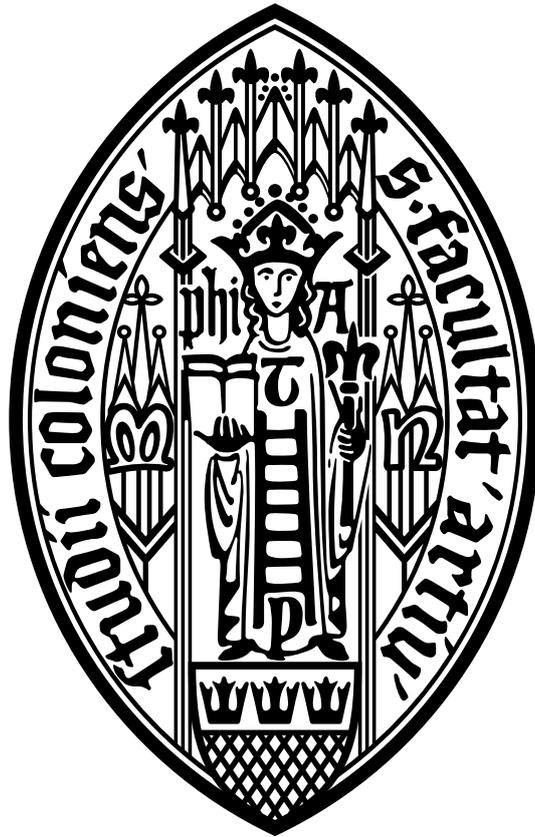


Institut für Theoretische Physik

Universität zu Köln

**Puddlebildung in vollständig kompensierten  
topologischen Isolatoren**



Bachelorarbeit

Erstprüfer Prof. Dr. Achim Rosch

Zweitprüfer Prof. Dr. Markus Grüninger

Eingereicht von Thomas Bömerich

Matrikelnummer 5958598

Juli 2017, Köln



## Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit ist es, die Längenskalen  $L_i$ , welche die Puddlebildung in topologischen Isolatoren charakterisieren, zu untersuchen. Dabei soll vor allem die Abhängigkeit der charakteristischen Längen von der Bandlücke  $\Delta$  bestimmt werden. Zur Beschreibung des Systems wird ein klassisches Modell verwendet, welches den topologischen Isolator als vollständig kompensierten Halbleiter mit zwei metallischen Oberflächen beschreibt. Um eine gute Näherung des Grundzustands zu bestimmen, wird ein Algorithmus von Efros und Shklovskii [1] verwendet.

Ein Skalenargument von Efros und Shklovskii [2] liefert  $L_i \sim \Delta^2$ . Die numerischen Ergebnisse dieser Arbeit zeigen eine fast lineare Abhängigkeit der typischen Längen von  $\Delta$  im Bereich kleiner Energielücken ( $\Delta \lesssim 40$ ). Außerdem wird in dieser Arbeit ein abgewandeltes Skalenarguments gegeben, welches die numerischen Ergebnisse für kleine  $\Delta$  reproduziert und verwendet werden kann, um charakteristische Längen für größere Werte von  $\Delta$  zu bestimmen. Hier gilt dann  $L_i \sim \Delta^2 / \ln(\Delta)$ . Der lineare Exponent im Bereich kleiner Energielücken eignet sich nicht zur Extrapolation der Längenskalen für größere  $\Delta$ . Die Längenskalen, welche in dieser Arbeit bestimmt werden, können als Abschätzung für die maximale Dicke von topologischen Isolatoren verwendet werden. Unterhalb dieser Dicke wäre die Qualität der Proben stark verbessert.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>8</b>
2.1	Numerisches Modell . . . . .	8
2.2	Minimierungsalgorithmus zur Bestimmung des Grundzustands . . . . .	10
2.3	Bildladungsmethode . . . . .	13
2.4	Einfluss der Oberflächen auf das Potential . . . . .	14
2.5	Screening & Puddles . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Numerische Bestimmung von Längenskalen</b>	<b>22</b>
3.1	Längenskala an der Oberfläche . . . . .	22
3.2	Längenskalen im Bulk . . . . .	28
<b>4</b>	<b>Skalenanalyse</b>	<b>34</b>
4.1	Verteilung des Potentials . . . . .	34
4.2	Wahrscheinlichkeit für Puddlebildung . . . . .	38
4.3	Dichteverlauf in Abhängigkeit der Energielücke . . . . .	40
4.4	Bestimmung einer Längenskala . . . . .	41
<b>5</b>	<b>Vergleich der Längenskalen</b>	<b>44</b>
<b>6</b>	<b>Fazit und Ausblick</b>	<b>47</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>50</b>



# 1 Einleitung

Topologische Isolatoren (TIs) sind eine relativ neuartige Klasse von Materialien, welche aufgrund ihrer topologisch geschützten Oberflächenzustände besonders interessant sind. Diese Oberflächenzustände können den elektrischen Strom fast verlustfrei leiten, während das Innere (engl. Bulk) des Materials ein Isolator ist [3]. In Abbildung 1.1 ist die Bandstruktur eines solchen Materials zu sehen. Wie bei einem gewöhnlichen Isolator liegt die Fermienergie in der Bandlücke zwischen Valenz- und Leitungsband. Die Bandlücke wird jedoch von den Oberflächenzuständen durchquert, wodurch das Material dort elektrisch leitend ist. Dieses Phänomen wurde zuerst bei zweidimensionalen Systemen mit topologischen Zuständen auf dem eindimensionalen Rand entdeckt [4]. Seit einigen Jahren sind auch dreidimensionale topologische Isolatoren bekannt, welche elektrischen Strom auf ihrer 2D-Oberfläche leiten können [5].

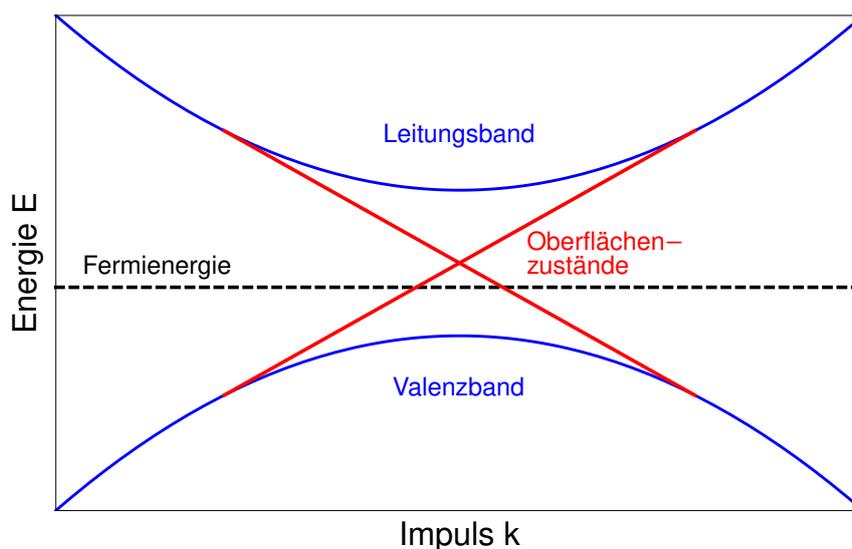


Abbildung 1.1: Bandstruktur eines topologischen Isolatoren. Die Fermienergie liegt zwischen Valenz- und Leitungsband, die Oberflächenzustände gehen durch die Bandlücke.

Die bekannten dreidimensionalen TIs haben jedoch meist eine nichtverschwindende elektrische Leitfähigkeit im Bulk und sind damit keine guten Isolatoren (siehe Abbildung 1.2). Dies erschwert die experimentelle Untersuchung der Oberflächeneigenschaften. Aus diesem Grund wird ein solcher dreidimensionaler topologischer Isolator mit Fremdatomen dotiert, um freie Ladungsträger zu kompensieren. Es stellt sich jedoch heraus, dass der Bulk selbst bei bestmöglicher Kompensation und bei tiefen Temperaturen immer noch eine elektrische Leitfähigkeit aufweist [6].

Grund dafür ist die Abschirmung von starken Potentialschwankungen, welche durch die

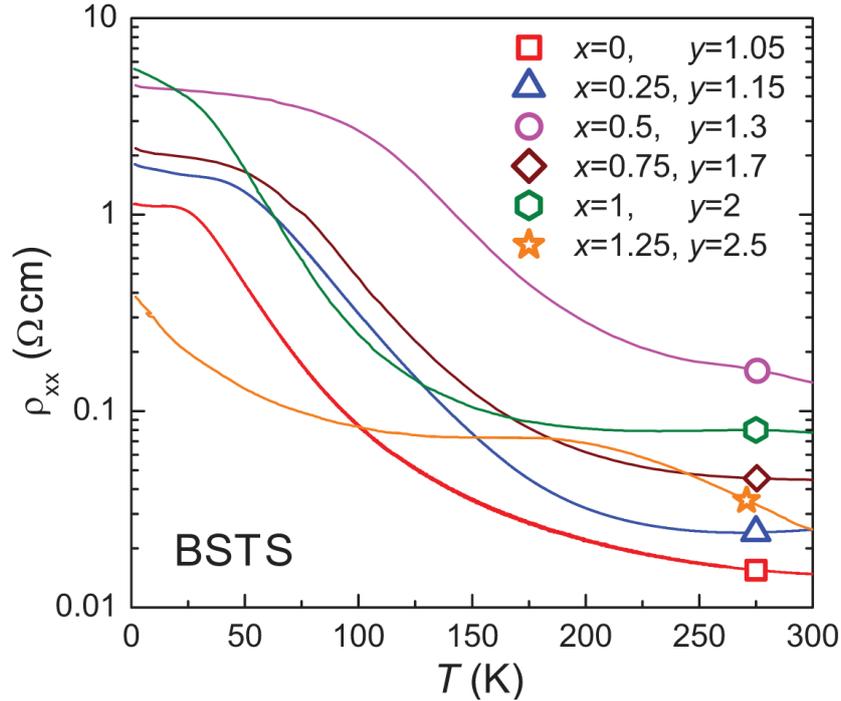


Abbildung 1.2: Elektrischer Widerstand für verschiedene Zusammensetzungen von  $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ . Für  $T \rightarrow 0$  nimmt  $\rho$  einen konstanten Wert an. Bei einem idealen Isolator würde die Kurve gegen  $\infty$  gehen. Alle Zusammensetzungen sind also keine guten Isolatoren (entnommen aus [6]).

Kompensation freier Ladungsträger entstehen. Aufgrund dieser Abschirmung bilden sich einzelne leitende Regionen aus, welche als Puddles bezeichnet werden. Zur Beschreibung des Bulks der 3D TIs wird die Theorie dotierter Halbleiter verwendet, da die topologischen Isolatoren aus diesen Materialien hergestellt werden [7].

Die typische Bandlücke eines Halbleiters beträgt einige eV. Um die elektrischen Eigenschaften des Halbleiters zu verändern, kann man bestimmte Fremdatome (sog. Dopants) in den Kristall einbauen. Dieses Verfahren wird als Dotierung bezeichnet. Die Fremdatome unterscheidet man in Donatoren und Akzeptoren. Donatoren besitzen Elektronen, die nicht für chemische Bindungen benötigt werden und demnach frei sind. Bei Akzeptoren hingegen fehlt ein Elektron für die Bindung an Nachbaratome, es liegt also ein Defektelektron (Loch) vor. Man spricht von n-Dotierung, wenn zusätzliche Elektronen hinzugefügt werden, und von p-Dotierung bei zusätzlichen Defektelektronen/Löchern.

Um einen möglichst guten Isolator zu erhalten, sollten sich p- und n-Dotierung kompensieren. Dreidimensionale topologische Isolatoren aus  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  und  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  sind z.B. n-dotierte Halbleiter mit freien Elektronen [7]. Dadurch besitzen diese Materialien eine elektrische Leitfähigkeit. Durch das Beimischen von Akzeptoren während der Kristallzucht kann die Fermienergie abgesenkt werden, um ein isolierendes Material zu erhalten [6]. Ein Maß für das Verhältnis von Akzeptoren und Donatoren ist die Kompensation  $K = \frac{N_A}{N_D}$ , wobei  $N_A$ ,  $N_D$  die Dichten von Akzeptoren bzw. Donatoren sind.

Bei  $K = 1$  spricht man von perfekter Kompensation. Dieser Fall ist zwar im Experiment nicht exakt realisierbar, eignet sich jedoch gut für eine theoretische und numerische Analyse. Die zusätzlichen Elektronen, welche durch die Donatoren in das Material gebracht werden, rekombinieren bei  $K = 1$  fast vollständig mit den zusätzlichen Löchern der Akzeptoren. Nach der Kompensation der freien Ladungsträger sind dann fast alle Akzeptoren negativ geladen und die Donatoren fast ausschließlich positiv geladen. Eine idealisierte Beschreibung der vollständigen Kompensation geht davon aus, dass sich exakt alle Ladungen ausgleichen. Der Einfachheit halber wird dies in dieser Arbeit verwendet. Die Fermienergie liegt dann genau in der Mitte der Bandlücke  $\Delta$  und es gilt  $N_A = N_D = N$ . Die Halbleitermaterialien werden bei sehr hohen Temperaturen (ca. 850 °C [6]) aus einer Schmelze hergestellt. Die Konzentration der intrinsischen Ladungsträger ist bei solch hohen Temperaturen größer als die der Dopants. Deshalb wird die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Dopants durch die intrinsischen Ladungsträger abgeschirmt. Auch wenn die intrinsischen Ladungsträger beim Abkühlen des Materials rekombinieren, bleiben die Dopants zufällig verteilt.

Die Bindungsenergie und der effektive Bohrsche Radius der Dopants sind analog zum Wasserstoffatom gegeben durch [8]

$$E_{SC} = \frac{m^* e^4}{2(4\pi\epsilon\epsilon_0)^2 \hbar^2} = \frac{m^*}{m_e \epsilon^2} \cdot 13,6 \text{ eV} \quad a_B = \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0 \hbar^2}{m^* e^2} \quad (1.1)$$

Die Bandmasse  $m^*$  ist nicht genau bekannt, für das Material  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  liegt sie zwischen  $m^* = 0,14 m_e$  und  $m^* = 0,24 m_e$  [9]. Im Folgenden wird  $m^* = 0,2 m_e$  verwendet. Die dielektrische Konstante der 3D TIs ist mit  $\epsilon \approx 200$  sehr groß [8]. Außerdem wurde die Bandlücke von  $\text{BiSbTeSe}_2$  bei tiefen Temperaturen ( $T < 50 \text{ K}$ ) auf  $\Delta = 0,26 \text{ eV}$  vermessen [8] und die Gitterkonstante beträgt  $a \approx 4,16 \text{ \AA}$  [7]. Die Dotierungsdichte  $N$  liegt bei ca.  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  [7].

Durch Einsetzen in Gleichung (1.1) erhält man  $E_{SC} = 6,8 \times 10^{-5} \text{ eV}$  und  $a_B = 5,3 \times 10^{-8} \text{ m}$ . Da  $E_{SC} \ll \Delta$  gilt, kann die Energie von Akzeptoren und Donatoren als  $-\Delta/2$  bzw.  $\Delta/2$  angenommen werden. Die Dopants sitzen also nah an den elektronischen Bändern.

## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Numerisches Modell

Der Bulk des topologischen Isolators wird als Quader mit linearen Dimensionen  $L_x, L_y, L_z$  modelliert, wobei  $L_x = L_y = L_{xy}$  gilt. In diesem Quader werden zufällig jeweils  $(L_{xy})^2 L_z$  Akzeptoren und Donatoren verteilt. Geladene Dopants interagieren miteinander über Coulomb-Wechselwirkung.

