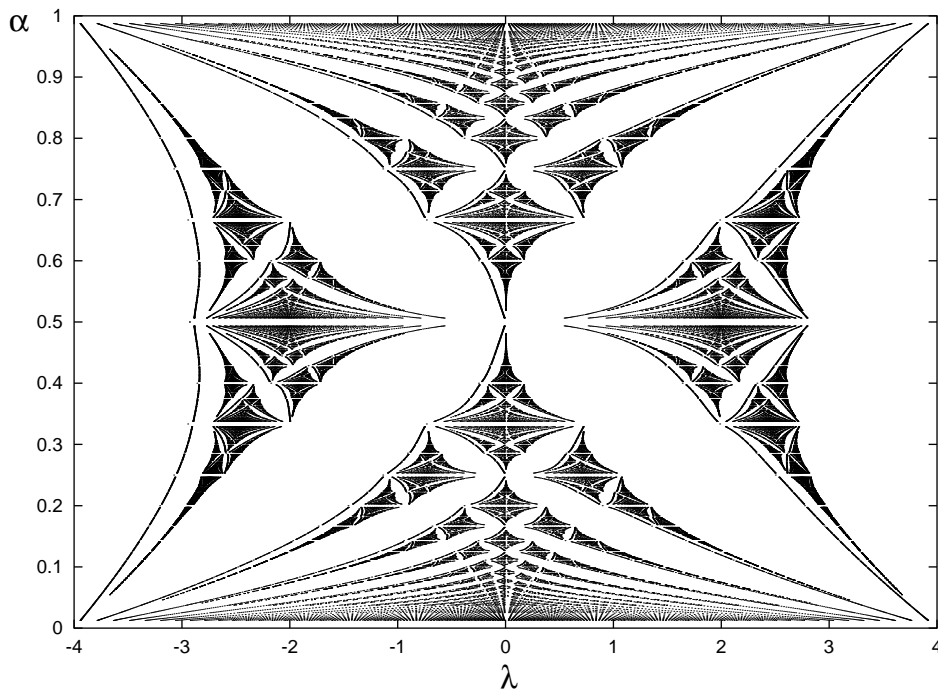


Abbildung 4.17.: Nur die Störstellenniveaus aus Abbildung 4.16

#### Die Zustandsdichte des gestörten Systems

Die Zustandsdichte eines magnetischen Unterbandes im ungestörten Azbel–Harper–Modell entspricht, wie in Abschnitt 3.2.3 beschrieben, der eines Tight–Binding–Bandes mit gestörter Symmetrie. Dementsprechend ist zu erwarten, daß sich die Zustandsdichte eines einzelnen Bandes des Modells mit Magnetfeld bei einem Fremdatom im Kristallgitter ähnlich zu der des Bandes bei  $\alpha = 0$  verhält.

Im Azbel–Harper–Modell wird  $\rho$  bei gegebenem  $\alpha$  und  $U$  durch einsetzen der Greensfunktion über dem Spektrum (Gleichungen (3.51) bis (3.53)) in (4.13) berechnet. In Abbildung 4.18 wird  $\rho$  für verschiedene Werte von  $U$  dargestellt. Wie im Fall ohne Magnetfeld (siehe Abbildung 4.4) nimmt der Beitrag über jedem einzelnen Unterband zur integrierten Zustandsdichte mit wachsendem  $U$  ab. Es fällt auf, daß die Störstelle auf die einzelnen magnetischen Unterbänder unterschiedlich wirkt. Grund dafür ist die Asymmetrie der Resolventen über den Unterbändern.

Bei Energien  $\varepsilon_r$  mit

$$\Re \mathbf{G}_0^{a+}(\varepsilon_r, \vec{l}, \vec{l}) \approx \frac{1}{U}$$

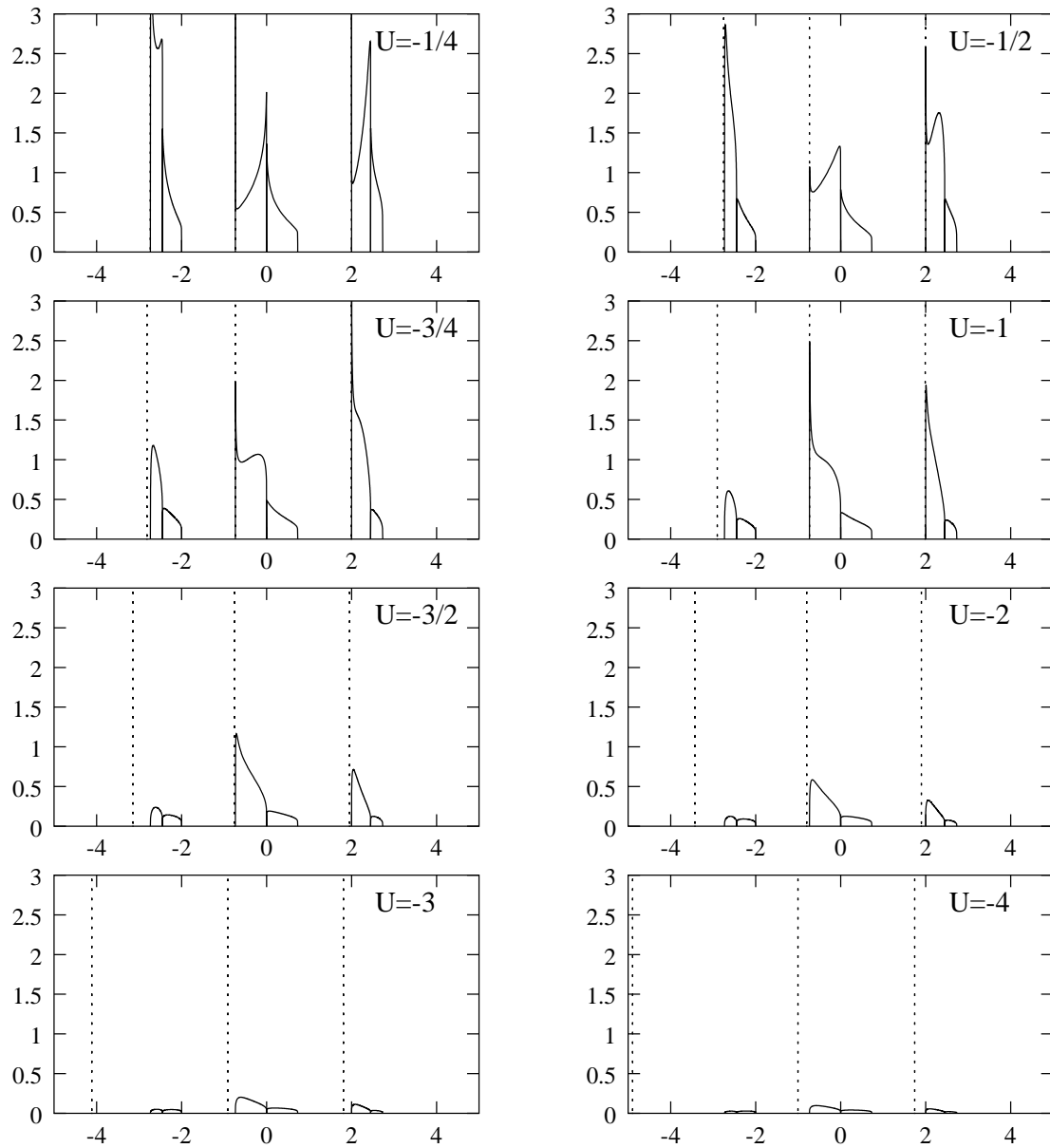


Abbildung 4.18.: Die Zustandsdichte des gestörten Azbel–Harper–Modells bei  $\alpha = \frac{1}{3}$  am Ort des Fremdatoms für verschiedene Störstellenstärken  $U$ . Der Beitrag des Störstellenniveaus zur Zustandsdichte ist als  $\delta$ -Peak (gestrichelt) eingezeichnet. Das Störstellenniveau ist immer vom jeweiligen Unterband abgespalten, dies wird hier zum Teil nicht richtig wiedergegeben.

#### 4. Störstellen im Kristall

treten Resonanzniveaus auf. Dies kann in einem Unterband aber nur erfüllt werden, wenn

$$\frac{1}{U} > \pm \frac{1}{4q} \frac{dP(\varepsilon = \varepsilon_z)}{d\varepsilon}$$

gilt (siehe (3.60)). Es ist also möglich, daß in einzelnen Unterbändern zu gegebenem  $U$  Resonanzniveaus auftreten, in anderen dagegen nicht.

### 4.4. Zwei Störstellen

Im vorherigen Abschnitt haben wir den Einfluß einer Störstelle auf das Modellsystem betrachtet. Nun soll dem System ein weiteres Fremdatom hinzugefügt werden.

Die zwei Fremdatome seien an den Orten  $\vec{l}$  und  $\vec{m}$  lokalisiert, ihre Störstellenstärken sind  $U_{\vec{l}}$  und  $U_{\vec{m}}$ . Jede dieser Störstellen läßt sich mit jeweils einem Störterm  $\mathbf{H}_{\vec{l}}$  und  $\mathbf{H}_{\vec{m}}$  analog zu (4.1) beschreiben. Der Gesamthamiltonian ergibt sich als

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_{\vec{l}} + \mathbf{H}_{\vec{m}}$$

Die Störungsrechnung in Abschnitt 4.1 macht keinen Gebrauch von der speziellen Form der Hamilton-Operators  $\mathbf{H}_0$  des ungestörten Systems oder von der korrespondierenden Resolventen  $\mathbf{G}_0$ . Lediglich die Eigenschaften des Störterms  $\mathbf{H}_1$  werden zur Vereinfachung der Dyson-Reihe genutzt (4.2). Deshalb besteht eine Möglichkeit, die Störungsrechnung mit zwei Fremdatomen im Kristallgitter durchzuführen darin, den Hamiltonoperator des Systems mit einer Störstelle als „ungestörten“ Operator zu betrachten und das System, analog zur Rechnung in Abschnitt 4.1 mit  $\mathbf{H}_{\vec{l}}$  bzw.  $\mathbf{H}_{\vec{m}}$  zu stören. Wie man an den Rechnungen in 4.1 leicht sieht, ist das Problem symmetrisch in  $\vec{l}$  und  $\vec{m}$ , wir definieren deshalb o.B.d.A.:

$$\mathbf{H}_{0\vec{l}} := \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_{\vec{l}}$$

und

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{0\vec{l}} + \mathbf{H}_{\vec{m}}$$

$\mathbf{G}_{0\vec{l}}$  sei die zu  $\mathbf{H}_{0\vec{l}}$  korrespondierende Greensfunktion.

Führt man nun die Störungsrechnung durch, so erhält man die Resolvente von  $\mathbf{H}$ :

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_{0\vec{l}} + \mathbf{G}_{0\vec{l}}|\vec{m}\rangle \frac{U_{\vec{m}}}{1 - U_{\vec{m}}\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\vec{m}, \vec{m})} \langle \vec{m}| \mathbf{G}_{0\vec{l}},$$

wobei die Elemente von  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}$  durch (3.6) gegeben sind. Für ein Element von  $\mathbf{G}$  ergibt sich damit:

$$\mathbf{G}(\lambda, \vec{j}, \vec{k}) = \mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{j}, \vec{k}) + U_{\vec{m}} \frac{\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{j}, \vec{m})\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{k})}{1 - U_{\vec{m}}\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})}. \quad (4.19)$$

Mit Hilfe dieser Greensfunktion sollen nun die Eigenwerte des Systems mit zwei Störstellen berechnet werden. Wie üblich sind alle Energien, für welche die Diagonalelemente von  $\mathbf{G}$  nicht definiert sind, erlaubte Energien von  $\mathbf{H}$ . Um diese zu bestimmen wird  $\mathbf{G}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  zunächst umgeformt:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\lambda, \vec{m}, \vec{m}) &= \mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m}) + U_{\vec{m}} \frac{\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})^2}{1 - U_{\vec{m}}\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})} \\ &= \frac{\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m}) (1 - U_{\vec{m}}\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})) + U_{\vec{m}}\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})^2}{1 - U_{\vec{m}}\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})} \\ &= \frac{\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})}{1 - U_{\vec{m}}\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})} \\ &= \frac{1}{(\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m}))^{-1} - U_{\vec{m}}}. \end{aligned}$$

$\mathbf{G}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  ist nicht definiert, wenn gilt:

1.  $\lambda$  ist Eigenwert von  $\mathbf{H}_0$ , dem Hamiltonoperator des Systems ohne eine Störstelle, da für diese Energien  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}$  nicht definiert ist.
2.  $\lambda = \varepsilon_{\vec{m}}$  mit

$$\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\varepsilon_{\vec{m}}, \vec{m}, \vec{m}) = \frac{1}{U_{\vec{m}}}, \quad (4.20)$$

denn hier hat  $\mathbf{G}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  einen Pol.

An den Polen von  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  nimmt  $\mathbf{G}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  den Wert  $-\frac{1}{U_{\vec{m}}}$  an, die durch (4.10) gegebenen Eigenwerte  $\varepsilon_{\vec{l}}$  von  $\mathbf{H}_{0\vec{l}}$  sind also keine Eigenwerte von  $\mathbf{H}$ .

Zur weiteren Betrachtung beschränken wir uns zunächst auf den Fall, in dem die beiden Fremdatome an direkt benachbarten Gitterplätzen ( $\vec{m} = \vec{l} + (1, 0)$ ) entlang der  $x$ -Achse

#### 4. Störstellen im Kristall

liegen. Mit (4.20) sind die isolierten Niveaus des Systems mit zwei Fremdatomen vollständig bestimmt. Aus den Eigenschaften von  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  lassen sich eine Reihe von Aussagen über die Lösungen von (4.20) treffen:

Der Hamiltonoperator des Systems mit einer Störstelle  $\mathbf{H}_{0\vec{l}}$  hat für negative  $U_{\vec{l}}$  genau ein Störstellenniveau  $\varepsilon_{\vec{l}}$  unterhalb jedes Bandes<sup>1</sup> (siehe Abschnitt 4.1). An der Stelle  $\lambda = \varepsilon_{\vec{l}}$  hat  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  deshalb einen Pol. Der Wertebereich von  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  unterhalb jedes Bandes entspricht daher  $]-\infty, \infty[$ . Die Bedingung (4.20) hat also unterhalb jedes Bandes mindestens eine Lösung  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$ , unabhängig davon, ob ein Magnetfeld angelegt ist oder nicht.

Die Lage des Störstellenniveaus  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$  relativ zum ursprünglichen  $\varepsilon_{\vec{l}}$  läßt sich mit den Grenzwerten von  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  für  $\lambda \rightarrow \varepsilon_{\vec{l}}$  abschätzen:

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow \varepsilon_{\vec{l}} - 0} \mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m}) &= -\infty & \text{und} \\ \lim_{\lambda \rightarrow \varepsilon_{\vec{l}} + 0} \mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m}) &= \infty. \end{aligned}$$

$U_{\vec{m}} < 0$  liefert eine Lösung unterhalb von  $\varepsilon_{\vec{l}}$ ,  $U_{\vec{m}} > 0$  eine Lösung oberhalb von  $\varepsilon_{\vec{l}}$ . Das Störstellenniveau des Systems mit einem Fremdatom wird also für  $U_{\vec{m}} < 0$  abgesenkt, für  $U_{\vec{m}} > 0$  angehoben. Der Betrag dieser Verschiebung wächst mit  $|U_{\vec{m}}|$ .

Der Grenzwert der Zustandsdichte  $\rho_{0\vec{l}}(\varepsilon, \vec{m})$  zu  $\mathbf{H}_{0\vec{l}}$  an der Bandkante mit der Energie  $\varepsilon_k$  wird in Anhang C berechnet (Gleichung (C.9)) als:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \varepsilon_k} \rho_{0\vec{l}}(\varepsilon, \vec{m}) = \rho_0 \left( 1 - \frac{\varepsilon_k^2}{16} \right). \quad (4.21)$$

Das Verhalten von  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  an der Unterkante des jeweiligen Bandes hängt davon ab, ob ein Magnetfeld angelegt ist oder nicht. Im Folgenden sollen beide Szenarien genauer beschrieben werden:

Im Tight–Binding–Modell ist  $|\varepsilon_k| = 4$ , also  $\rho_{0\vec{l}}(\varepsilon, \vec{m}) = 0$ . Mit (3.15) folgt daraus, daß die Resolvente des Tight–Binding–Hamiltonians  $\mathbf{H}^t$ ,  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}^t(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  für  $\lambda \rightarrow \varepsilon_k$  den endlichen Grenzwert

$$\gamma_u := \lim_{\lambda \rightarrow \varepsilon_k} \mathbf{G}_{0\vec{l}}^t(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$$

---

<sup>1</sup>Als „Band“ wird hier sowohl das Tight–Binding–Band, als auch ein magnetisches Unterband bezeichnet.