Die Hamilton-Funktion des Systems ist dann gegeben durch [10]

$$H = \frac{\Delta}{2} \sum_i f_i n_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) q_i q_j \quad (2.1)$$

Der erste Term in Gleichung (2.1) beschreibt die Energiedifferenz zwischen Donatoren und Akzeptoren, welche am oberen bzw. unteren Rand der Bandlücke sitzen. Der zweite Term ist die Coulomb-Wechselwirkung zwischen geladenen Dopants. Da das System nur bei  $T = 0$  betrachtet wird, gibt es keine intrinsischen Ladungsträger im Valenz- oder Leitungsband. Deren Beitrag zur Hamilton-Funktion, z.B. durch kinetische Energie, wird deshalb nicht berücksichtigt.

Die Variable  $f_i$  unterscheidet zwischen Donatoren ( $f_i = 1$ ) und Akzeptoren ( $f_i = -1$ ), mit  $i = 1, 2, \dots, 2L_x L_y L_z$ . Desweiteren beschreibt  $n_i$ , ob ein Dopant mit einem Elektron besetzt ist ( $n_i = 1$ ) oder nicht ( $n_i = 0$ ).

$q_i$  ist die Ladung des i-ten Dopants und berechnet sich über

$$q_i = \left( \frac{f_i}{2} - n_i + \frac{1}{2} \right) e \quad (2.2)$$

Besetzte Akzeptoren ( $f_i = -1, n_i = 1$ ) sind also negativ geladen, wohingegen unbesetzte Akzeptoren elektrisch neutral sind. Donatoren sind ungeladen, wenn sie besetzt sind ( $f_i = 1, n_i = 1$ ), und positiv geladen, wenn sie unbesetzt sind.

Für die Coulomb-Wechselwirkung  $V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$  ist es wichtig, den effektiven Bohrschen Radius  $a_B$  der Dopants miteinzubeziehen. Dieser beschreibt die Ausdehnung der Wellenfunktionen der Dopants. Vergleicht man  $a_B$  mit dem mittleren Abstand  $N^{-1/3}$  zwischen Fremdatomen, so ergibt sich  $N^{-1/3} = 10^{-8} \text{ m} < a_B$ . Der mittlere Abstand zwischen den Dopants ist also kleiner als die Ausdehnung der Wellenfunktionen. Aus diesem Grund ist die Coulomb-Wechselwirkung bei kleinen Abständen maßgeblich durch diesen quantenmechanischen Effekt beeinflusst. Für  $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \gg N^{-1/3}$ , also bei großen Abständen, hat das Potential die bekannte  $1/r$  Abhängigkeit. Damit ergibt sich nach Skinner *et al.* [10]

das folgende Potential.

$$V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) = V_{ij} = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0\sqrt{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2 + a_B^2}} \quad (2.3)$$

Die Berücksichtigung des Bohrschen Radius führt dann dazu, dass das Potential für sehr kleine Abstände nicht mehr divergiert, da  $V(0) = (4\pi\epsilon\epsilon_0 a_B)^{-1}$ .

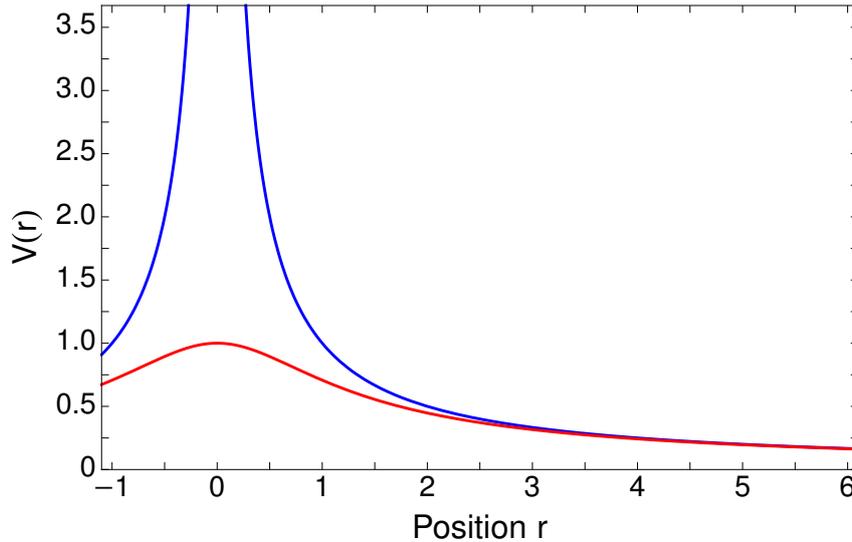


Abbildung 2.1: Vergleich der reinen Coulomb-Wechselwirkung (blaue Kurve) und des Potentials mit Cutoff (rote Kurve). Das  $1/r$  Potential divergiert für  $r \rightarrow 0$ , während der Cutoff für einen endlichen Wert  $V(0)$  sorgt. Für große Abstände ist der Verlauf der beiden Kurven gleich.  $r$  ist hier in Einheiten von  $a_B$  gemessen.

Das Coulomb-Potential der geladenen Dopants aus Gleichung (2.3) muss noch angepasst werden, um die Oberfläche des topologischen Isolators zu berücksichtigen. Dies geschieht mithilfe der Bildladungsmethode in Kapitel 2.4. Im Folgenden wird aber nun zuerst die Funktionsweise des Algorithmus erläutert, mit dem das System gelöst wird.

Für eine numerische Analyse der Hamilton-Funktion (Gl. (2.1)) ist es nötig, diese in einheitenloser Form zu schreiben. Eine sinnvolle Einheit zur Längenmessung ist  $N^{-1/3}$ , der mittlere Abstand zwischen Fremdatomen. Damit ergibt sich die mittlere Wechselwirkungsenergie zwischen geladenen Dopants als Einheit für die Energie.

$$E_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 N^{-1/3}} \quad (2.4)$$

Alle Energien werden relativ zur Fermienergie gemessen, welche genau in der Mitte zwischen Valenz- und Leitungsband bei  $\mu = 0$  liegt (siehe Abbildung 2.3). Um die Hamilton-Funktion dimensionslos zu machen, wird Gleichung (2.1) in Einheiten von  $E_C$  geschrieben.

$$\begin{aligned}
\frac{H}{E_c} &= \frac{\Delta}{2E_c} \sum_i f_i n_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0 N^{-1/3}}{4\pi\epsilon\epsilon_0 \sqrt{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2 + a_B^2}} \frac{q_i q_j}{e^2} \\
\tilde{H} &= \frac{\tilde{\Delta}}{2} \sum_i f_i n_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{\sqrt{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2 + \tilde{a}_B^2}} \tilde{q}_i \tilde{q}_j
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Hier wurde  $\tilde{H} = \frac{H}{E_c}$ ,  $\tilde{\Delta} = \frac{\Delta}{E_c}$ ,  $\tilde{q}_i = \frac{q_i}{e}$ ,  $\tilde{r}_i = r_i N^{1/3}$  und  $\tilde{a}_B = a_B N^{1/3}$  verwendet. Alle Längen, welche mithilfe der Numerik bestimmt werden, sind also in Einheiten von  $N^{-1/3}$  gegeben und die Energien in Einheiten von  $E_c$ .

## 2.2 Minimierungsalgorithmus zur Bestimmung des Grundzustands

Das Ziel des Algorithmus ist es, aus dem Anfangszustand, in welchem alle Dopants geladen sind, den Grundzustand zu erhalten. Im Anfangszustand sind alle Donatoren unbesetzt ( $n_i = 0$ ) und alle Akzeptoren sind besetzt ( $n_i = 1$ ). Gesucht ist die Konfiguration  $n_i$ , welche die Energie minimiert. Bei  $M$  Dopants müsste man also theoretisch alle  $2^M$  Konfigurationen prüfen. Dies ist von hohem numerischen Aufwand, da die Zahl der Konfigurationen exponentiell wächst.

Mithilfe eines Algorithmus von Efros und Shklovskii [1] ist es jedoch möglich, eine sehr gute Näherung des Grundzustands zu bestimmen. Dieser sog. Pseudo-Grundzustand hat ähnliche physikalische Eigenschaften wie der echte Grundzustand, aber nicht die exakt gleiche Energie. Des Weiteren ist dieser Zustand nicht eindeutig, stattdessen gibt es viele Pseudo-Grundzustände mit sehr ähnlichen Energien (siehe Abbildung 2.2).

Um den Pseudo-Grundzustand zu erreichen, werden Elektronen zwischen besetzten Dopants (negativ geladene Akzeptoren oder ungeladene Donatoren) und unbesetzten (ungeladene Akzeptoren/positiv geladene Donatoren) ausgetauscht. Dieser Austausch geschieht paarweise zwischen Dopants mit  $n_i = 1$ ,  $n_j = 0$ , für  $n_i = n_j = 1$  oder  $n_i = n_j = 0$  ist kein Austausch möglich. Um ein Elektron zu verschieben, muss die Energie  $\Delta$  aufgebracht werden. Da nun jedoch zwei Dopants neutral sind, verringert sich aber die Coulomb-Energie. Wird die Gesamtenergie aus Gleichung (2.1) durch einen Austausch verringert, so wird dieser akzeptiert, ansonsten wird er rückgängig gemacht.

Im Folgenden wird die Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand und einem Zustand, in dem die Besetzungen von zwei Dopants vertauscht sind, berechnet.  $\bar{n}_i$  und  $\bar{q}_i$  beschreiben die Besetzung und Ladung an Position  $\vec{r}_i$  im Grundzustand. Dabei sei einer der Dopants am Ort a im Grundzustand besetzt ( $\bar{n}_a = 1$ ,  $\bar{q}_a = (f_a - 1)/2$ ) und der andere Dopant sei am Ort b und unbesetzt ( $\bar{n}_b = 0$ ,  $\bar{q}_b = (f_b + 1)/2$ ).

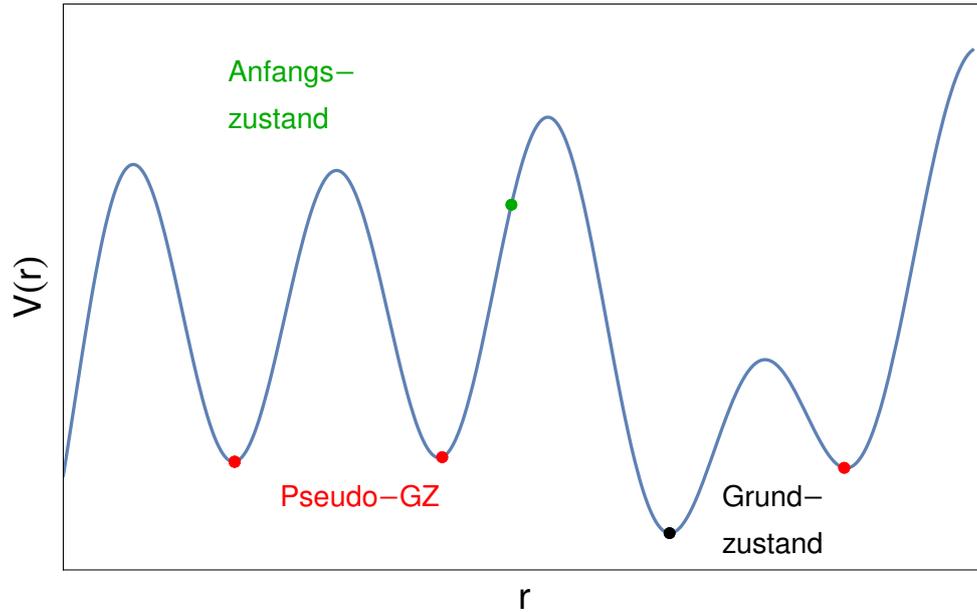


Abbildung 2.2: Die Pseudo-Grundzustände haben etwas höhere Energie als der echte Grundzustand. Sie eignen sich dennoch, um die physikalischen Eigenschaften des Systems zu beschreiben.

Im angeregten Zustand gilt dann  $n_a = 0$ ,  $n_b = 1$ ,  $q_a = (f_a + 1)/2$ ,  $q_b = (f_b - 1)/2$ . Damit ergibt sich sofort

$$n_a - \bar{n}_a = -1, \quad n_b - \bar{n}_b = 1, \quad q_a - \bar{q}_a = 1, \quad q_b - \bar{q}_b = -1 \quad (2.6)$$

Die Energiedifferenz zwischen den beiden Konfigurationen ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{a,b} - E_{\text{Grundzustand}} \\ &= \frac{\Delta}{2} \sum_{i \neq a,b} f_i \bar{n}_i + \frac{\Delta}{2} (f_a n_a + f_b n_b) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \neq j \\ i,j \neq a,b}} V_{ij} \bar{q}_i \bar{q}_j + \sum_{i \neq a,b} V_{ia} \bar{q}_i q_a \\ &\quad + \sum_{i \neq a,b} V_{ib} \bar{q}_i q_b + V_{ab} q_a q_b - \left( \frac{\Delta}{2} \sum_i f_i \bar{n}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \bar{q}_i \bar{q}_j \right) \\ &= \frac{\Delta}{2} (f_a (n_a - \bar{n}_a) + f_b (n_b - \bar{n}_b)) + \sum_{i \neq a,b} V_{ia} \bar{q}_i (q_a - \bar{q}_a) + \sum_{i \neq a,b} V_{ib} \bar{q}_i (q_b - \bar{q}_b) \\ &\quad + V_{ab} (q_a q_b - \bar{q}_a \bar{q}_b) \\ &= \frac{\Delta}{2} (f_b - f_a) + \sum_{i \neq a,b} V_{ia} \bar{q}_i - \sum_{i \neq a,b} V_{ib} \bar{q}_i + V_{ab} (\bar{q}_b - \bar{q}_a - 1) \\ &= \frac{\Delta}{2} (f_b - f_a) + \sum_{i \neq a} V_{ia} \bar{q}_i - \sum_{i \neq b} V_{ib} \bar{q}_i - V_{ab} = \frac{\Delta}{2} (f_b - f_a) + \phi_a - \phi_b - V_{ab} \end{aligned} \quad (2.7)$$

mit  $\phi_j = \sum_{i \neq j} V_{ij} \bar{q}_i$  und  $\Delta E > 0$ , da das System aus dem Grundzustand gebracht wurde. Es ist nun hilfreich, die Energie  $\varepsilon_i$  für einen einzelnen Dopant zu definieren durch

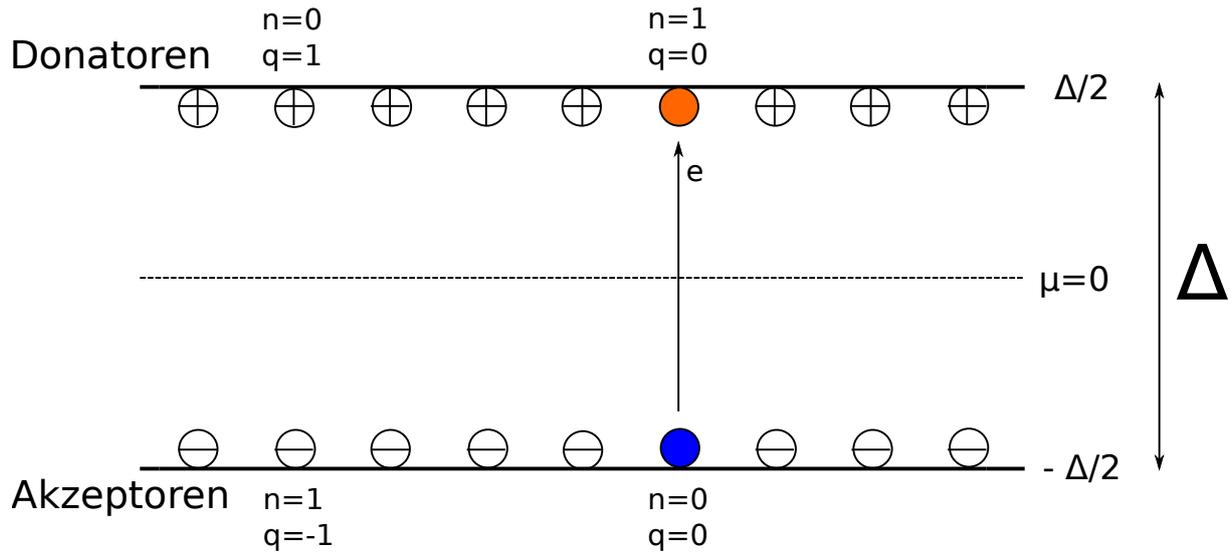


Abbildung 2.3: Die Donatoren und Akzeptoren sitzen direkt an den elektronischen Bändern bei  $\pm\Delta/2$  und die Fermienergie liegt genau in der Mitte der Bänder. Durch Austausch eines Elektrons können zwei vorher geladene Dopants elektrisch neutral werden

$$\varepsilon_i = \frac{\Delta}{2} f_i - \sum_{j \neq i} V_{ij} q_j \quad (2.8)$$

Da  $\Delta E > 0$  gelten muss, folgt aus den Gleichungen (2.7) und (2.8) eine einfache Bedingung für den Pseudo-Grundzustand

$$\varepsilon_j - \varepsilon_i - V_{ij} > 0 \quad (2.9)$$

Im Pseudo-Grundzustand ist (2.9) für alle Paare  $(i, j)$  mit  $n_i = 1$  und  $n_j = 0$  erfüllt. Dies ist das sog. Efros-Shklovskii-Stabilitätskriterium (ESK) [1].