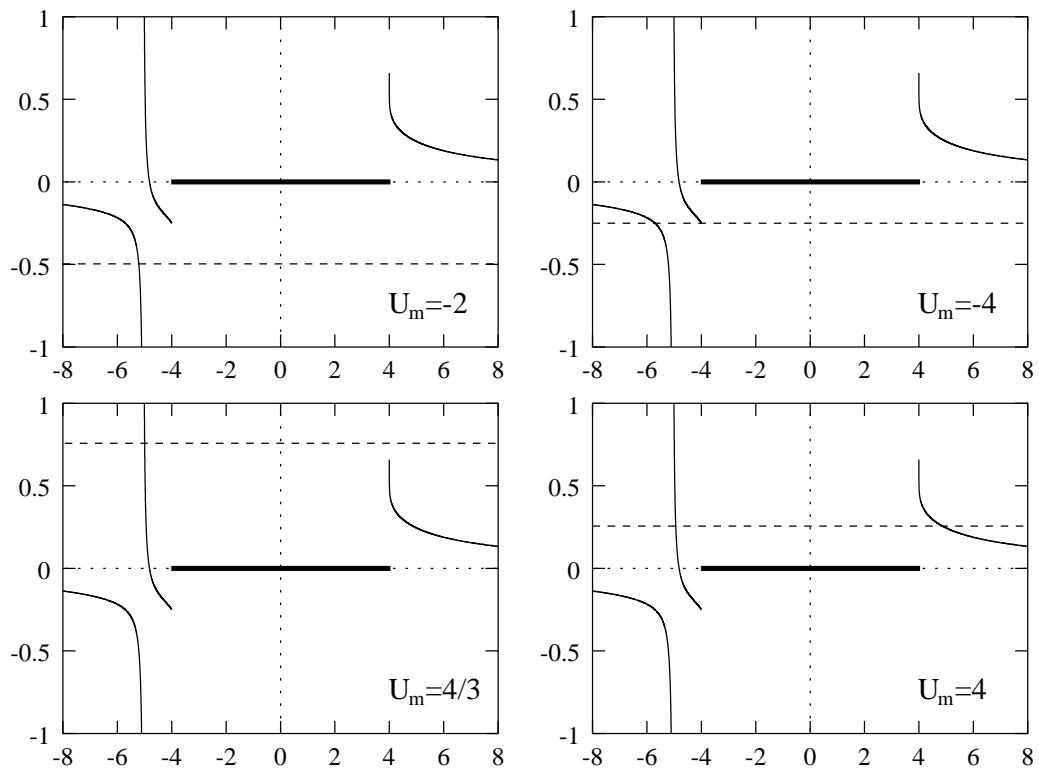


Abbildung 4.19.: Die vier Fälle bei zwei Fremdatomen im Kristall ( $\alpha = 0$ ). Angetragen ist jeweils  $\mathbf{G}_{0l}^t(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  gegen die Energie  $\lambda$ . Für alle Abbildungen wurde  $U_l = -4$  gewählt. Die Schnittpunkte von  $\mathbf{G}_{0l}^t(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  mit der gestrichelten Linie  $\frac{1}{U_m}$  ergeben die Störstellenniveaus.

#### 4. Störstellen im Kristall

an der Unterkante des Bandes annimmt. Entsprechend sei  $\gamma_o$  der Grenzwert an der Oberkante. Wegen (3.15) hängen sowohl  $\gamma_u$ , als auch  $\gamma_o$ , von  $U_{\vec{l}}$  ab, ihre Beträge sind im Allgemeinen nicht gleich. Damit sind im Fall ohne Magnetfeld folgende Szenarien zu unterscheiden (sei o.B.d.A  $U_{\vec{l}} < 0$ ):

1. Für  $U_{\vec{m}} < 0$  hat (4.20)

- genau eine Lösung  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$  unterhalb des Bandes, wenn  $\frac{1}{U_{\vec{m}}} < \gamma_u$  gilt.
- genau zwei Lösungen  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$  und  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(2)}$  unterhalb des Bandes für  $\frac{1}{U_{\vec{m}}} > \gamma_u$ .

2.  $U_{\vec{m}} > 0$  liefert genau eine Lösung  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$  von (4.20) unterhalb des Bandes und zusätzlich ein  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(2)}$  oberhalb des Bandes, falls  $\frac{1}{U_{\vec{m}}} < \gamma_o$  gilt.

Die vier verschiedenen Fälle werden in Abbildung 4.19 dargestellt.

Im Fall eines angelegten Magnetfeldes gilt für die Kanten aller magnetischen Unterbänder  $|\varepsilon_k| < 4$ , der Wert von  $\rho_{0\vec{l}}(\varepsilon_k, \vec{m})$  (4.21) ist also immer endlich,  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}^a(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  divergiert wegen (3.15) an jeder Bandkante. Damit sind hier nur zwei Fälle zu unterscheiden:

1. Für negative  $U_{\vec{m}} < 0$  hat (4.20) genau zwei Lösungen unterhalb jedes magnetischen Unterbandes,  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$  und  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(2)}$ . Dabei liegt  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$  energetisch tiefer als das Störstellenniveau des Systems mit einem Fremdatom  $\varepsilon_{\vec{l}}$ , und  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(2)}$  zwischen  $\varepsilon_{\vec{l}}$  und der Unterkante des jeweiligen magnetischen Unterbandes (siehe Abbildung 4.20).
2.  $U_{\vec{m}} > 0$  liefert genau eine Lösung  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$  unterhalb jedes magnetischen Unterbandes, die gegenüber  $\varepsilon_{\vec{l}}$  angehoben ist. Zusätzlich tritt ein Störstellenniveau  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(2)}$  oberhalb jedes Unterbandes auf.

Zwei Störstellen liefern also im Azbel–Harper–Modell zu gegebenem  $\alpha$  immer genau  $2q$  Störstellenniveaus, falls die  $q$  Unterbänder nicht entartet sind. Entartete Unterbänder reduzieren die Zahl der Störstellenniveaus. Analog zum System mit einer Störstelle hat (4.20) keine Lösung zwischen Unterbändern die sich berühren.

Durch das Einfügen eines Fremdatoms in das Kristallgitter am Gitterplatz  $\vec{l}$  entsteht ein Störstellenniveau  $\varepsilon_{\vec{l}}$  an jedem magnetischen Unterband. Bildlich gesprochen spaltet  $\varepsilon_{\vec{l}}$  durch Hinzufügen eines zweiten Fremdatoms gleichen Typs in die zwei Störstellenniveaus

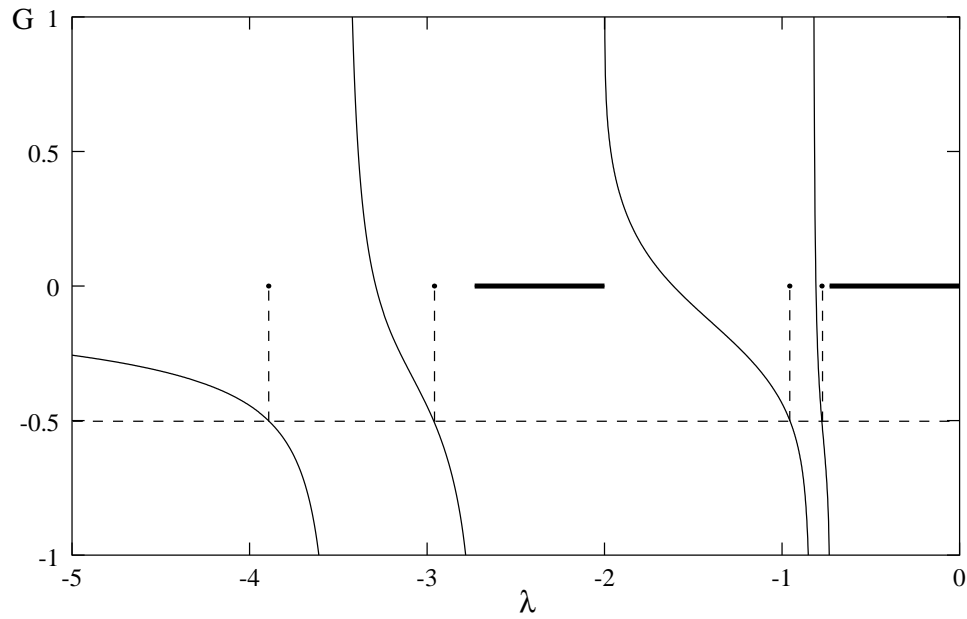


Abbildung 4.20.: Bestimmung der Störstellenniveaus bei zwei Störstellen im System ( $\alpha = \frac{1}{3}$ , nur ein Ausschnitt des Spektrums): Die Störstellen sind an benachbarten Gitterpunkten lokalisiert und gleich stark  $U_{\vec{l}} = U_{\vec{m}} = -2$ . Angetragen ist  $\mathbf{G}_{0\vec{l}}^a(\lambda, \vec{m}, \vec{m})$  in Abhängigkeit von  $\lambda$ . Die Niveaus werden mit Gleichung (4.20) bestimmt.