Der Algorithmus arbeitet also wie folgt:

- Elektron wird von besetztem zu unbesetztem Dopant verschoben
- ESK für diesen Austausch prüfen
- ESK nicht erfüllt  $\rightarrow$  Tausch rückgängig machen und Austausch bei einem neuen Paar versuchen
- ESK erfüllt  $\rightarrow$  Alle  $\varepsilon_i$  neu berechnen
- Diese Schritte wiederholen, bis ESK für alle Paare erfüllt ist

Wie bereits erwähnt, ist die endgültige Konfiguration nicht der exakte Grundzustand. Dies liegt daran, dass immer nur ein paarweiser Austausch gleichzeitig durchgeführt wird. Würde man den Algorithmus auf Vertauschungen zwischen mehr als 2 Dopants oder das

simultane Austauschen von mehreren Paaren erweitern, könnte man die Energie des Systems weiter absenken. Dies ist aber mit einem erhöhten numerischen Aufwand verbunden. Da der Pseudo-Grundzustand die Physik des Systems sehr gut beschreibt, ist dieser vollkommen ausreichend.

## 2.3 Bildladungsmethode

Durch die Bildladungsmethode (auch Methode der Spiegelladung genannt) lassen sich elektrostatische Randwertprobleme lösen. Bringt man einen leitfähigen, aber ungeladenen Körper in die Nähe einer Ladung  $q$ , so werden Elektronen im Leiter verschoben, um das elektrische Feld der Ladung abzuschirmen. Dieser Effekt wird als Potentialabschirmung (engl. *Screening*) bezeichnet. Bei der Bildladungsmethode werden all diese verschobenen Ladungen als eine Punktladung zusammengefasst, um so das Problem einfacher zu gestalten und das sich einstellende Potential zu berechnen.

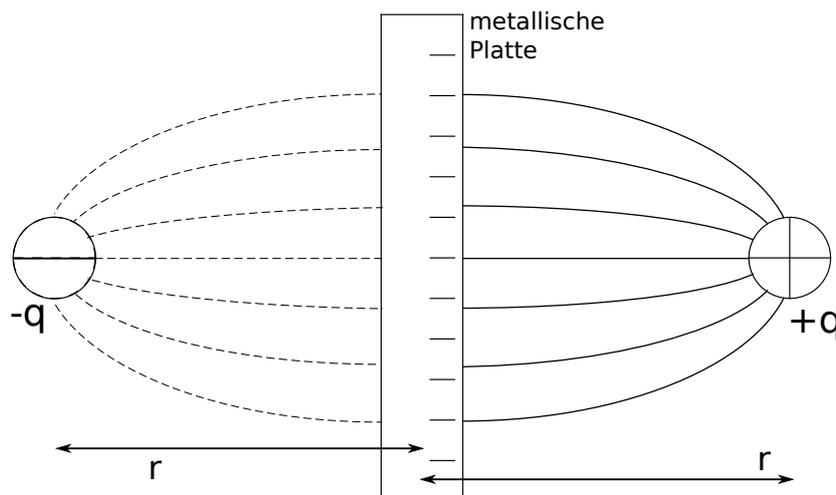


Abbildung 2.4: Abschirmung des elektrischen Feldes einer Punktladung  $+q$  durch eine metallische Platte. Die Oberflächenladungen auf der Platte können durch eine (fiktive) negative Ladung im gleichen Abstand auf der anderen Seite der Platte ersetzt werden (Spiegelladung).

In Vorbereitung auf das nächste Kapitel wird eine Ladung  $q$  bei  $\vec{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$  in der Nähe einer metallischen Platte bei  $z = 0$  betrachtet. Auf der Platte sammeln sich solange Ladungen an, bis dort das Potential Null herrscht und das elektrische Feld senkrecht auf der Platte steht.

Um das gesamte elektrische Feld für  $z > 0$  zu berechnen, wird die Platte durch eine Ladung  $-q$  bei  $z = -z_0$  ersetzt. Das Potential der beiden Ladungen ist Null bei  $z = 0$  und lautet für  $z > 0$

$$\phi(x, y, z) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{q}{\sqrt{(z - z_0)^2 + (r_\perp)^2}} - \frac{q}{\sqrt{(z + z_0)^2 + (r_\perp)^2}} \right) \quad (2.10)$$

Hier und im Folgenden wird  $(r_\perp)^2 = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2$  verwendet.

## 2.4 Einfluss der Oberflächen auf das Potential

Die Oberflächen des topologischen Isolators wirken wie metallische Platten. So wird die Eigenschaft der leitenden Oberflächen auf dieses klassische Modell übertragen. Da mit dem Modell vor allem Systeme untersucht werden sollen, deren Ausdehnung in  $z$ -Richtung viel kleiner ist als in den anderen beiden Richtungen, werden auch nur die beiden Oberflächen senkrecht zur  $z$ -Achse bei  $z = 0$  und  $z = L_z$  berücksichtigt. Aufgrund der periodischen Randbedingungen in  $x$ - und  $y$ -Richtung werden die anderen vier Oberflächen vernachlässigt. Mit der Methode der Spiegelladung lässt sich dann das Potential einer Ladung am Ort  $(x_0, y_0, z_0)$  zwischen den beiden Platten bestimmen. Eine der Platten befindet sich bei  $z = 0$ , die andere bei  $z = L_z$ .

Im Gegensatz zum Problem mit nur einer metallischen Platte, muss man hier jedoch eine unendliche Zahl an Spiegelladungen generieren, um das echte Potential zu erhalten.

Betrachtet man das System mit zwei Wänden und einer Ladung im Inneren mit  $z_0 < \frac{L_z}{2}$  (siehe Abb. 2.5), so führt eine Spiegelung der echten Ladung an der linken Wand (Wand 1) zu einem endlichen Potential an der rechten Wand (Wand 2). Dafür lässt sich das Potential aus Gleichung (2.10) betrachten, wobei nur die Abstandsabhängigkeit  $V(z, z_0)$  untersucht wird. Außerdem wird der Cutoff aufgrund des Bohrschen Radius  $a_B$  miteinbezogen.

$$V(z = 0) = 0$$

$$V(z = L_z) = \frac{1}{\sqrt{(L_z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} - \frac{1}{\sqrt{(L_z + z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} \neq 0$$

Spiegelt man nun die echte Ladung und deren soeben generierte Spiegelladung an Wand 2, so nimmt das Potential an Wand 2 den Wert Null an. Dies ergibt dann folgende Formel für das Potential im Bulk des TIs.

$$V = \frac{1}{\sqrt{(z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} - \frac{1}{\sqrt{(z + z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} \\ + \frac{1}{\sqrt{(z - 2L_z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} - \frac{1}{\sqrt{((z - 2L_z + z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}}$$

$$\Rightarrow V(z = L_z) = 0$$

$$V(z = 0) = \frac{1}{\sqrt{(2L_z + z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} - \frac{1}{\sqrt{((2L_z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2)} \neq 0$$

Dieses Potential ist also ungleich Null an Wand 1. Deshalb muss man die beiden Ladungen rechts von Wand 2 wieder an Wand 1 spiegeln. Damit ist das Potential an Wand 2 wieder ungleich Null. Abbildung 2.5 zeigt das Verfahren zu diesem Zeitpunkt und die dabei auftretenden Abstände.

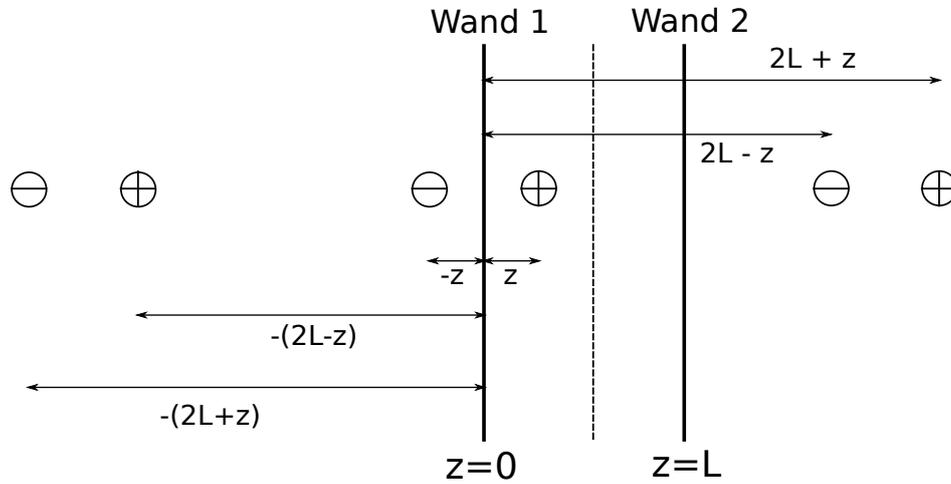


Abbildung 2.5: Methode der Spiegelladung bei zwei Wänden im Abstand  $L$  mit 3 Iterationen der Spiegelung

Fortsetzen dieses Verfahrens liefert eine unendliche Reihe, die das Potential der Ladung bei  $z_0 < \frac{L_z}{2}$  beschreibt.

$$\begin{aligned}
 V_c(z_0, z) = & \frac{1}{\sqrt{(z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} - \frac{1}{\sqrt{(z + z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} \\
 & + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{(z - z_0 + (-1)^{n+1} \cdot 2L_z \cdot [1 + \frac{n}{2}])^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} \\
 & - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{(z + z_0 + (-1)^{n+1} \cdot 2L_z \cdot [1 + \frac{n}{2}])^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}}
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

Die Gaußklammern  $[...]$  runden  $(1 + \frac{n}{2})$  auf die nächstkleinere ganze Zahl ab und liefern damit die richtigen Vorfaktoren von  $L_z$  im Potential. Für ein frühzeitiges Abbrechen der Reihe definiert man außerdem  $V_c(z_0, z, N)$  wobei  $N$  die obere Grenze der Summe ist.

Für  $z_0 > \frac{L_z}{2}$  wird die erste Spiegelung an Wand 2 durchgeführt und es ergibt sich wieder eine unendliche Reihe für das Potential am Ort  $z$ . Man kann hier  $V_c(z_0, z)$  berechnen, indem die Transformationen  $z \rightarrow (L_z - z)$  und  $z_0 \rightarrow (L_z - z_0)$  auf Gleichung (2.11) angewandt werden.

Im verwendeten Algorithmus muss das Potential nach jedem akzeptierten Tausch eines Elektrons neu berechnet werden.  $V_c$  wird also während der Optimierung der Energie sehr häufig bestimmt. Da es jedoch numerisch aufwendig ist, Gleichung (2.11) jedes Mal bis zu

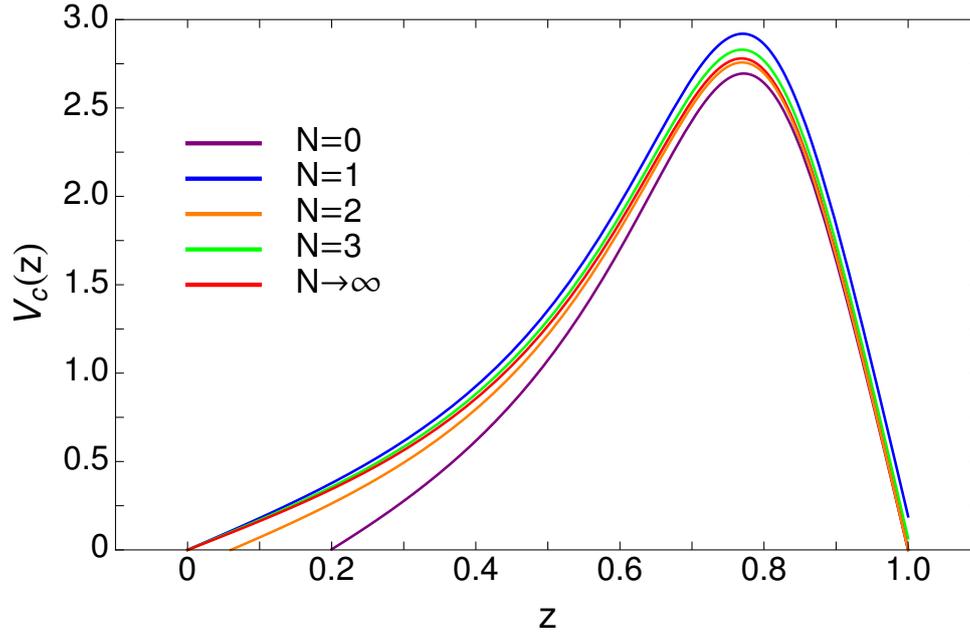


Abbildung 2.6: Potential für verschiedene Grenzen  $N$  der Summe mit  $L_z = 1$ ,  $z_0 = 0,8$  und  $a_B = 0,2$ . Potentiale mit ungeradem  $N$  sind immer an der rechten Wand ungleich Null, bei geradem  $N$  hat man ein von Null verschiedenes Potential an der linken Wand.

einer hohen Ordnung zu berechnen, benötigt man eine Näherungslösung, die das Potential ausreichend gut beschreibt und weniger rechenaufwendig ist.

Die einfachste Möglichkeit wäre es, die Reihe nur bis zu einer gewissen, niedrigen Ordnung zu berechnen, bei der die Abweichung zum echten Potential nicht zu groß ist.

Man sieht in Abbildung 2.6, dass das Potential für gerade  $N$  an der linken Wand und für ungerade  $N$  an der rechten Wand ungleich Null ist. Außerdem liefert  $N = 3$  bereits eine gute Näherung für das echte Potential. Hier müssen jedoch bereits zehn Terme berechnet werden. Da die Anzahl der zu berechnenden Terme mit jeder Ordnung um zwei steigt, ist Erhöhung der Präzession auch mit höherem numerischen Aufwand verbunden.

Eine weitere mögliche Näherung, welche die Konvergenz an beiden Wänden garantiert, wäre es, die Reihe nach einigen Termen abzubrechen und eine Gerade zwischen  $z = 0$  und  $z = L_z$  abzuziehen. Dies liefert für  $z_0 < \frac{L_z}{2}$

$$V_{eff}(z_0, z, N) = V_c(z_0, z, N) - \left( (V_c(z_0, L_z, N) - V_c(z_0, 0, N)) \frac{z}{L_z} + V_c(z_0, 0, N) \right) \quad (2.12)$$

Diese Näherung erweist sich bereits als sehr genau, wenn keine Terme der Summe berechnet werden. Man bestimmt also nur die erste Spiegelladung und interpoliert dann mit der Geraden.

Für  $z_0 < \frac{L_z}{2}$  gilt dann

$$V_L(z_0, z) = \frac{1}{\sqrt{(z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} - \frac{1}{\sqrt{(z + z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} \quad (2.13)$$

$$+ \frac{z}{L_z} \left( \frac{1}{\sqrt{(L_z + z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} - \frac{1}{\sqrt{(L_z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} \right)$$

Der Ausdruck für  $z_0 > \frac{L_z}{2}$  enthält zwei weitere Terme und lautet

$$V_R(z_0, z) = \frac{1}{\sqrt{(z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} - \frac{1}{\sqrt{(2L_z - z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}}$$

$$- \frac{1}{\sqrt{(z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} + \frac{1}{\sqrt{(2L_z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} \quad (2.14)$$

$$+ \frac{z}{L_z} \left( \frac{1}{\sqrt{(z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} - \frac{1}{\sqrt{(2L_z - z_0)^2 + (r_\perp)^2 + (a_B)^2}} \right)$$

Damit ergibt sich ein effektives Potential an der Stelle  $z$ , welches von  $z_0$  abhängt

$$V_{eff}(z_0, z) = \begin{cases} V_L(z_0, z), & z_0 \leq \frac{L_z}{2} \\ V_R(z_0, z), & z_0 > \frac{L_z}{2} \end{cases} \quad (2.15)$$

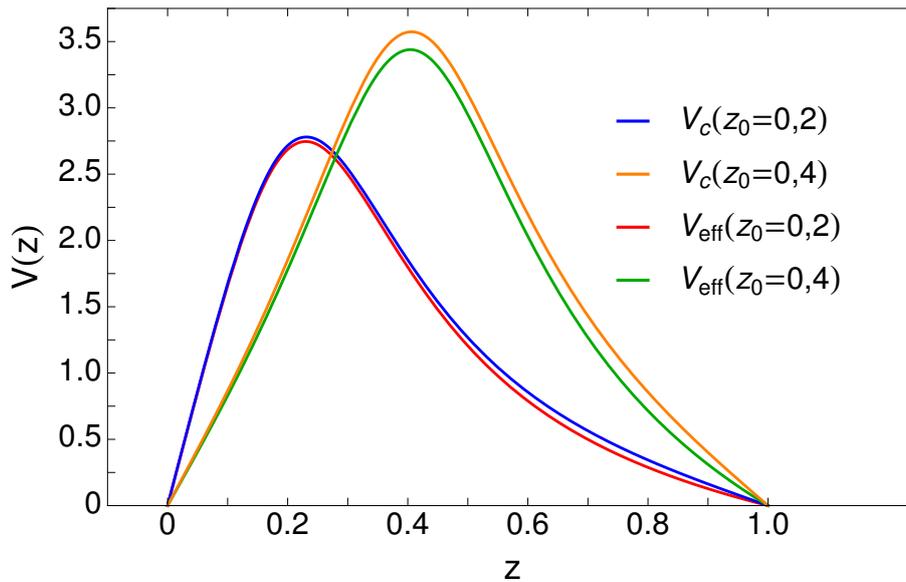


Abbildung 2.7: Vergleich zwischen den Potentialen aus Gleichung (2.11) und Gleichung (2.15) mit  $L_z = 1$  und  $a_B = 0,2$  für  $z_0 = 0,2$  bzw.  $z_0 = 0,4$ . Da  $L_z \gtrsim a_B$  gilt, ist die Abweichung der Kurven groß.

Nun kann man  $V_{eff}$  und  $V_C$  vergleichen, um zu beurteilen, ob die Näherung sinnvoll ist (siehe Abb. 2.7 und 2.8). Man sieht, dass es immer noch eine Abweichung zwischen dem tatsächlichen Potential und der Näherung gibt. Der Unterschied der Kurven ist besonders groß, wenn  $z_0$  nah bei  $L_z/2$  ist. Außerdem ist die Näherung sehr viel genauer, wenn  $L_z \gg a_B$  gilt. Da dies in den simulierten Systemen der Fall ist, ist die Näherung zur Beschreibung des Potentials gut geeignet. Von Vorteil ist außerdem, dass das Potential an beiden Wänden exakt den Wert Null annimmt. Wie man in Abbildung 2.8 sehen kann, weichen die Kurven nur bei großen Abständen etwas voneinander ab.

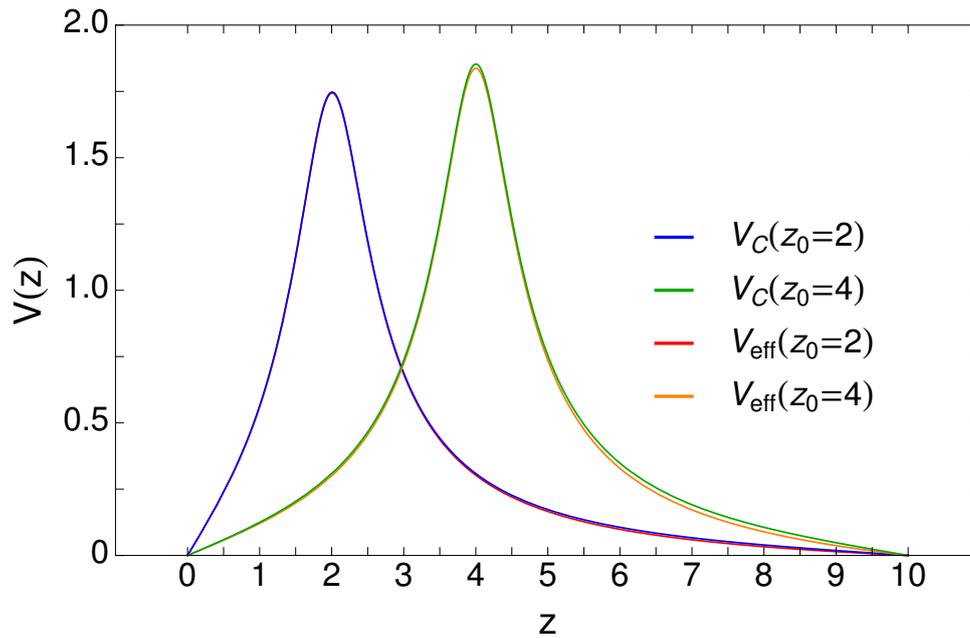


Abbildung 2.8: Vergleich zwischen den Potentialen aus Gleichung (2.11) und Gleichung (2.15) mit  $L_z = 10$  und  $a_B = 0,5$  für  $z_0 = 2$  bzw.  $z_0 = 4$ . Die Näherung  $V_{eff}$  entspricht sehr gut dem echten Potential  $V_C$ .

Die benötigte Rechenzeit für die größten simulierten Systeme ( $L_{xy} = 50 = L_z$ , 250000 Dopants) beträgt mit dem Potential aus Gleichung (2.15) ca. 13 Stunden. Betrachtet man nur die reine Coulomb-Wechselwirkung ohne Abschirmung durch die Oberflächen, so hat man Rechenzeiten von ca. 7 Stunden bei gleicher Systemgröße. Hier wurden auch periodische Randbedingungen in  $z$ -Richtung verwendet.

Aufgrund der Fallunterscheidung bei  $z_0 = L_z/2$  ist  $V_{eff}(z_0, z)$  dort nicht stetig. Dies beeinflusst auch die Ergebnisse der Numerik, worauf an der jeweiligen Stelle hingewiesen wird. Es ist wichtig, dass dieser Effekt keine Auswirkungen auf die endgültigen Ergebnisse hat, da er unphysikalisch ist.

Da die Spiegelladungen bei höheren Iterationen immer weiter von den Wänden entfernt sind und immer Paare von entgegengesetzt geladenen Spiegelladungen gebildet werden, ist außerdem eine Dipolnäherung möglich. Da man hier jedoch einen Punkt wählt, um welchen entwickelt wird (z.B.  $z = 0$ ), versagt diese Näherung für  $z \rightarrow L_z$  und es gibt eine

sehr große Abweichung zwischen dem exakten Potential nach Gleichung (2.11) und der Näherung bei  $z = L_z$ . Analog hat man einen großen Fehler bei  $z = 0$ , wenn man  $z = L_z$  als Entwicklungspunkt wählt. Aus diesem Grund wird diese Näherung nicht verwendet. Für alle im Folgenden dargestellten Ergebnisse wurde das Potential nach Gleichung (2.15) verwendet. Obwohl periodische Randbedingungen in x- und y-Richtung verwendet werden, ist es wichtig, dass  $L_{xy} \geq L_z$  gilt, um finite-size Effekte zu vermeiden.

## 2.5 Screening & Puddles

Ein wichtiges Phänomen ist die Potentialänderung im Inneren des TIs vom Anfangs- zum Grundzustand. Im Anfangszustand zeigt das Potential starke Fluktuationen, aufgrund der zufällig verteilten geladenen Dopants. Wie bereits erwähnt, tritt eine Abschirmung des Potentials auf, wenn es energetisch günstig ist, ein Elektron von einem geladenen Akzeptor zu einem geladenen Donator zu verschieben. Für diesen Transfer muss die Energielücke  $\Delta$  überwunden werden. Durch den Austausch sind aber nun Akzeptor und Donator elektrisch neutral, wodurch die Coulomb-Wechselwirkung des Systems abnimmt. Da es sich dabei um eine langreichweitige Wechselwirkung handelt, beeinflusst ein solcher Austausch das Potential an jedem Ort des Systems. Es handelt sich also um einen nicht-linearen Prozess. Abbildung 2.10 zeigt das Potential  $\phi_0$  des Anfangszustands und  $\phi_1$ , das Potential des Grundzustands. Man sieht, dass  $\phi_0$  in allen vier Bildern große Fluktuationen zeigt. Im Grundzustand ist das Potential deutlich abgeschwächt und sein Betrag überschreitet nur an wenigen Stellen  $\Delta/2$ . In diesen Bereichen bilden sich Ansammlungen von neutralen Atomen, sogenannte „Puddles“ (siehe Abb. 2.9).

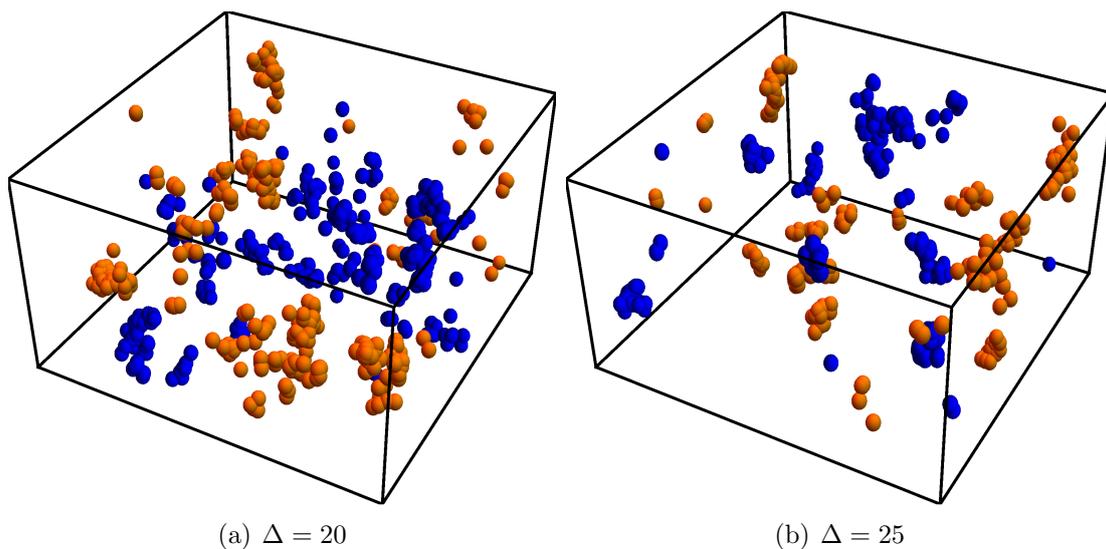


Abbildung 2.9: Beispiele für Elektronen- und Loch-Puddles (orange/blau) bei verschiedenen Energielücken  $\Delta$  und  $L_{xy} = 50$ ,  $L_z = 30$ .

An Bild (b) in Abbildung 2.10 kann man sehen, dass auch große lokale Schwankungen des

Potentials abgeschirmt werden können. In Bild (c) wird deutlich, dass es sich um einen Effekt handelt, der auch über große Längenskalen auftritt. Außerdem kann es passieren, dass das Potential im Grundzustand  $\Delta/2$  überschreitet, obwohl es im Anfangszustand kleiner als diese Schwelle ist. Dies ist in Bild (d) sichtbar. Außerdem kann man hier zwei Puddles beobachten, die sehr nah beieinander liegen, ohne dass sich das Potential dazwischen stark ändert. Es lässt sich also sagen, dass es sich bei der Abschirmung um einen hochkomplexen Mechanismus handelt, bei dem viele unterschiedliche Phänomene auftreten können.

Die Puddles spielen eine wichtige Rolle beim Verständnis von Transporteigenschaften im Bulk des TIs, z.B. bei der optischen oder elektrischen Leitfähigkeit. Aufgrund der freien Ladungsträger in den Puddles sind diese elektrisch leitend. Elektronen und Löcher können außerdem zwischen den einzelnen Puddles tunneln. Da der aktivierte Transport durch intrinsische Ladungsträger bei tiefen Temperaturen unterdrückt ist, bestimmt dieses Tunneln maßgeblich den elektrischen Widerstand in diesem Temperaturbereich [11]. Desweiteren tragen die Puddles zur optischen Leitfähigkeit bei, wodurch sie auch experimentell nachgewiesen wurden [12].

Man unterscheidet dabei zwischen Elektronen-Puddles, welche sich aus neutralen Donatoren zusammensetzen, und Loch-Puddles, welche Ansammlungen von neutralen Akzeptoren sind. Elektronen-Puddles bilden sich also, wenn  $\phi > \Delta/2$  gilt, wohingegen Loch-Puddles für  $\phi < -\Delta/2$  auftreten.