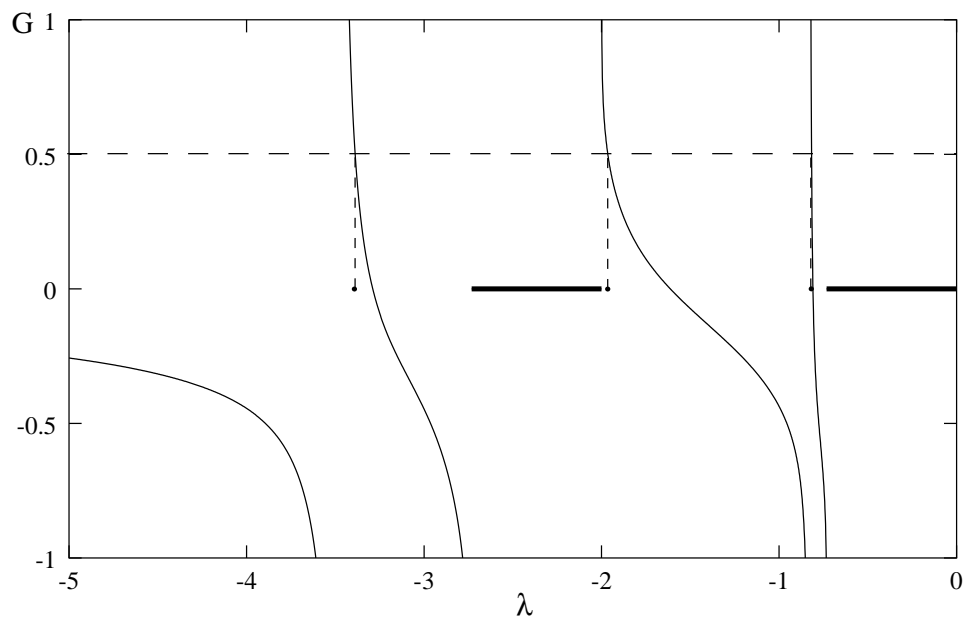


Abbildung 4.21.: Wie Abbildung 4.20 jedoch  $U_{\vec{l}} = -2$  und  $U_{\vec{l}} = 2$

#### 4. Störstellen im Kristall

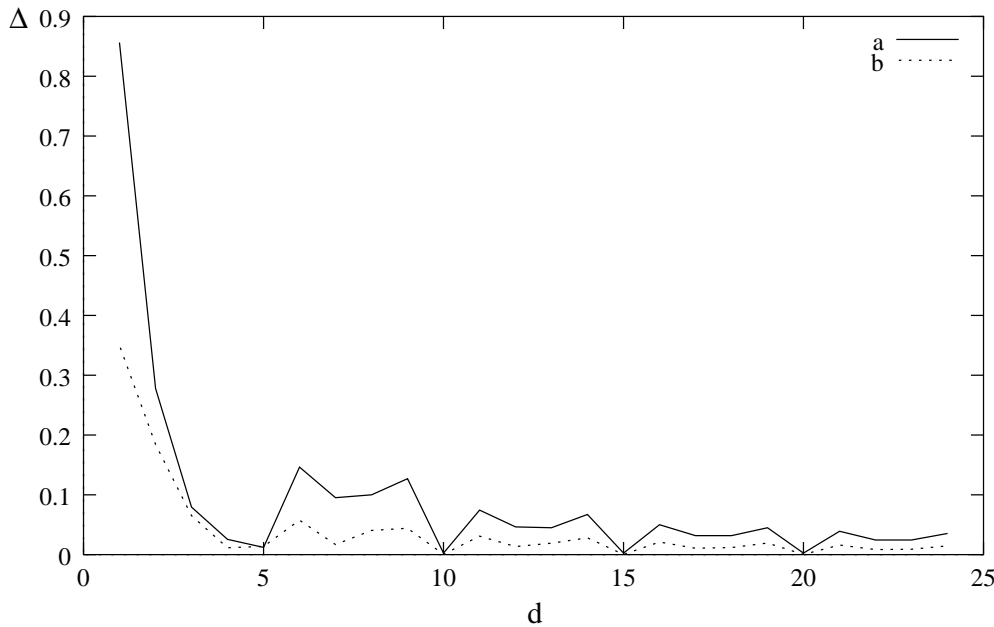


Abbildung 4.22.: Die Aufspaltung der Störstellenniveaus  $\Delta$  bei zwei Fremdatomen im Azbel–Harper–Modell zu  $\alpha = \frac{1}{5}$  mit  $U_{\vec{l}} = U_{\vec{m}} = -2$  in Abhängigkeit vom Abstand der Störstellen  $d = |\vec{l} - \vec{m}|$ . Der Abstand ist in Gitterkonstanten angegeben. Die Niveaus liegen unterhalb des Unterbandspektrums (a) bzw. in einer Bandlücke (b).

$\varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$  und  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(2)}$  auf. Dabei liegt  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$  energetisch unterhalb und  $\varepsilon_{\vec{m}}^{(2)}$  oberhalb des ursprünglichen Niveaus  $\varepsilon_{\vec{l}}$ . Die Aufspaltung  $\Delta = \varepsilon_{\vec{m}}^{(2)} - \varepsilon_{\vec{m}}^{(1)}$  nimmt mit wachsendem  $|\vec{l} - \vec{m}|$  im Mittel ab, wie in Abbildung 4.22 dargestellt.

Ein ähnliches Verhalten findet sich in der Molekülphysik. Setzt man beispielsweise ein  $\text{H}_2$  Molekül aus zwei Wasserstoffatomen zusammen, so spalten die Wasserstofforbitale in ein bindendes und ein antibindendes Molekülorbital auf. Mit zunehmendem Abstand der beiden Wasserstoffatome nimmt diese Aufspaltung ab.

Mit der beschriebenen Vorgehensweise läßt sich der Einfluß vieler Störstellen auf das Spektrum des Gesamthamiltonians abschätzen. Fügt man dem System mit zwei Störstellen sukzessive weitere Fremdatome hinzu, so werden die einzelnen Störstellenniveaus immer weiter aufspalten.  $N$  Fremdatome führen so zu  $N$  isolierten Störstellenniveaus in jeder Bandlücke zwischen zwei magnetischen Unterbändern. Geht man von einer statistischen Verteilung der Störstellenstärken aus, so ist anzunehmen, daß sich die Störstellenniveaus in jeder Unterbandlücke annähernd gleichmäßig verteilen. Im Spektrum lösen sich dann mit wachsender Energie magnetische Unterbänder mit Bereichen ab, in denen

viele isolierte Niveaus liegen. Die Wellenfunktionen zu den isolierten Störstellen sind lokalisiert, und tragen damit nicht zur Leitfähigkeit des Systems bei. Die Wellenfunktionen zu den Zuständen in den magnetischen Unterbändern sind dagegen nicht lokalisiert. Eine derartige Anordnung von Bändern und isolierten Energieniveaus wird als allgemeine Grundvoraussetzung für das Auftreten des ganzzahligen Quanten-Hall-Effekts gesehen [Jan].

#### 4. Störstellen im Kristall

## 5. Zusammenfassung

In den vorangehenden Abschnitten dieser Arbeit wurde nach der Herleitung des Modellsystems die zur Azbel–Harper–Gleichung korrespondierende Greensfunktion berechnet. Setzt man das Hofstadtersche Spurpolynom als bekannt voraus, so lassen sich mit dem hier entwickelten Ansatz zumindest die Diagonalelemente und die Elemente der ersten Nebendiagonalen dieser Resolventen analytisch berechnen. Andere Ansätze (z.B. [Uet]) erlauben es nicht, die analytische Rechnung so weit zu treiben, wie der hier verwendete.

Wesentliche Eigenschaften der Greensfunktion, beispielsweise ihr Verhalten an den Bandkanten, konnten damit rigoros bewiesen werden. Der Realteil der Diagonalelemente der Greensfunktion divergiert an den Kanten der magnetischen Unterbänder. Der Imaginärteil der Resolventen über dem Spektrum zeigt das für zweidimensionale Systeme typische Verhalten. Die daraus abgeleitete Zustandsdichte für Blochelektronen im Magnetfeld ist identisch zu bekannten Berechnungen [Wa1].

Ein Vergleich mit der Rechnung ohne Magnetfeld zeigt, daß die Greensfunktion des zweidimensionalen Tight–Binding–Modells im Grenzfall eines verschwindenden Magnetfeldes konsistent aus der hier berechneten Resolventen des almost–Mathieu–Operators hervorgeht.

In der anschließenden Berechnung des Störstellen–Effekts mit Hilfe dieser Ergebnisse konnte der Einfluß eines Fremdatoms auf das Hofstadter–Spektrum bestimmt werden:

- Analog zu dem einen Störstellenniveau des Tight–Binding–Bandes tritt im gestörten Azbel–Harper–Modell genau ein isolierter Eigenwert an jedem nicht entarteten magnetischen Unterband auf. Die Ionisierungsenergie des Störstellenniveaus wächst mit dem Betrag der Störstellenstärke.