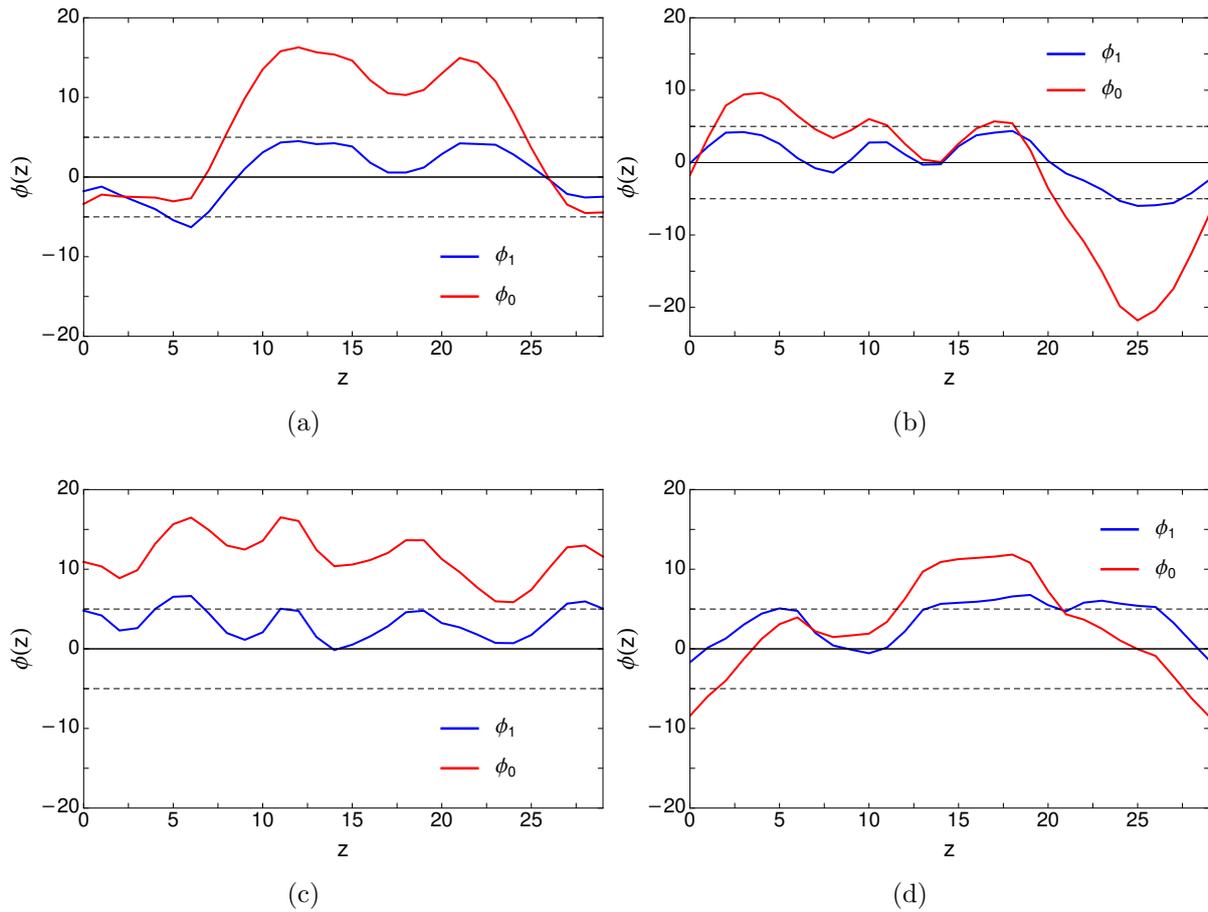


Abbildung 2.10: Fluktuationen des anfänglichen und des korrelierten Potentials ( $\phi_0, \phi_1$ ). Puddlebildung tritt dann auf, wenn die blaue Kurve die gestrichelten Linien bei  $\pm\Delta/2$  überschreitet.  $\phi_0$  entsteht durch die zufällig verteilten Dopants und zeigt deshalb starke Fluktuationen. Im Pseudo-Grundzustand sind diese Fluktuationen unterdrückt, was man an  $\phi_1$  sieht. Die verwendeten Parameter sind  $\Delta = 10$ ,  $L_{xy} = 30$ ,  $L_z = 30$ .

## 3 Numerische Bestimmung von Längenskalen

Ziel dieses Abschnittes ist es, verschiedene Längenskalen des Systems mithilfe der numerischen Simulationen zu definieren und anschließend deren Abhängigkeit von der Energielücke  $\Delta$  zu untersuchen. Dafür wird die Dichte neutraler Dopants in Abhängigkeit verschiedener Parameter betrachtet. Aufgrund der zufälligen Positionen der Dopants werden die Ergebnisse über viele Konfigurationen (300 bis 800) gemittelt, um ein repräsentatives Ergebnis zu erhalten.

### 3.1 Längenskala an der Oberfläche

Die Dichte neutraler Dopants in Abhängigkeit der Eindringtiefe  $z$  ist definiert als

$$n_0(z) = \frac{N_{neutral}(z)}{N(z)} \quad (3.1)$$

Hier ist  $N_{neutral}(z)$  die Anzahl an neutralen Atomen mit  $z$ -Koordinate zwischen  $z$  und  $z + dz$  und analog ist  $N(z)$  die Gesamtanzahl an Atomen in diesem Bereich. Es wurde  $dz = 0,25$  gewählt.

Die Neutralisierung von Atomen findet nicht gleichmäßig verteilt im ganzen System statt. Stattdessen hat man an den beiden Rändern des Systems, also in der Nähe der leitenden Oberflächen, eine sehr geringe Dichte. Die Puddlebildung ist dort unterdrückt. Dies liegt daran, dass hier die metallischen Oberflächen stark zum Screening beitragen. Mit zunehmendem Abstand vom Rand steigt die Dichte dann stark an und pendelt sich auf einem konstanten Plateau bei der Dichte  $(n_0)_{bulk}$  ein. Nähert man sich dem anderen Rand, so nimmt die Dichte wieder ab und wird am Rand Null. Ein Beispiel für den Verlauf von  $n_0(z)$  ist in Abbildung 3.1 zu sehen.

$(n_0)_{bulk}$  wird bestimmt, indem die Dichte über das gesamte Plateau gemittelt wird. Aufgrund des numerischen Rauschens variiert die Kurve dann etwas um den Bulkwert. Man sieht jedoch auch einen deutlichen Anstieg der Dichte bei  $z = L_z/2$ . Dieser lässt sich auf die Unstetigkeit des Potentials an dieser Stelle zurückführen. Um diesen Zusammenhang genauer zu untersuchen, wird folgende Änderung des Potentials vorgenommen.

Das Intervall  $[0, L_z]$  wird in drei gleich lange Teile unterteilt, statt wie bisher in zwei. Für das Intervall  $[0, L_z/3]$  verwendet man  $V_L$  aus Gleichung (2.13) und für  $z_0 \in [2L_z/3, L_z]$  nimmt man  $V_R$  nach Gleichung (2.14). Im Intervall  $[L_z/3, 2L_z/3]$  soll das Potential eine

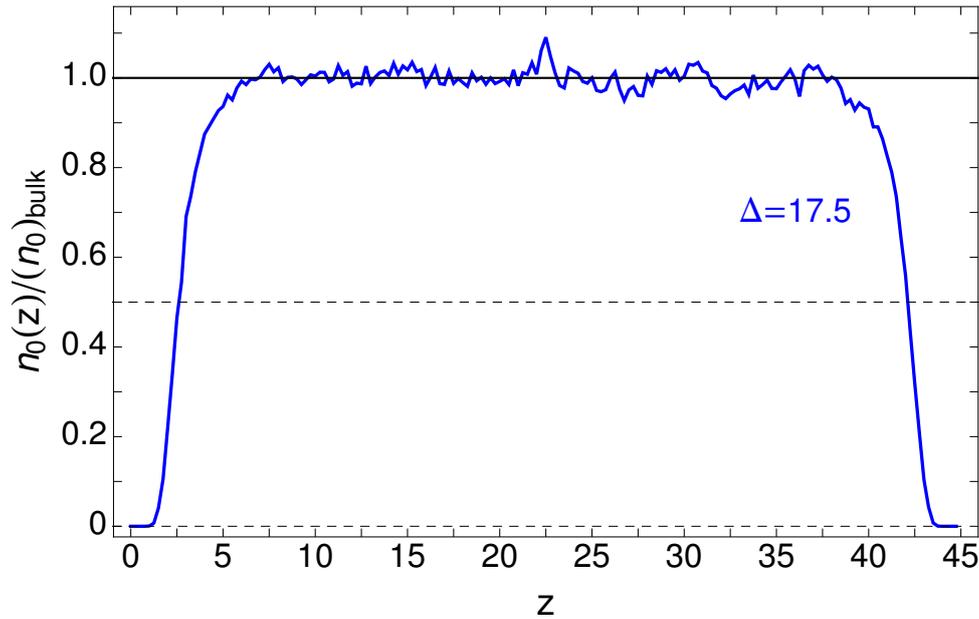


Abbildung 3.1: Dichteprofil der neutralen Atome in Abhängigkeit der Eindringtiefe  $z$  für  $L_{xy} = 50$ ,  $L_z = 45$  und  $\Delta = 17,5$ . Die Puddlebildung nahe der Oberfläche ist unterdrückt, die Dichte im Bulk nimmt einen konstanten Wert an.

Überlagerung von  $V_L$  und  $V_R$  sein und folgende Form haben.

$$\tilde{V}(z_0, z) = V_L(z_0, z) \frac{z_R - z_0}{z_R - z_L} + V_R(z_0, z) \frac{z_0 - z_L}{z_R - z_L} \quad (3.2)$$

$z_L$ ,  $z_R$  sind die linke bzw. rechte Grenze des Intervalls, in welchem  $\tilde{V}$  verwendet wird. Es gilt also:  $z_L = L_z/3$ ,  $z_R = 2L_z/3$ . Damit ergibt sich für  $\tilde{V}$

$$\tilde{V}(z_0, z) = V_L(z_0, z) \frac{\frac{2L_z}{3} - z_0}{\frac{L_z}{3}} + V_R(z_0, z) \frac{z_0 - \frac{L_z}{3}}{\frac{L_z}{3}} \quad (3.3)$$

In vereinfachter Form lässt sich dies dann schreiben als

$$\tilde{V}(z_0, z) = \frac{3}{L_z} \left[ V_L(z_0, z) \left( \frac{2L_z}{3} - z_0 \right) + V_R(z_0, z) \left( z_0 - \frac{L_z}{3} \right) \right] \quad (3.4)$$

Das gesamte Potential ist dann gegeben durch

$$V_{\text{eff}}(z_0, z) = \begin{cases} V_L(z_0, z), & z_0 < \frac{L_z}{3} \\ \tilde{V}(z_0, z), & \frac{L_z}{3} \leq z_0 \leq \frac{2L_z}{3} \\ V_R(z_0, z), & z_0 > \frac{2L_z}{3} \end{cases} \quad (3.5)$$

Diese Funktion ist stetig für alle  $z_0 \in [0, L_z]$ , auch für  $z_0 = L_z/3$  und  $z_0 = 2L_z/3$ . Jedoch ist sie bei  $z_0 = L_z/3$  und  $z_0 = 2L_z/3$  nicht differenzierbar. Lässt man den Algorithmus

mit diesem Potential laufen, so ergibt sich folgendes Dichteprofil.

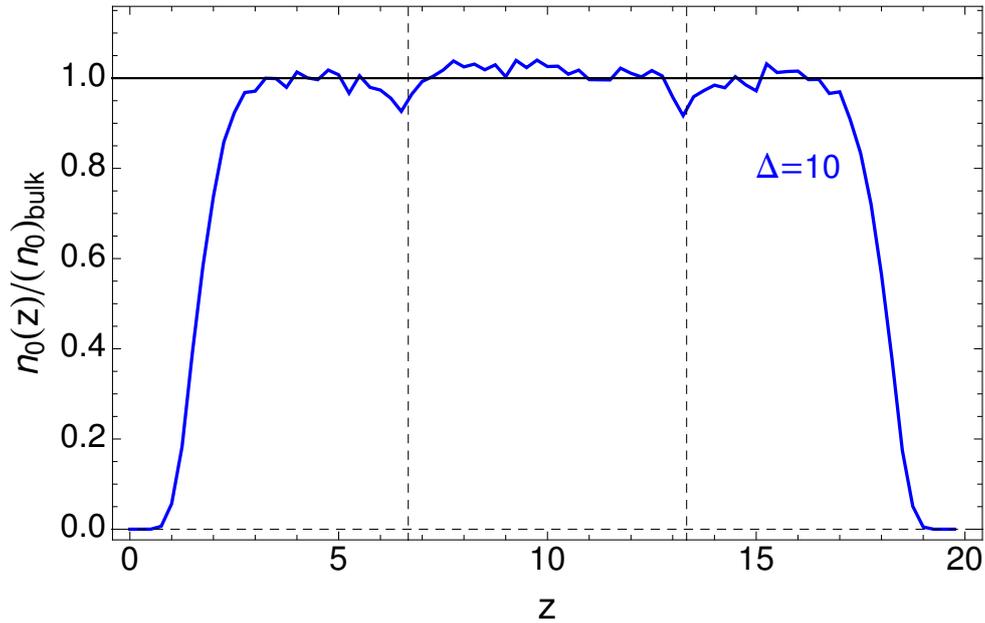


Abbildung 3.2: Dichteprofil für das Potential aus Gleichung (3.5) in Abhängigkeit der Eindringtiefe  $z$  für  $\Delta = 10$ ,  $L_{xy} = 30$  und  $L_z = 20$ . Die vertikalen gestrichelten Linien markieren die Stellen, an denen das Potential nicht differenzierbar ist, und liegen bei  $z = L_z/3$  und  $z = 2L_z/3$ .

Man sieht sofort, dass der Peak in der Mitte verschwunden ist. Stattdessen sinkt die Dichte bei  $z = L_z/3$  und  $z = 2L_z/3$  merklich ab. Dies liegt daran, dass das Potential an diesen Stellen nicht differenzierbar ist. Es wird also deutlich, dass verschiedene Fallunterscheidungen bestimmte Anomalien in der Dichte verursachen. Im Folgenden muss darauf geachtet werden, dass diese Ausreißer keinen Einfluss auf die Längenskalen oder andere Größen haben. Bei der Bestimmung des Bulkwertes wird über das gesamte Plateau der Dichte gemittelt, wodurch der Peak keinen großen Einfluss auf diesen Wert hat. Von nun an wird wieder das Potential aus Gleichung (2.15) verwendet.

Als nächstes wird  $n_0(z)$  für verschiedene Systemdicken  $L_z$  betrachtet. Dies ist in den Abbildungen 3.3 und 3.4 für zwei verschiedene Werte von  $\Delta$  geschehen. Für große Werte von  $L_z$  erhält man das bereits diskutierte Verhalten mit stark ansteigenden Flanken und breitem Bereich mit konstantem Bulkwert. Für kleine Werte von  $\Delta$  wird der Bulkwert auch bei geringen Dicken von  $L_z \approx 20$  erreicht. Bei großen Energielücken ist die maximale Dichte für  $L_z = 20$  hingegen schon sehr viel kleiner als  $(n_0)_{bulk}$ .

In Abbildung 3.5 werden erneut die Werte für  $\Delta = 30$  gezeigt, diesmal jedoch nur als Funktion der Eindringtiefe  $z$ . Man sieht, dass sich für dünne Systeme ( $L_z < 20$ ) keine konstante Dichte einstellt. Die Kurven in diesem Bereich zeigen ein scharfes Maximum und fallen anschließend wieder ab.