## 5. Zusammenfassung

- Die Eigenfunktionen zu diesen isolierten Eigenwerten sind lokalisiert, allerdings ist diese Lokalisierung nicht so stark ausgeprägt wie im Fall ohne Magnetfeld.
- Zumindest eine physikalische Größe, die Ionisierungsenergie des untersten Störstellenniveaus, geht im Grenzfall eines verschwindenden Magnetfeldes kontinuierlich in die Abspaltung des Tight-Binding-Niveaus über.
- Die Ionisierungsenergie eines Störstellenniveaus in einer Lücke zwischen zwei magnetischen Unterbändern hängt einerseits von der Lage im Spektrum, andererseits von der Breite der jeweiligen Unterbandlücke ab.
- Eine Betrachtung der auf die Breite der Bandlücke normierten Ionisierungsenergie führt zu einer sehr interessanten Eigenschaft der Störstellenniveaus. Die Niveaus zu starken Störstellen im Randbereich des Spektrums können ihre physikalischen Eigenschaften ändern: Donatorniveaus werden zu Akzeptorniveaus, und umgekehrt.
- Das Spektrum des gestörten Systems ist in ähnlicher Weise wie der Hofstadter-Schmetterling selbstähnlich.
- Die Zustandsdichte des gestörten Systems wird von dem Gitterplatz, an dem sie bestimmt wird, abhängig. Am Ort der Störstelle wird sie soweit verändert, daß sie die für zweidimensionale Systeme charakteristischen Eigenschaften nicht mehr zeigt. Je weiter man sich vom Gitterplatz der Störstelle entfernt, desto schwächer wird der Einfluß des Fremdatoms.

Fügt man dem System ein weiteres Fremdatom hinzu, so zeigt sich, daß unabhängig von der Störstellenstärke beider Atome immer zwei Störstellenniveaus auftreten. Das eine Störstellenniveau des einfach gestörten Systems spaltet sozusagen in zwei Niveaus auf, wobei das eine gegenüber dem ursprünglichen Niveau abgesenkt wird, das andere wird angehoben. Dieses Verhalten erinnert an die Aufspaltung von Wasserstofforbitalen bei der Bildung von  $H_2$  in bindende und antibindende Zustände. Die Aufspaltung nimmt mit dem Abstand der Fremdatome im Kristallgitter, zumindest im Mittel, ab.

In diesem Punkt unterscheidet sich das System mit angelegtem Magnetfeld vom reinen Tight-Binding-Modell. Hier hängt die Zahl der Störstellenniveaus von den einzelnen Stärken der beiden Störstellen ab.



Getreu dem physikalischen Motto „eins, zwei, unendlich“ konnte das Verhalten des Systems bei beliebig vielen Störstellen mit stochastisch verteilten Stärken zumindest plausibel gemacht werden. Es ergibt sich ein Spektrum in dem sich Bereiche isolierter Eigenwerte mit Bändern abwechseln. Mit der Lokalisierung der Eigenzustände zu den Störstellenniveaus ergibt sich damit ein Szenario, wie es häufig zur Erklärung des ganzzahligen Quanten–Hall–Effekts herangezogen wird.

Eine exakte Berechnung der statistischen Greensfunktion steht, wie eine Berechnung der Leitfähigkeit des gestörten Systems, noch aus. Letztere gestaltet sich wegen der nur an Stützstellen definierten Greensfunktion als sehr schwierig.

Zu erwähnen bleibt noch, daß alle Ergebnisse dieser Arbeit ausschließlich aus den Eigenschaften der Azbel–Harper–Gleichung und des daraus resultierenden Hofstadterschen Spurpolynoms abgeleitet wurden. Sie gelten also für alle Näherungen, die auf eine Gleichung von der Form der Azbel–Harper–Gleichung führen.

## 5. Zusammenfassung

# A. Zur Gleichheit der Elemente in einer Diagonalen

Dieses Kapitel ist eine Ergänzung zu den Ausführungen in Abschnitt 3.2.2: Die Auswirkung einer zyklischen Vertauschung der  $c_i$  in  $\mathbf{H}^a$  auf die Adjunkten  $A_{i,j}$  von  $(\mathbf{H}^a - \lambda)$  wird genauer untersucht.

Dabei sei  $A_{i,j}$  die Adjunkte zu  $(\mathbf{H}^a - \lambda)$  und  $A'_{i,j}$  die Adjunkte zu  $(\mathbf{H}' - \lambda)$ , wie in Abschnitt 3.2.2 definiert, also

$$A'_{i,j} = A_{i,j}(v').$$

Zunächst gilt für die Adjunkten  $A_{i,i}$  zu den Diagonalelementen von  $(\mathbf{H}^a - \lambda)$ :

$$A_{i,i} = A'_{i-1,i-1} \quad (1 \leq i \leq q). \quad (\text{A.1})$$

*Beweis:*

Sei zunächst  $2 < i < q$ . Streicht man aus  $(\mathbf{H} - \lambda)$  die  $i$ -te Zeile und die  $j$ -te Spalte, bzw. aus  $(\mathbf{H}' - \lambda)$  die  $(i-1)$ -te Zeile und die  $(j-1)$ -te Spalte, so ergeben sich Adjunkte der Gestalt

$$A_{i,i} = \left| \begin{array}{cccc|c} b_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & e \\ 1 & \boxed{\text{X}} & & & & \\ 0 & & & & & \\ \vdots & & & & & \\ 0 & & & & & \\ \bar{e} & & & & & \end{array} \right| \quad A'_{i-1,i-1} = \left| \begin{array}{c|ccc} & & & e \\ & \boxed{\text{X}} & & 0 \\ & & & \vdots \\ & & & 0 \\ & & & 1 \\ \bar{e} & 0 & \cdots & 0 & 1 & b_1 \end{array} \right|$$



mit

$$X := \begin{pmatrix} b_3 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \ddots & \ddots & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 1 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & b_q \end{pmatrix}.$$

Nach Entwicklung der Determinanten nach der ersten Zeile und der ersten Spalte, bzw. nach der letzten Spalte und der ersten Zeile folgt:

$$\begin{aligned} A_{i,i} &= b_1 |X| - e\bar{e} |X_{q-2}^{q-2}|, \\ A'_{i-1,i-1} &= b_1 |X| - |X_{q-2}^{q-2}|. \end{aligned}$$

Mit  $e\bar{e} = 1$  ergibt sich daraus:

$$A_{i,i} = A'_{i-1,i-1}.$$

Der Beweis von  $A_{q,q} = A'_{q-1,q-1}$  ist analog durchzuführen.  $A_{1,1} = A'_{q,q}$  zu beweisen ist trivial, denn die beiden Adjunkten haben exakt die gleiche Gestalt.

Es gilt also für alle  $i$ :

$$A_{i,i}(\mathbf{v}) = A'_{i-1,i-1}(\mathbf{v}) = A_{i-1,i-1}(\mathbf{v}'),$$

wobei  $i$  modulo  $q$  zu nehmen ist.

Analog wird für die Adjunkten der ersten Nebendiagonale von  $(\mathbf{H}^a - \lambda)$  vorgegangen:

*Behauptung:*

$$A_{i,i+1} = A'_{i-1,i} \quad (2 \leq i \leq q-1). \quad (\text{A.5})$$

*Beweis:*

Sei zunächst  $2 < i < q-1$ . Das Vorgehen entspricht dem beim Beweis von (A.1): In



Für  $i = 2$  gilt:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & & & \\ 0 & b_4 & 1 & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & b_q \end{pmatrix}.$$

Die Adjunkten haben folgende Gestalt:

$$A_{i,i+1} = \begin{vmatrix} b_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & e \\ 0 & \boxed{X} & & & & \\ 0 & & & & & \\ \vdots & & & & & \\ 0 & & & & & \\ \bar{e} & & & & & \end{vmatrix} \quad A'_{i-1,i} = \begin{vmatrix} \boxed{X} & & & & & 0 \\ & & & & & 0 \\ & & & & & \vdots \\ & & & & & 0 \\ & & & & & 1 \\ \bar{e} & 0 & \cdots & 0 & 1 & b_1 \end{vmatrix}$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} A_{i,i+1} &= b_1 |X| + (-1)^q \bar{e} |X_1^{q-2}| + (-1)^q (-1)^{q-1} e \bar{e} |X_{q-2}^{q-2}| \\ &= b_1 |X| - |X_{q-2}^{q-2}| + (-1)^q \bar{e}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A'_{i-1,i} &= b_1 |X| - (-1)^{q-1} \bar{e} |X_{q-2}^1| - |X_{q-2}^{q-2}| \\ &= b_1 |X| - |X_{q-2}^{q-2}| + (-1)^q \bar{e}. \end{aligned}$$

Analog läßt sich  $A_{q-2,q-1} = A'_{q-3,q-2}$  beweisen.