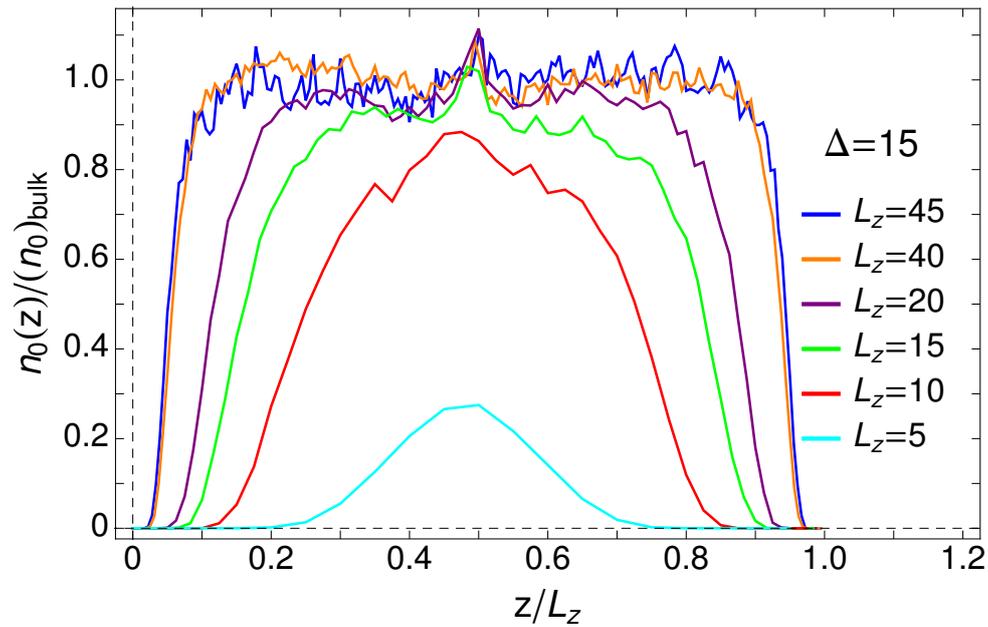


Abbildung 3.3: Dichteprofile in Abhängigkeit der relativen Eindringtiefe  $z/L_z$  für  $\Delta = 15$  und  $L_{xy} = 50$ . Der Bulkwert wird schon für  $L_z \approx 20$  angenommen.

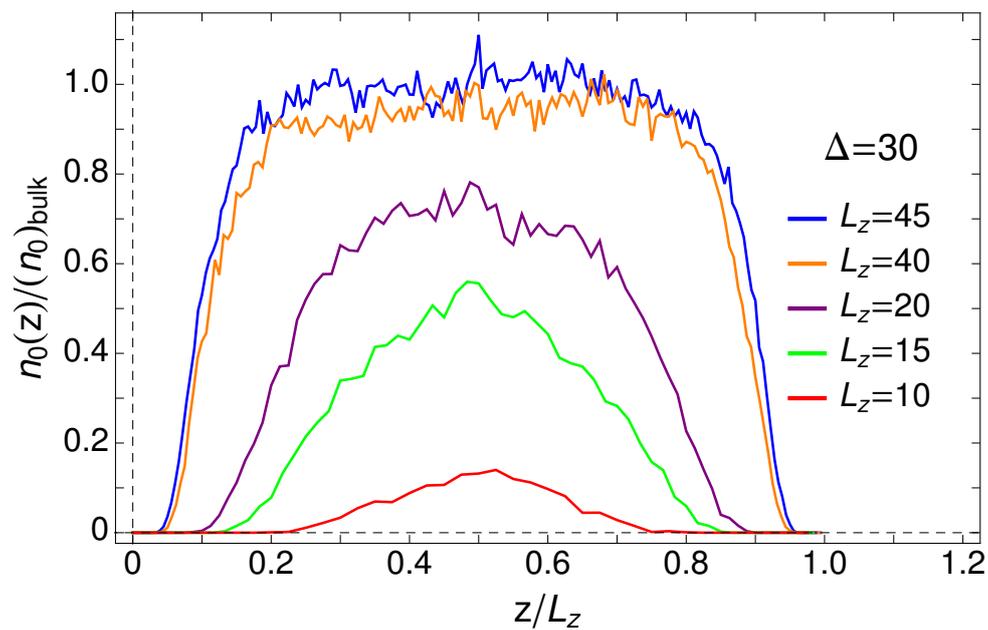


Abbildung 3.4: Dichteprofile in Abhängigkeit der relativen Eindringtiefe  $z/L_z$  für  $\Delta = 30$  und  $L_{xy} = 50$ . Der Bulkwert wird erst für  $L_z \approx 40$  angenommen.

Sowohl  $L_z$  als auch  $\Delta$  spielen also eine wichtige Rolle für die Puddlebildung. Um Atome zu neutralisieren, muss die Energielücke überwunden werden. Bei hohen Werten von  $\Delta$  werden nur wenige Atome neutralisiert. Die Bulkdicke ist dort also geringer als bei kleineren Energielücken. Dies wird in Abbildung 3.6 deutlich. Außerdem sieht man dort gut, dass der Bulkwert sich ab einer bestimmten Dicke nicht mehr ändert.

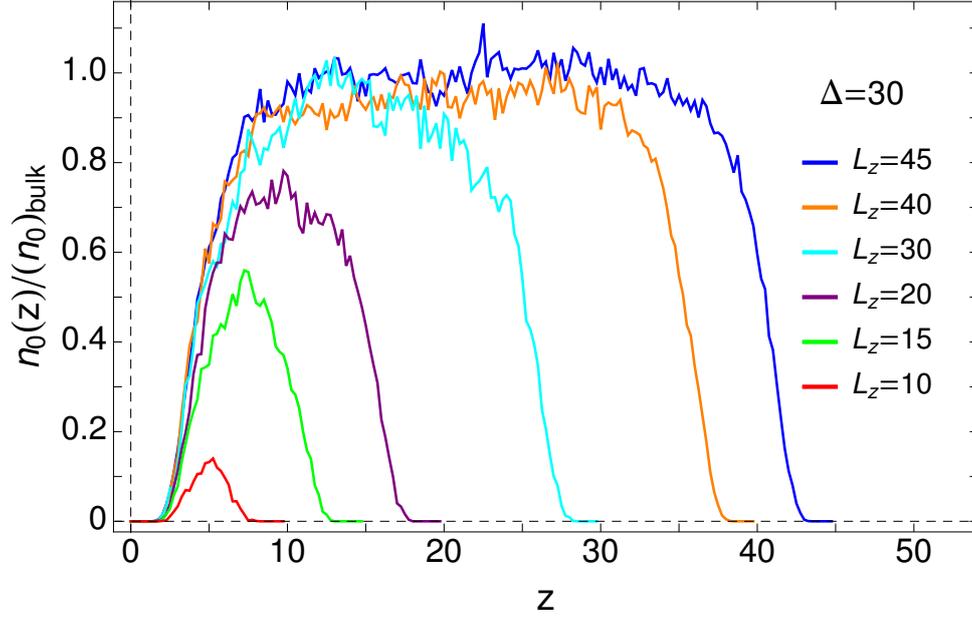


Abbildung 3.5: Dichteprofile in Abhängigkeit der Eindringtiefe  $z$  für  $\Delta = 30$  und  $L_{xy} = 50$  bei verschiedenen Werten von  $L_z$ . Bei kleinen Systemen stellt sich kein konstanter Bulkwert ein.

Eine charakteristische Länge, die sich aus diesen Kurven ablesen lässt, ist definiert durch die Gleichung

$$n_0(L_S) = \frac{(n_0)_{bulk}}{2} \quad (3.6)$$

$L_S$  beschreibt also den Abstand zur Oberfläche, bis zu welchem die Puddlebildung unterdrückt ist. Um diese Länge zu bestimmen, werden die numerisch bestimmten Werte, welche alle den Abstand  $dz = 0,25$  auf der  $z$ -Achse haben, zu einer kontinuierlichen Funktion interpoliert. Mit dieser Funktion wird dann  $L_S$  als Lösung von Gleichung (3.6) gesucht. In Abbildung 3.7 ist  $L_S$  für ein gegebenes Dichteprofil eingezeichnet.

Nun wird  $L_S$  für verschiedene Werte von  $\Delta$  bestimmt und dann in Abhängigkeit der Energielücke aufgetragen, um einen Zusammenhang zwischen den beiden Größen zu finden. Abbildung 3.8 zeigt einen fast linearen Anstieg von  $L_S(\Delta)$ .

Im simulierten Parameterbereich ( $10 \leq \Delta \leq 40$ ) verhält sich  $L_S(\Delta)$  also wie  $a_S \Delta^{1,1} + b_S$  mit Steigung  $a_S = 0,085$  und Offset  $b_S = 0,61$ .

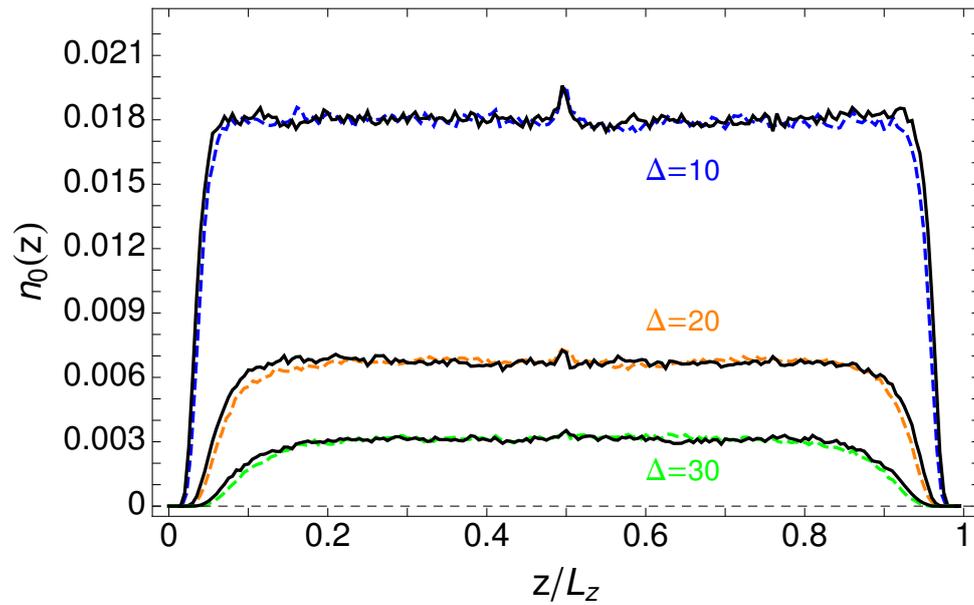


Abbildung 3.6: Dichteprofile in Abhängigkeit der Eindringtiefe  $z/L_z$  für  $\Delta = 10, 20, 30$  und  $L_{xy} = 50$ . Die gestrichelten farbigen Kurven sind mit  $L_z = 45$ , die schwarzen Kurven mit  $L_z = 50$  erstellt. Beide Systemgrößen haben den gleichen Bulkwert.

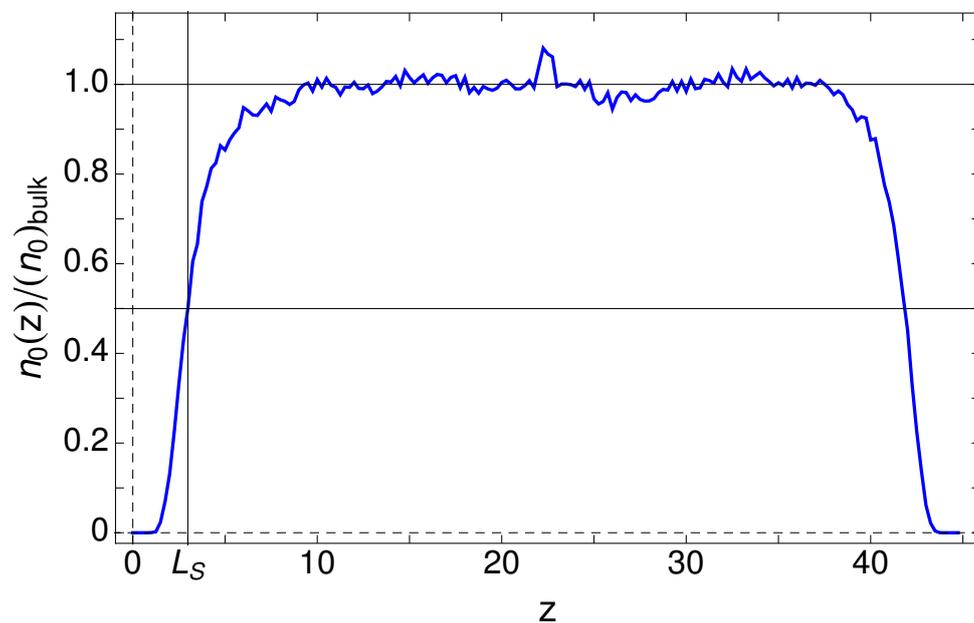


Abbildung 3.7: Bestimmung der oberflächennahen Längenskala  $L_S$  aus einem Dichteprofil für  $\Delta = 20$  und  $L_z = 45$ .  $L_S$  ist definiert als Eindringtiefe, bei der das Dichteprofil gerade die Hälfte des Bulkwerts annimmt.

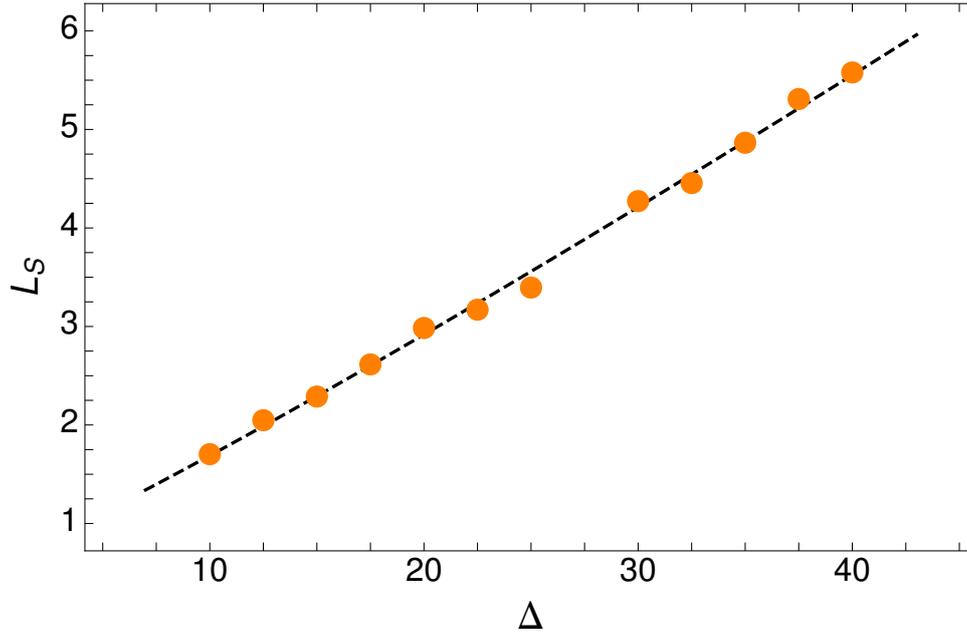


Abbildung 3.8: Typische Länge an der Oberfläche in Abhängigkeit von  $\Delta$ . Der gestrichelte Fit an  $L_S$  ist proportional zu  $\Delta^{1,1}$ .

## 3.2 Längenskalen im Bulk

Im Folgenden wird die Gesamtdichte an neutralen Atomen für verschiedene Systemdicken  $L_z$  betrachtet. Diese ergibt sich aus

$$n_0(L_z) = \frac{\#N_{neutral}(L_z)}{\#N(L_z)} \quad (3.7)$$

$\#N_{neutral}(L_z)$  ist dabei die Gesamtzahl an neutralen Dopants im Volumen  $(L_{xy})^2 L_z$  und  $\#N(L_z) = 2(L_{xy})^2 L_z$  ist die Gesamtzahl an Fremdatomen im System.  $\#N_{neutral}(L_z)$  wird über mehrere Konfigurationen gemittelt, um später eine glatte Kurve für  $n_0(L_z)$  zu erhalten. Eine solche Kurve ist in Abbildung 3.9 zu sehen. Für kleine Systemgrößen ist die Puddlebildung vollständig unterdrückt und es gibt keine neutralen Dopants. Mit wachsender Systemgröße steigt die Dichte dann erst stark an und nähert sich für große  $L_z$  dem Grenzwert  $(n_0)_{bulk}$  an. Aus diesen Kurven lässt sich wieder eine typische Länge  $L_B$  ablesen. Sie ist definiert über:

$$n_0(L_z = L_B) = \frac{1}{2}(n_0)_{bulk} \quad (3.8)$$

$L_B$  beschreibt also die Systemdicke, bei der im Mittel die Puddlebildung im System unterdrückt ist (für feste Werte von  $\Delta$ ). Es besteht ein eindeutiger Unterschied zur Länge  $L_S$ , welche bei fester Systemgröße bestimmt wurde.  $L_S$  beschreibt den Screening-Effekt aufgrund der metallischen Oberflächen, wohingegen Systeme mit einer Dicke  $L_z < L_B$  im gesamten Bulk eine unterdrückte Puddlebildung zeigen würden. Dadurch wäre die Qua-

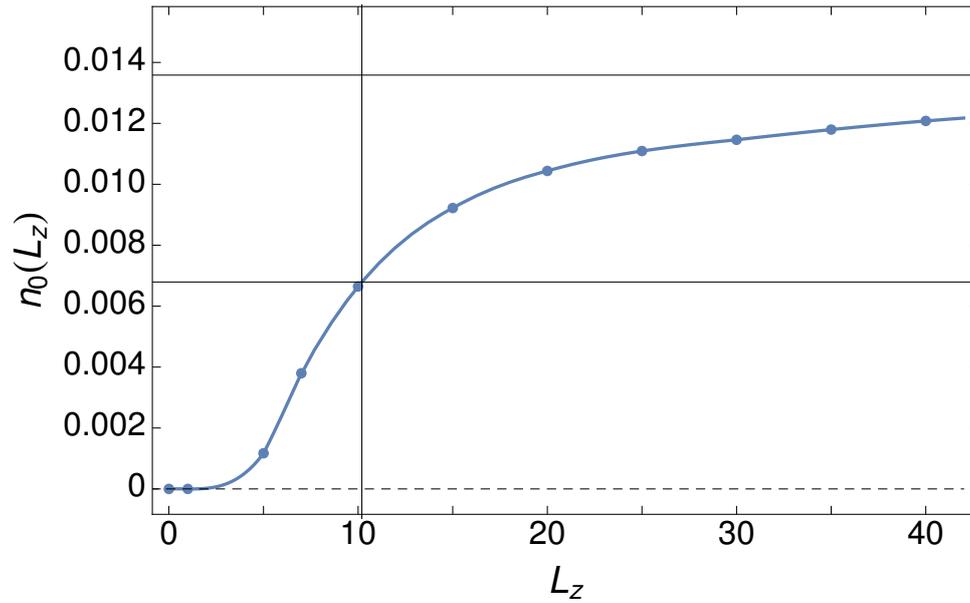


Abbildung 3.9:  $n_0$  in Abhängigkeit von  $L_z$  für  $\Delta = 12,5$ . Die horizontalen Geraden sind der Bulkwert für  $L \rightarrow \infty$  und die Hälfte dieses Grenzwerts. Der vertikale Strich markiert  $L_B$ .

lität der Materialien stark verbessert. Für größere Werte von  $\Delta$  ist der Anstieg von  $n_0(L_z)$  im Bereich kleiner  $L_z$  sehr viel flacher. Dies ist in Abbildung 3.11 zu sehen.

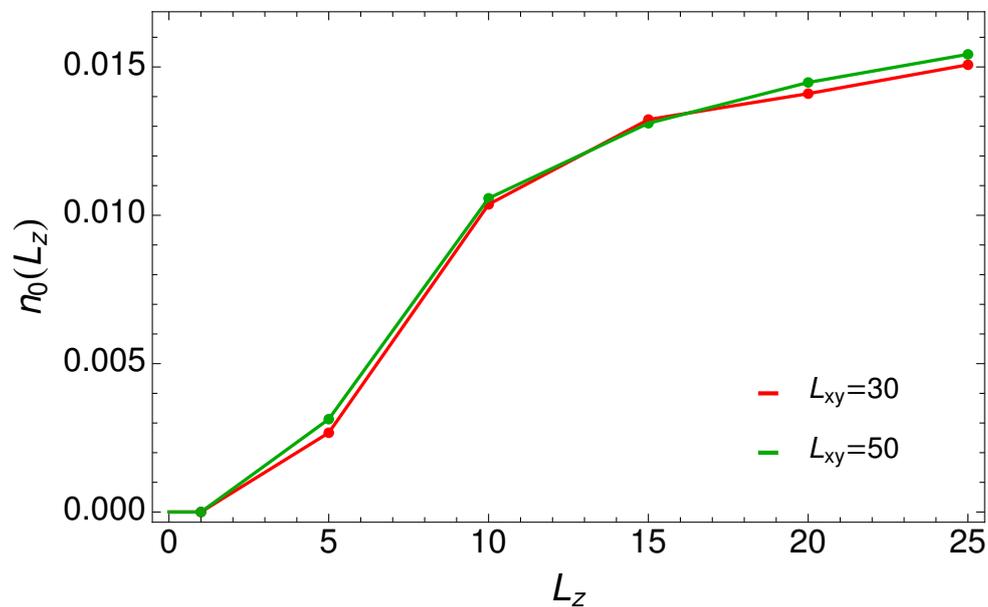


Abbildung 3.10:  $n_0$  in Abhängigkeit von  $L_z$  für verschiedene Systemgrößen  $L_{xy}$ . Die Dichten sind fast gleich, die Abweichung ist auf numerische Ungenauigkeiten zurückzuführen.  $L_{xy}$  hat keinen Einfluss auf  $n_0$ , solange  $L_{xy} > L_z$  gilt.

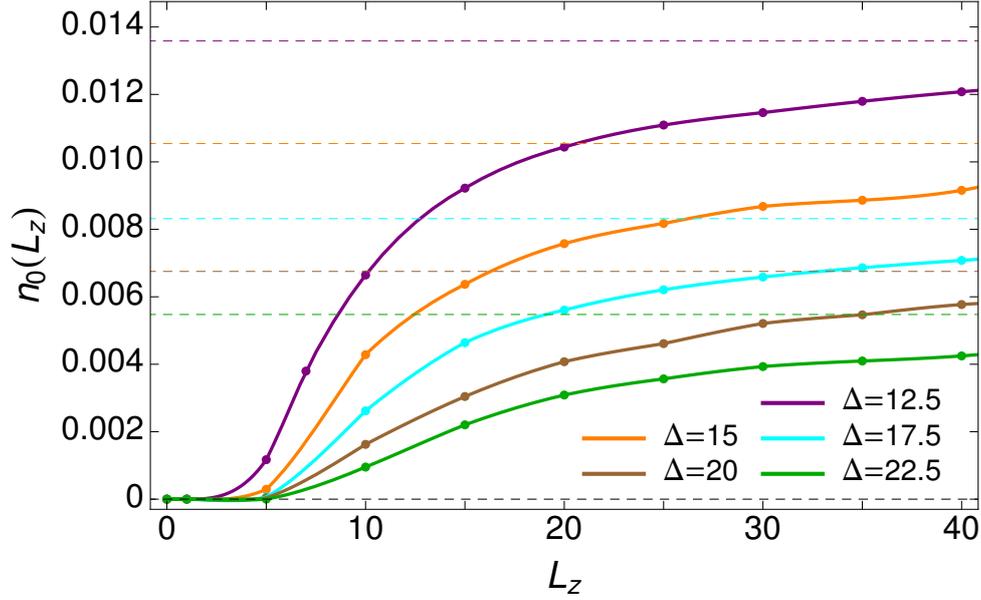


Abbildung 3.11:  $n_0$  in Abhängigkeit von  $L_z$  für verschiedene Werte von  $\Delta$ . Die gestrichelten Linien sind die Grenzwerte  $(n_0)_{bulk}$ , gegen welche die einzelnen Kurven konvergieren.

Bei großen Energielücken werden viel weniger Dopants neutralisiert, da es schwieriger ist, diese Energielücke durch Potentialfluktuationen zu überqueren. Erst ab einer bestimmten Systemgröße sind die Fluktuationen des Potentials stark genug, um den Austausch von Elektronen zu ermöglichen. Dieser Prozess hängt jedoch nicht von der Ausdehnung des Systems in x- und y-Richtung ab, solange  $L_{xy} > L_z$  erfüllt ist. Die Abweichungen der Kurven in Abbildung 3.10 sind auf numerische und statistische Ungenauigkeiten zurückzuführen und nicht auf einen physikalischen Effekt bei unterschiedlichen  $L_{xy}$ . Aufgrund der periodischen Randbedingungen in x- und y-Richtung ist dies ein zu erwartendes Ergebnis.

Trägt man die Werte für  $L_B$  in Abhängigkeit von  $\Delta$  auf, so ergibt sich ein fast linearer Zusammenhang. Dies ist in Abbildung 3.12 zu sehen. Der Verlauf von  $L_B$  im Bereich  $10 \leq \Delta \leq 35$  ist also gegeben durch

$$L_B(\Delta) = a_B \Delta^{1,1} + b_B \quad (3.9)$$

mit den Fitparametern  $a_B = 0,57$  und  $b_B = 0,78$ . Obwohl die beiden Längenskalen  $L_S$  und  $L_B$  völlig unterschiedliche Phänomene beschreiben, zeigen sie die gleiche Abhängigkeit von  $\Delta$ .

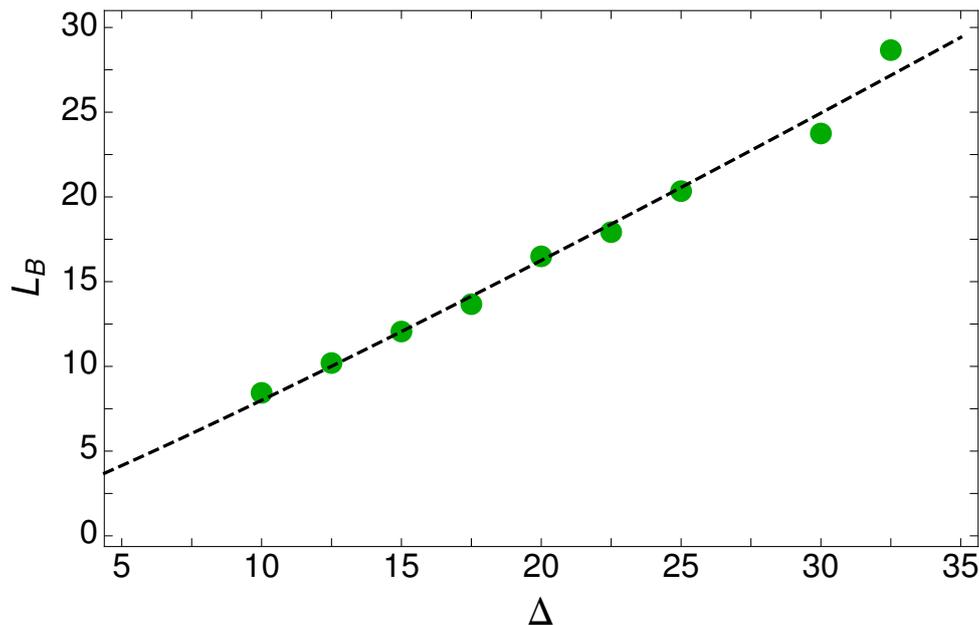


Abbildung 3.12: Verlauf von  $L_B$  für verschiedene Werte von  $\Delta$ . Die gestrichelte Kurve ist ein Fit  $L_B \sim \Delta^{1,1}$ .

Als dritte numerisch bestimmte Größe wird nun die Dichte genau in der Mitte des Systems, also bei  $z = L_z/2$ , betrachtet. Dazu werden die Kurven aus Kapitel 3.1 verwendet, in denen die Dichte in Abhängigkeit der Eindringtiefe  $z$  aufgetragen wurde. Genau in der Mitte befindet sich jedoch der unphysikalische Peak aufgrund der Fallunterscheidung im Potential. Um eine Mittelung in einem kleinen Bereich um  $z = L_z/2$  durchzuführen, wird eine Parabel im Intervall  $0,4 L_z \leq z \leq 0,6 L_z$  an diese Kurve gefittet. Aufgrund des Peaks wird ein Bereich der Breite  $0,04 L_z$  um die Mitte im Fit nicht berücksichtigt. In Abbildung 3.13 ist der Wert der Dichte  $n_0(L_z/2)$  für ein gegebenes Dichteprofil rot markiert. Es handelt sich um den Funktionswert des quadratischen Fits  $f_M(z)$  bei  $z = L_z/2$ . Die Fitfunktion mit Fitparametern  $S_M$  und  $c_M$  hat folgende Form.

$$f_M(z) = S_M \cdot \left( z - \frac{L_z}{2} \right)^2 + c_M \quad (3.10)$$

Auf diese Weise lässt sich die Dichte in der Mitte des Systems für verschiedene Werte der Systemdicke  $L_z$  und der Energielücke  $\Delta$  bestimmen. Trägt man  $n_0(L_z/2)$  als Funktion  $L_z$  auf, so ergeben sich Kurven, welche erst Null sind, dann stark ansteigen und schließlich den konstanten Bulkwert annehmen. Dieser Verlauf ist ähnlich wie bei den Kurven der Gesamtdichte. In Abbildung 3.14 sind solche Kurven für verschiedene Werte von  $\Delta$  zu sehen.

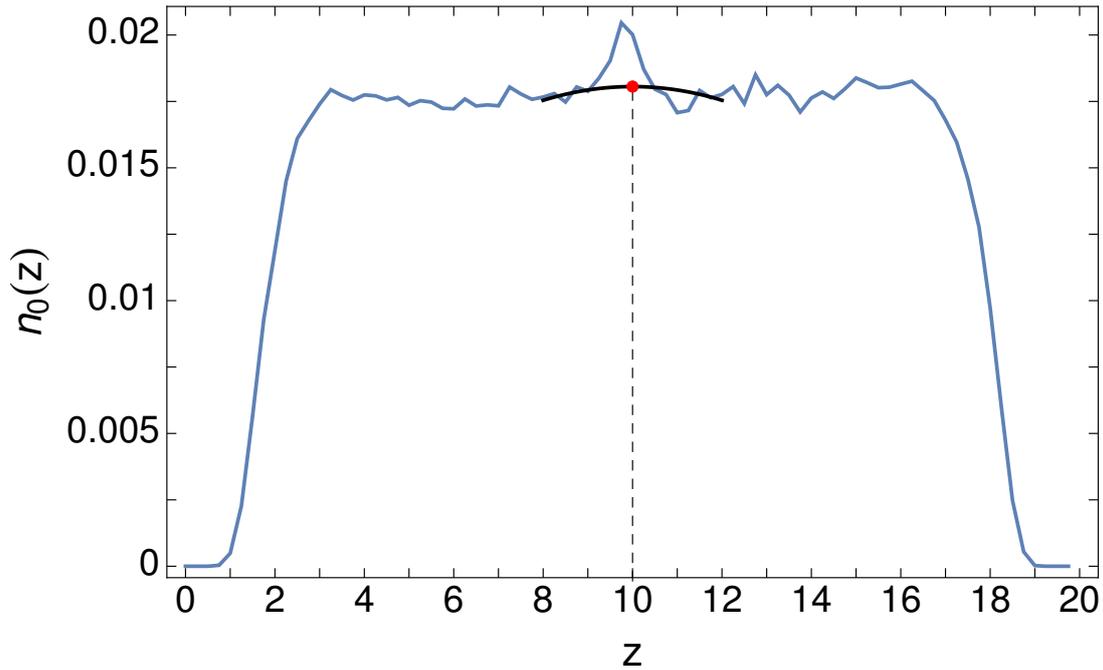


Abbildung 3.13: Dichteprofil  $n_0(z)$  für  $\Delta = 10$ ,  $L_{xy} = 50$  und  $L_z = 20$ . Die schwarze Kurve ist die Fitfunktion  $f_M(z)$  und der rote Punkt markiert die gesuchte Dichte  $n_0(z = L_z/2)$ .