Damit gilt

$$A_{i,i+1}(\mathbf{v}) = A'_{i-1,i}(\mathbf{v}) = A_{i-1,i}(\mathbf{v}').$$

*Behauptung:*

$$A_{i,j} = A'_{i-1,j-1} \quad (2 \leq i \leq j \leq q).$$







A. *Zur Gleichheit der Elemente in einer Diagonalen*

## B. Die Greensfunktion für große $|l - m|$

Die Elemente der Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian  $\mathbf{H}^a$  werden mit (3.32) berechnet

$$\mathbf{G}^a(\lambda, m, l) = \frac{1}{4\pi^2} \sum_{k=1}^q \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{g_m^k(\mu, \nu) \bar{g}_l^k(\mu, \nu)}{\lambda - \varepsilon_k(\mu, \nu)} d\mu d\nu. \quad (\text{B.1})$$

Damit erhält man  $\mathbf{G}^a(\lambda, m, l)$  für alle  $l$  und  $m$ , die in einer Periode des magnetischen Übergitters mit  $|l - m| < q$  liegen. Eine mögliche Fortsetzung der Greensfunktion für  $|l - m| \geq q$  kann mit Hilfe des Floquet–Theorems (2.29) konstruiert werden, es gilt

$$g_{m+hq} = e^{ihq\mu} g_m, \quad (\text{B.2})$$

dabei ist  $h$  der ganzzahlige Anteil von  $\frac{|l-m|}{q}$ .

Durch Einsetzen von (B.2) in (B.1) kann  $\mathbf{G}^a$  auch für  $|l - m| \geq q$  berechnet werden

$$\mathbf{G}^a(\lambda, m, l) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ihq\mu} \sum_{k=1}^q \frac{g_{m_q}^k(\mu, \nu) \bar{g}_l^k(\mu, \nu)}{\lambda - \varepsilon_k(\mu, \nu)} d\mu d\nu,$$

mit  $m_q = m \bmod q$ .

Für  $|l - m| < q$  ist diese Form von  $\mathbf{G}^a$  mit der bisherigen identisch. Zudem ist sie entlang einer Kristallachse gleich der Greensfunktion über dem gesamten Kristallgitter  $\mathbf{G}^e$  (3.29).

Mit (3.36) kann  $\mathbf{G}^a$  auch ausgedrückt werden als

$$\mathbf{G}^a(\lambda, \vec{a}, \vec{a}') = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ihq\mu} \frac{A_{l, m_q}}{P(\lambda, \mu, \nu)} d\mu d\nu. \quad (\text{B.3})$$

Die Integrationsgrenzen dürfen wegen der Periodizität der  $A_{l, m_q}$  (siehe Abschnitt 3.2.2)

B. Die Greensfunktion für große  $|l - m|$

verschoben werden.

Für  $m = l + hq$  (mit o.B.d.A.  $h \geq 0$ ) ist  $A_{l,m_q}$  in (B.3) gleich  $A_{l,l}$ . Dieses hängt wegen (A.4) nicht von  $\mu$  ab. Somit kann das  $d\mu$ -Integral in (B.3) als

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2} f \int_0^{2\pi} e^{ihq\mu} \frac{1}{1 - f \cos(q\mu)} d\mu \\ &= \frac{1}{2q} f \int_0^{2\pi q} \frac{\cos(h\mu')}{1 - f \cos(\mu')} d\mu' + i \frac{1}{2q} f \int_0^{2\pi q} \frac{\sin(h\mu')}{1 - f \cos(\mu')} d\mu' \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

mit

$$f := \frac{2}{P(\lambda) - 2 \cos(qv)} \quad (\text{B.5})$$

dargestellt werden.

Die beiden Integrale in (B.4) sind in [Gra] zu finden. Der Imaginärteil verschwindet, der Realteil ergibt

$$I = \frac{2\pi}{\sqrt{1-f^2}} \left( \frac{1 - \sqrt{1-f^2}}{f} \right)^h. \quad (\text{B.6})$$

Liegt  $\lambda$  außerhalb des Spektrums gilt  $|P(\lambda)| > 4$ . Für positive  $P(\lambda)$  gilt dann  $0 < f < 1$  und deshalb

$$0 < \frac{1 - \sqrt{1-f^2}}{f} < 1. \quad (\text{B.7})$$

Mit dem Logarithmus von  $I$

$$\ln I = h \ln \left( \frac{1 - \sqrt{1-f^2}}{f} \right) + \text{const.}$$

läßt sich die  $h$ -Abhängigkeit von  $I$  leicht angeben. Wegen (B.7) gilt

$$I \sim e^{-h}. \quad (\text{B.8})$$

Um  $\mathbf{G}^a$  zu berechnen, ist  $A_{l,l} \cdot I$  noch über  $v$  zu integrieren, es ist zumindest naheliegend, daß die  $e^{-h}$ -Abhängigkeit nach dieser Integration erhalten bleibt. Numerische Rechnungen bestätigen diese Vermutung.

## C. Die Zustandsdichte des Systems mit einem Fremdatom

Die Zustandsdichte im zweidimensionalen Modell mit einem Fremdatom am Gitterplatz  $\vec{l}$  ist mit (3.5) und (4.9) gegeben durch

$$\begin{aligned}\rho(\vec{m}) &= -\frac{1}{\pi} \Im \{ \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{m}, \vec{m}) \} \\ &= -\frac{1}{\pi} \Im \left\{ \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{m}, \vec{m}) + U \frac{\mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{m}, \vec{l}) \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{m})}{1 - U \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l})} \right\}.\end{aligned}$$

Dabei ist  $\mathbf{G}_0$  die Greensfunktion zum Hamiltonoperator des ungestörten Systems  $\mathbf{H}_0$ .

$\mathbf{G}_0(\lambda)$  ist für alle  $\lambda$ , die keine Eigenwerte von  $\mathbf{H}_0$  sind, reell (siehe [Mor]) für das Tight-Binding-Modell bzw. (3.45) für das Azbel-Harper-Modell) und symmetrisch (3.46). Deshalb gilt

$$\mathbf{G}_0(\lambda, \vec{l}, \vec{m}) = \mathbf{G}_0(\lambda, \vec{m}, \vec{l}).$$

Die Greensfunktion  $\mathbf{G}_0^+(\varepsilon)$  über dem Spektrum von  $\mathbf{H}$  ist durch den Grenzwert

$$\mathbf{G}_0^+(\varepsilon) = \lim_{s \rightarrow 0} \mathbf{G}_0(\varepsilon + is)$$

definiert.

Wie man leicht sieht, gilt die Symmetrie (3.46) auch über dem Band:

$$\mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{m}) = \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{m}, \vec{l}).$$

C. Die Zustandsdichte des Systems mit einem Fremdatom

Mit

$$\mathbf{G}_0(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) = \mathbf{G}_0(\varepsilon, \vec{m}, \vec{m})$$

folgt sofort

$$\mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) = \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{m}, \vec{m}).$$

Definieren wir

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) &:= a + ib, \\ \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{m}) &:= c + id, \end{aligned}$$

$a, b, c, d \in \mathbb{R}$ , so ergibt sich die Zustandsdichte des gestörten Systems als

$$\begin{aligned} \rho(\vec{m}) &= -\frac{1}{\pi} \Im \left\{ (a + ib) + U \frac{(c + id)^2}{1 - U(a + ib)} \right\} \\ &= -\frac{b - 2Uab + U^2a^2b + U^2b^3 + 2Ucd - 2U^2cda + U^2bc^2 - U^2bd^2}{\pi(1 - 2Ua + U^2a^2 + U^2b^2)}. \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

Am Ort der Störstelle  $\vec{m} = \vec{l}$  gilt

$$\begin{aligned} c &= a, \\ d &= b. \end{aligned}$$

Eingesetzt in (C.1) ergibt die Zustandsdichte am Ort der Störstelle:

$$\rho(\varepsilon, \vec{l}) = -\frac{1}{\pi} \frac{b}{1 - 2Ua + U^2a^2 + U^2b^2} = \frac{\rho_0}{|1 - U\mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l})|^2}. \quad (\text{C.2})$$

An einer Bandkante mit  $\varepsilon = \varepsilon_k$  haben  $a$  und  $b$  die Grenzwerte

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} a = \pm\infty, \quad (\text{C.3})$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} b = b_k. \quad (\text{C.4})$$

Daraus folgt der Grenzwert von  $\rho(\varepsilon, \vec{l})$  an der Bandkante:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} \rho(\varepsilon, \vec{l}) = 0. \quad (\text{C.5})$$

Im Zentrum des Bandes ( $P(\varepsilon_z) = 0$ ) hat die Zustandsdichte des ungestörten Systems eine Singularität. Der Grenzwert von  $\rho(\varepsilon, \vec{l})$  für  $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_z$  im gestörten System ergibt sich mit den Grenzwerten

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} a = a_z, \quad (\text{C.6})$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} b = \infty. \quad (\text{C.7})$$

als

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_z} \rho(\varepsilon, \vec{l}) = 0. \quad (\text{C.8})$$

Die Singularität im Zentrum des Bandes verschwindet damit.

Einen Gitterplatz neben der Störstelle in  $x$ -Richtung,  $\vec{m} = \vec{l} + (1, 0)$ , gilt wegen (3.73) bzw. (3.10):

$$\mathbf{G}_0(\lambda, \vec{l}, \vec{m}) = \frac{1}{4} \left( \lambda \mathbf{G}_0(\lambda, \vec{l}, \vec{l}) - 1 \right)$$

und deshalb

$$\mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{m}) = \frac{1}{4} \left( \varepsilon \mathbf{G}_0^+(\varepsilon, \vec{l}, \vec{l}) - 1 \right),$$

also

$$c = \frac{1}{4}(\lambda a - 1),$$

$$d = \frac{1}{4}\lambda b.$$

Durch einsetzen in (C.1) erhält man

$$\rho(\varepsilon, \vec{m}) = \frac{b(-16 + 32Ua - 16U^2a^2 - 16U^2b^2 - 2U\varepsilon^2a + U^2\varepsilon^2a^2 + 2U\varepsilon + U^2b^2\varepsilon^2 - U^2)}{16\pi(1 - 2Ua + U^2a^2 + U^2b^2)}.$$

Mit den Grenzwerten (C.3) und (C.4) folgt der Grenzwert von  $\rho(\varepsilon, \vec{m})$  an der Bandkante:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} \rho(\varepsilon, \vec{m}) = \frac{1}{\pi} b_k \left( 1 - \frac{\varepsilon_k^2}{16} \right). \quad (\text{C.9})$$

C. Die Zustandsdichte des Systems mit einem Fremdatom

Im Zentrum des Bandes  $\varepsilon = \varepsilon_z$  mit  $P(\varepsilon_z) = 0$  hat die Zustandsdichte des ungestörten Systems  $\rho_0$  eine Singularität. Diese Eigenschaft bleibt im gestörten System erhalten. Die Zustandsdichte am Gitterplatz neben der Störstelle  $\vec{m}$ ,  $\rho(\varepsilon, \vec{m})$ , divergiert:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k} \rho(\varepsilon, \vec{m}) = \infty. \quad (\text{C.10})$$



## D. Verwendete Bezeichnungen

Um das Lesen dieser Arbeit zu erleichtern, sind hier die häufig verwendeten Bezeichnungen und ihre Bedeutung kurz aufgeführt.

- $|M|$  Mit einer Matrix  $M$  bezeichnet die Determinante.
- $A_{i,j}$  Die Klassische Adjunkte von  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$ , die Determinante der Matrix, die aus  $(\lambda - \mathbf{H}^a)$  durch Streichen der  $i$ -ten Zeile und der  $j$ -ten Spalte entsteht, multipliziert mit  $(-1)^{i+j}$ .
- $\alpha$  Die Zahl der magnetischen Flußquanten pro Elementarzelle im Azbel–Harper–Modell (2.24). Wird meist als rational mit  $\alpha = \frac{p}{q}$  ( $p \in \mathbb{Z}$ ,  $q \in \mathbb{Z}$   $p, q$  teilerfremd) angenommen (2.28).
- $c_i$   $2 \cos(2\pi\alpha i - nu)$  (2.30).
- $\Delta\varepsilon$  Die Ionisierungsenergie eines Störstellenniveaus.
- $\varepsilon$  Ein Eigenwert des jeweils betrachteten Systems.
- $\varepsilon_k$  Eine Bandkante des jeweils betrachteten Systems.
- $\varepsilon_r$  Die Energie eines Resonanzniveaus.
- $\varepsilon_s$  Ein Störstellenniveau.
- $\varepsilon_z$  Das Zentrum eines Bandes, hier hat das Band im ungestörten Fall eine Van–Hove–Singularität, es gilt  $P(\varepsilon_z) = 0$ .
- $g_j$  Der Wert der Eigenfunktion zu  $\mathbf{H}^a$  an der Stützstelle  $j$ .
- $\mathbf{G}^\pm$  Die Greensfunktion über dem kontinuierlichen Spektrum von  $\mathbf{H}$ , definiert als  $\mathbf{G}^\pm(\varepsilon) = \lim_{s \rightarrow 0} \mathbf{G}(\varepsilon \pm is)$ .
- $\mathbf{G}^a$  Die Greensfunktion zum Azbel–Harper–Hamiltonian  $\mathbf{H}^a$ .
- $\mathbf{G}^e$  Die Greensfunktion zu  $\mathbf{H}^e$ .
- $\mathbf{G}^t$  Die Greensfunktion zum Tight–Binding–Hamiltonian  $\mathbf{H}^t$ .
- $\mathbf{H}^a$  Der Azbel–Harper–Hamiltonian (2.30).

#### D. Verwendete Bezeichnungen

$\mathbf{H}^e$	Der effektive Hamiltonian für Bloch–Elektronen im Magnetfeld (2.23). Er ist im Unterschied zu $\mathbf{H}^a$ über dem gesamten Quadratgitter definiert.
$\mathbf{H}^t$	Der Tight–Binding–Hamiltonian in Einbandnäherung (2.12).
$K$	Das vollständige elliptische Integral erster Art.
$K'$	Das komplementäre vollständige elliptische Integral erster Art.
$\lambda$	Eine Energie in Einheiten der skalierten Energie.
$\nu$	Die Bloch–Phase des Elektrons in $y$ –Richtung (2.25).
$\mu$	Die Floquet–Phase des Elektrons in $x$ –Richtung (2.29).
$p$	Der Zähler von $\alpha = \frac{p}{q}$ .
$P(\lambda)$	Das Hofstadtersche Spurpolynom (2.33). Es wird berechnet als $ \lambda - \mathbf{H}^a $ mit $\nu = \mu = \frac{\pi}{2q}$ .
$P(\lambda, \mu, \nu)$	$P(\lambda) - 2 \cos(q\mu) - 2 \cos(q\nu)$ (2.34).
$q$	Der Nenner von $\alpha = \frac{p}{q}$ .
$\rho(\varepsilon)$	Die Zustandsdichte des jeweils betrachteten Systems.
$U$	Die Stärke einer Störstelle, d.h. die Abweichung des Potentials des Fremdatoms von dem der restlichen Gitteratome (siehe Abbildung 4.1).
$z_{i,j}$	Der Wert der Eigenfunktion von $\mathbf{H}^e$ an der Stützstelle $(i, j)$ .

# Literaturverzeichnis

- [Abr] M. Abramowitz, I. A. Stegun:  
Handbook of Mathematical Functions;  
New York, 1972.
- [Arn] V. I. Arnold:  
Gewöhnliche Differentialgleichungen;  
Berlin, 1979.
- [Ash] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin:  
Solid State Physics;  
Philadelphia, 1987.
- [Azb] M. Ya. Azbel:  
Energy Spectrum of a Conduction Electron in a Magnetic Field;  
J. Exper. Theor. Phys. USSR **46** (1964), 929;  
bzw. Sov. Phys. JETP **19** (1964), 634.
- [Bar] A. Borelli, R. Fleckinger:  
Semiclassical analysis of Harper-like models;  
Phys. Rev. B **46** (1992), 559.
- [Be1] J. Bellissard, C. Kreft, R. Seiler:  
Analysis of the spectrum of a particle on a triangular lattice  
with two magnetic fluxes by algebraic and numerical methods;  
J. Phys. A **24** (1991), 2329.

- [Be2] J. Bellissard:  
Lipshitz continuity of gap boundaries for Hofstadter-like spectra;  
Comm. Math. Phys **160** (1994) 599.
- [Byr] P. Byrd, M. Friedman:  
Handbook of Elliptic Integrals  
for Engineers and Scientists;  
New York, 1971.
- [Chm] F. Chmela:  
Der Einfluß von Inhomogenitäten auf das Hofstadter-Spektrum;  
Diplomarbeit, Universität Regensburg, 1996.
- [Cl1] F. Claro, G. H. Wannier:  
Closure of Bands for Bloch Electrons in a Magnetic Field;  
Phys. Stat. Sol. (b) **88** (1978), K147.
- [Cl2] F. Claro, G. H. Wannier:  
Magnetic Subband Structure of Electrons in Hexagonal Lattices;  
Phys. Rev. B **19** (1979) 6068.
- [Cl3] F. Claro:  
Spectrum of Tight Binding Electrons in a Square Lattice with  
Magnetic Field;  
Phys. Stat. Sol. (b) **104** (1981), K31.
- [Col] L. Collatz:  
Differentialgleichungen;  
Stuttgart, 1966.
- [Eco] E. N. Economou:  
Green's Functions in Quantum Physics;  
Heidelberg, 1979.
- [Fal] R. Faltermeier:  
Die Stabilität des Hofstadter-Spektrums,  
Untersuchung an dreidimensionalen Modellkristallen mit

- allgemeiner Magnetfeldrichtung;  
Dissertation, Universität Regensburg, 1999.
- [Gra] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik:  
Table of Integrals, Series and Products;  
New York, San Francisco, London, 1965.
- [Har] P. G. Harper:  
Single Band Motion of Conduction Electrons  
in a Uniform Magnetic Field;  
Proc. Phys. Soc. A **68** (1955), 874.
- [Hof1] D.R. Hofstadter:  
Energy levels and wave functions of Bloch electrons  
in rational and irrational magnetic fields;  
Phys. Rev. B **15** (1976), 6.
- [Hof2] D. R. Hofstadter:  
Energy levels of Bloch Electrons in a Magnetic Field;  
Dissertation, University of Oregon, 1975.
- [Hor] T. Horiguchi:  
Lattice Green's functions for the triangular and honeycomb lattices;  
J. Math. Phys. **13** (1972), 1411.
- [Jän] K. Jänich:  
Analysis für Physiker und Ingenieure,  
Funktionentheorie, Differentialgleichungen, Spezielle Funktionen;  
Berlin, 1995.
- [Jan] M. Janßen, O. Vieweger, U. Fastenrath, J. Hajdu:  
Introduction to the Theory of the Integer Quantum Hall Effect;  
Weinheim, 1994.
- [Ke1] R. Ketzmerick, K. Kruse, D. Springsguth, T. Geisel:  
Bloch Electrons in a Magnetic Field:  
Why does Chaos send Electrons the Hard Way?  
Phys. Rev. Lett. **84** (2000), 2929;

- [Ki1] C. Kittel:  
Introduction to Solid State Physics;  
New York, 1976.
- [Ki2] C. Kittel:  
Quantum Theory of Solids;  
New York, 1973.
- [Kle] M. Klein:  
Azbel–Harper–Hofstadter–Spektrum mit isolierten Störstellen;  
Diplomarbeit Universität Regensburg, 1997.
- [Kli] K. v. Klitzing, G. Dorada, M. Pepper:  
New Method for High–Accuracy Determination  
of the Fine-Structure Constant based on Quantized Hall Resistance;  
Phys. Rev. Lett. **45** (1980), 494.
- [Koh] W. Kohn:  
Theory of Diamagnetism of Bloch Electrons;  
Phys. Rev. **105** (1957), 806.
- [Kos1] G. F. Kostner, J. C. Slater:  
Wave Functions of Impurity Levels;  
Phys. Rev. **95** (1954), 1167.
- [Kos2] G.F. Koster, J.C. Slater:  
Simplified Impurity Calculation;  
Phys. Rev. **96** (1954), 1208.
- [Lip] O. Lipan:  
Bandwidth Statistics from the Eigenvalue Moments  
for the Harper-Hofstadter Problem;  
J. Phys. A **33** (2000), 6875.
- [Mor] T. Morita:  
Useful Procedure for Computing the Lattice Green’s Function—  
Square, Tetragonal, and bcc Lattices  
J. Math. Phys. **13** (1971), 1744.

- [Nie] P. Niebauer:  
Deterministische Diffusion und chaotischer Halleffekt  
in periodischen Potentialen;  
Dissertation, Universität Regensburg, 1992.
- [Ob1] G. M. Obermair, G. H. Wannier:  
Bloch Electrons in Magnetic Fields;  
Phys. Stat. Sol. (b) **76** (1976), 217.
- [Ob2] G. M. Obermair:  
persönliche Mitteilungen.
- [Ons] L. Onsager:  
Interpretation of the de Haas-van Alphen Effect;  
Phil. Mag. **43** (1952), 1003.
- [Ope] W. Opechowski, W. G. Tam:  
Invariance Groups of the Schroedinger Equation for the Case  
of Uniform Magnetic Field;  
Physica **42** (1969), 529.
- [Pap] E. Papp, C. Micu:  
Symmetry properties of Exact Energy Solutions to the Harper Equation  
and Related q-Normalizations;  
J. Phys. A **33** (2000), 6615.
- [Pei] R.E. Peierls:  
Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen;  
Z. Phys. **80** (1933), 763.
- [Ra1] A. Rauh:  
Degeneracy of Landau Levels in Crystals;  
Phys. Stat. Sol (b) **65** (1979), K131.
- [Ra2] A. Rauh, H. J. Schellnhuber:  
Diamagnetic Band Structure;  
Phys. Stat. Sol (b) **106** (1981), 537.

- [Ros] H. P. Rosenstock:  
Dynamics of Simple Lattices;  
Phys. Rev. **97** (1955), 290.
- [Rud] A. Rudinger, F. Piechon:  
Hofstadter rules and generalized dimensions of the spectrum of  
Harper's equation;  
J. Phys. A **30** (1997), 117.
- [Sc1] H. J. Schellnhuber:  
Kristallelektronen im homogenen Magnetfeld  
und Überprüfung der Peierls–Onsager Hypothese;  
Dissertation, Universität Regensburg, 1980.
- [Sc2] H.J. Schellnhuber, G. M. Obermair:  
First Principles Calculation of Diamagnetic Band Structure;  
Phys. Rev. Lett. **45** (1979), 276.
- [Sc3] H.J. Schellnhuber, G. M. Obermair:  
First Principles Calculation of Diamagnetic Band Structure,  
I. Reduction to an One–Dimensional Schrödinger Equation;  
Phys. Rev. B **23** (1981), 5185.
- [Sc4] H.J. Schellnhuber, G. M. Obermair:  
First Principles Calculation of Diamagnetic Band Structure,  
II. Spectrum and Wave Functions;  
Phys. Rev. B **23** (1981), 5191.
- [Sla] J. C. Slater:  
Electrons in Perturbed Lattices;  
Phys. Rev. **19** (1949) 1592.
- [Th1] D. J. Thouless:  
Bandwidths for a Quasiperiodic Tight–Binding Model;  
Phys. Rev. B **28** (1983), 8.



- [Th2] D. J. Thouless:  
Scaling for the Discrete Mathieu Equation;  
Commun. Math. Phys. **127** (1990), 187.
- [Th3] D. J. Thouless, Yong Tan:  
Total Bandwidth for the Harper Equation: III;  
J. Phys. A **24** (1991), 4055.
- [Uet] T. Ueta:  
Lattice Green Function in Uniform Magnetic Fields;  
J. Phys. A **30** (1997), 5399.
- [Van] L. Van Hove:  
The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution  
of a Crystal;  
Phys. Rev. **89** (1953), 1189.
- [Wa1] G. H. Wannier, G. M. Obermair, R. Ray:  
Magnetoelectric Density of States for a Model Crystal;  
Phys. Stat. Sol. (b) **93** (1979), 337.
- [Wa2] G. H. Wannier:  
Invariant Properties of a proposed Hamiltonian  
for Bloch Electrons;  
Phys. Stat. Sol (b) **70** (1975), 727.
- [Zim] J. M. Ziman:  
Principles in the Theory of Solids;  
London, 1964.



An dieser Stelle möchte ich mich herzlich bedanken

- bei meinem Doktorvater *Prof. Dr. Gustav Obermair* für die freundschaftliche Aufnahme in seiner Arbeitsgruppe und die stete Begleitung auf dem Weg zu dieser Arbeit.
- bei *Michael Klein*, der mit seiner Diplomarbeit den Grundstock zu dieser Arbeit gelegt hat für die schöne, anregende und lustige Zusammenarbeit.
- bei *Rupert Faltermeier, Jakob Lamey, Johannes Simon* und *Burkard Wiesmann* für ihre vielen wertvollen Ratschläge, ihre ständige Bereitschaft zu diskutieren — nicht nur über Physik — und ihre schier unermüdliche Unterstützung bei der Fertigstellung dieser Arbeit.
- bei allen anderen Mitgliedern des Lehrstuhls Obermair — gegenwärtigen und ehemaligen — für die angenehme Atmosphäre und das freundschaftliche Klima.
- bei meiner Frau *Susanne Caesperlein* für ihre schier unerschöpfliche Geduld und ihre liebevolle Unterstützung in der Endphase dieser Arbeit und in der Zeit vor der mündlichen Prüfung.
- nicht zuletzt bei bei meinen Eltern, ohne die mein Studium und meine Promotion sicherlich nicht möglich gewesen wäre.