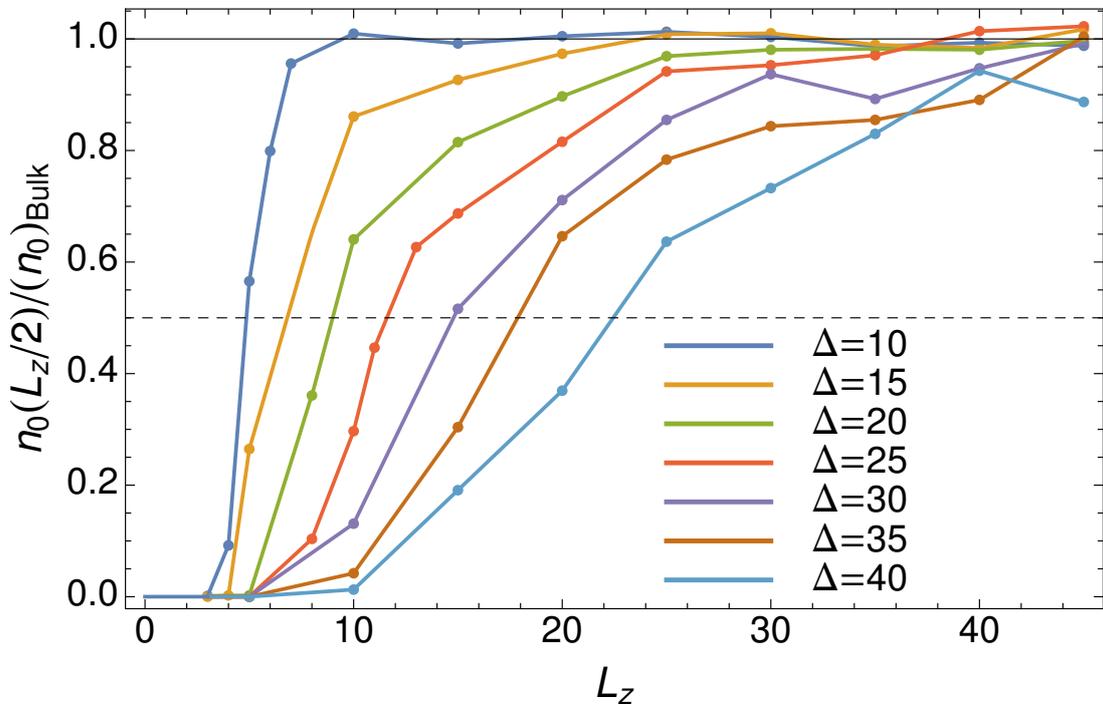


Abbildung 3.14: Verlauf der Dichte  $n_0(L_z/2)$  als Funktion der Systemdicke  $L_z$  für verschiedene Werte von  $\Delta$ . Die durchgezogene schwarze Linie markiert den Bulkwert  $(n_0)_{bulk}$ . Der Schnittpunkt der Kurven mit der gestrichelten Linie (halber Bulkwert) liefert wieder eine typische Länge.

Die typische Systemdicke, bei der Puddlebildung in der Mitte des Systems unterdrückt ist, ist gegeben durch

$$n_0(L_M/2) = \frac{1}{2}(n_0)_{bulk} \quad (3.11)$$

$L_M$  hängt, wie die bereits bestimmten charakteristischen Längen, von  $\Delta$  ab. Dies ist in Abbildung 3.14 gut zu sehen. Auch hier erweist sich ein fast linearer Zusammenhang zwischen Energielücke und Längenskala als bestmöglicher Fit.

$$L_M(\Delta) = a_M \Delta^{1,1} + b_M \quad (3.12)$$

Die Fitparameter sind  $a_M = 0,35$  und  $b_M = 0,06$ . Der Anstieg der Kurve für  $\Delta = 40$  bei großen Werten von  $L_z$  (siehe Abbildung 3.14) ist ein statistischer Fehler. Durch Mittelung über mehr Konfigurationen würde man hier eine glatte Kurve erhalten.

Bei allen numerisch bestimmten Längenskalen ist die größte Fehlerquelle dadurch gegeben, dass der Bulkwert der Dichte nicht genau bekannt ist. Die Bulkdicke wurde immer aus den Dichteprofilen für die größten Systeme bestimmt, indem der Mittelwert des Plateaus gebildet wurde. Für niedrige Energielücken ist dieses Verfahren richtig, da man hier den gleichen Mittelwert bei verschiedenen Systemgrößen erhält. Bei Werten von  $\Delta \gtrsim 25$  ist es jedoch möglich, dass  $(n_0)_{bulk}$  in Wirklichkeit höher ist. Eine mögliche Lösung wird am Ende dieser Arbeit vorgeschlagen.

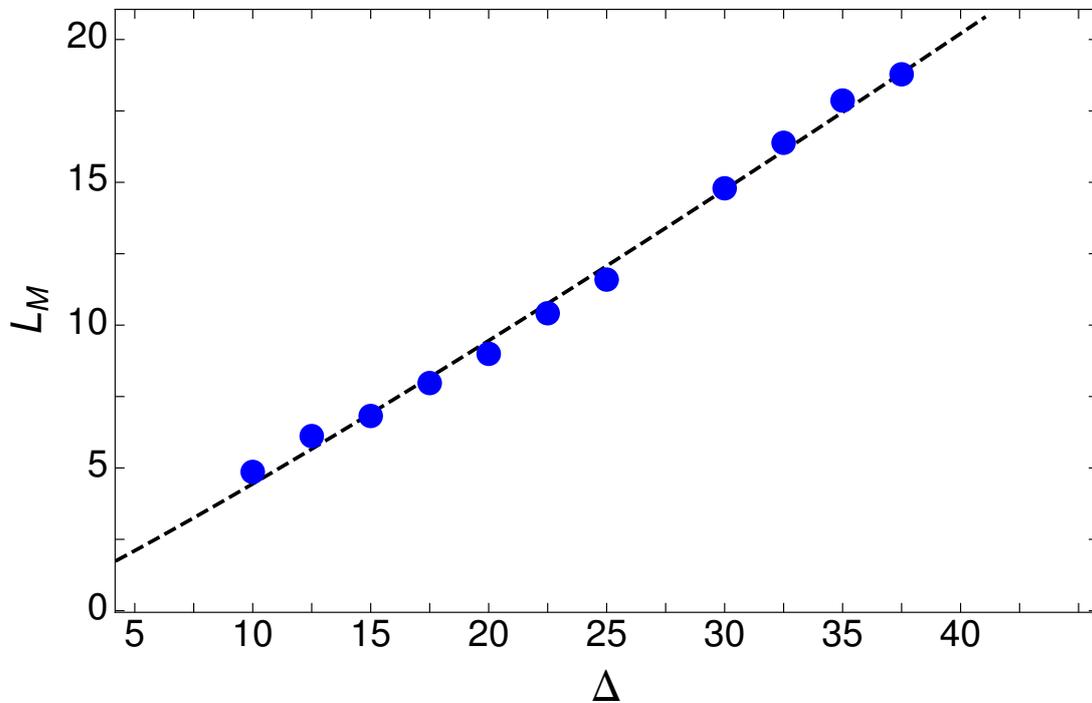


Abbildung 3.15: Längenskala  $L_M$  in Abhängigkeit von  $\Delta$ . Der Fit an die numerischen Werte ergibt wieder  $L_M \sim \Delta^{1,1}$ .

## 4 Skalenanalyse

Alle bisherigen Ergebnisse für Längenskalen in TIs sind im Bereich  $10 \leq \Delta \leq 40$  gefunden worden. Experimentell realisierte Systeme haben jedoch  $\Delta \approx 100$ . Eine wichtige Frage ist nun, ob man die numerisch bestimmten Längen für größere  $\Delta$  mithilfe der Beziehung  $L_i = a_i \Delta^{1,1} + b_i$  extrapolieren kann. Dafür sollen die Längenskalen noch auf eine andere Weise bestimmt werden, bei der numerische Fehler, wie finite-size-Effekte, nicht auftreten. Ein Skalenargument von Efros und Shklovskii für typische Längen in TIs liefert eine solche Vorhersage [2]. Für das Potential im Anfangszustand (alle Dopants geladen) wird folgende Überlegung gemacht. In einem Volumen  $V \sim L^3$  gibt es im Durchschnitt  $nL^3$  Ladungen, wobei  $n$  die Dichte der Dopants ist. Obwohl das Gesamtsystem elektrisch neutral ist, kompensieren sich positive und negative Ladungen in einem solchen Volumen nicht genau. Die Ladung innerhalb des Volumens  $V$  ist dann gegeben durch  $Q_L \sim \pm\sqrt{nL^3}$ . Damit ergibt sich für das Potential

$$\phi_L \sim \frac{Q_L}{L} \sim \frac{\sqrt{L^3}}{L} \sim \sqrt{L} \quad (4.1)$$

Damit es zur Puddlebildung kommt, muss die Amplitude des Potentials groß genug sein, um die Energielücke zu übertreten. Es muss also  $\phi_L \sim \pm\Delta/2$  gelten. Damit ergibt sich dann die Beziehung  $\sqrt{L} \sim \Delta$  und daraus folgt für die Länge  $L_g$ , auf welcher sich das Potential um  $\Delta$  ändert

$$L_g \sim \Delta^2 \quad (4.2)$$

Dieses Verhalten widerspricht jedoch eindeutig den numerischen Ergebnissen aus Abschnitt 3. Da das Potential im obigen Skalenargument nur durch die Ladung innerhalb eines Volumens  $V$  bestimmt wird und keine Oberflächeneffekte miteinbezogen werden, kann man keinen Vergleich zur Längenskala  $L_S$  ziehen, welche in der Nähe der Oberfläche relevant ist. Doch auch die Längenskalen des Gesamtsystems zeigen ein Verhalten wie  $\Delta^\gamma$  mit  $\gamma = 1,1 \neq 2$ . Hier gibt es also einen Unterschied zwischen den beiden Vorhersagen, den es zu untersuchen gilt. Aus Gleichung (4.2) lässt sich auch eine Aussage über die Ladungsdichte  $\rho$  treffen. Sie ist gegeben durch  $\rho = Q_L/V \sim \sqrt{L^3}/L^3 = L^{-3/2} \sim \Delta^{-3}$ .

### 4.1 Verteilung des Potentials

Um ein Skalenargument für ein System mit endlicher Dicke  $L_z$  und zwei metallischen Oberflächen zu entwickeln, wird das Anfangspotential betrachtet. Alle Dopants sind also

geladen, analog zum obigen Argument von Efros und Shklovskii. Das zufällige Potential bei  $z = L_z/2$  berechnet sich dann über

$$\phi(L_z/2) = \sum_{n=1}^{2L_{xy}L_{xy}L_z} \pm V_{eff}(z_i, r_i, L_z/2) \quad (4.3)$$

Hierbei ist  $r_i = \sqrt{x_i^2 + y_i^2}$ ,  $z_i$  eine Zufallszahl zwischen 0 und  $L_z$  und  $x_i, y_i$  sind Zufallszahlen zwischen  $-L_{xy}/2$  und  $L_{xy}/2$ . Das wechselnde Vorzeichen der einzelnen Summanden beschreibt die zufällige Verteilung von jeweils  $(L_{xy})^2 L_z$  Akzeptoren und Donatoren im System.

Nach dem zentralen Grenzwertsatz ist  $\phi(L_z/2)$  gaußverteilt mit

$$p(\phi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\phi}{\sigma}\right)^2\right] \quad (4.4)$$

Die Standardabweichung des Potentials ergibt sich aus  $\sigma = \sqrt{\text{Var}(\phi)}$ , wobei  $\langle\phi\rangle = 0$  gilt. Damit ergibt sich

$$\text{Var}(\phi) = \langle\phi^2\rangle - \langle\phi\rangle^2 = \langle\phi^2\rangle \quad (4.5)$$

Also lässt sich die Halbwertsbreite berechnen über  $\sigma = \sqrt{\langle\phi^2\rangle}$ . Berechnet man die Summe aus Gleichung (4.3) für viele Zufallskonfigurationen, kann man ein Histogramm anfertigen und die Gaußverteilung mit Erwartungswert  $\langle\phi\rangle = 0$  bestätigen.

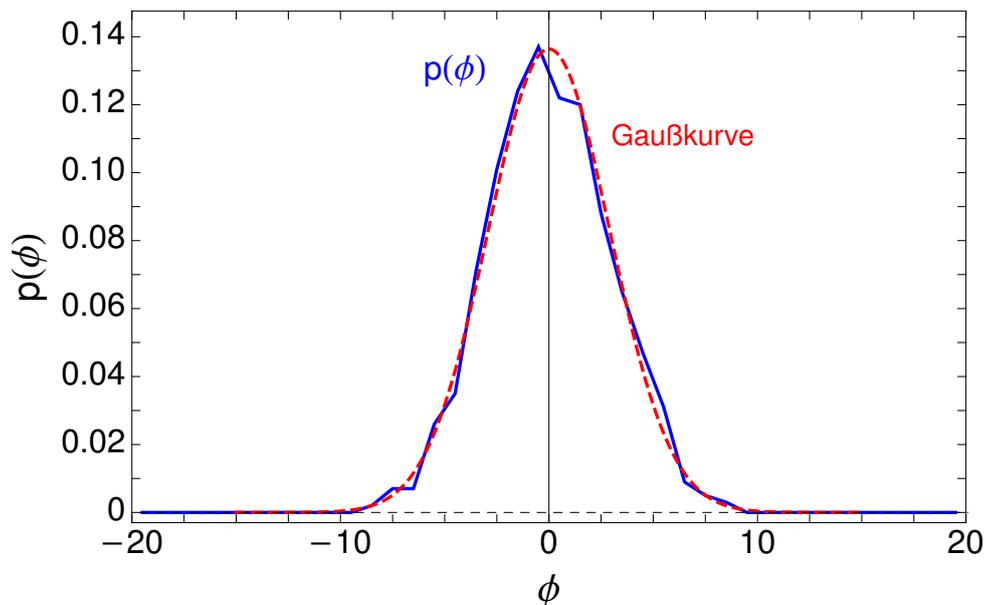


Abbildung 4.1: Histogramm des Potentials für 1000 Konfigurationen mit  $L_{xy} = 30$ ,  $L_z = 5$ . Die gestrichelte rote Kurve ist die dazugehörige Gaußverteilung mit  $\sigma = 2,9$ .

Das zweite Moment des Potentials lässt sich berechnen über:

$$\langle \phi^2(r) \rangle = \int \int \frac{\langle \rho(r') \rho(r'') \rangle}{|r - r'| |r - r''|} d^3 r' d^3 r'' \quad (4.6)$$

Für den Erwartungswert der Ladungsdichte  $\rho$  gilt:

$$\langle \rho(r') \rho(r'') \rangle = \bar{n} \delta^3(r' - r'') \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle \phi^2(r) \rangle &= \int \int \frac{\bar{n} \delta^3(r' - r'')}{|r - r'| |r - r''|} d^3 r' d^3 r'' \\ &= \int \frac{\bar{n}}{|r - r'|^2} d^3 r' \end{aligned} \quad (4.8)$$

Die Standardabweichung der Verteilung (4.4) lässt sich also aus dem Potential eines einzelnen Dopants berechnen.

$$\sigma^2(L_z, L_{xy}) = 2 \int_0^{L_z} \int_{-L_{xy}/2}^{L_{xy}/2} \int_{-L_{xy}/2}^{L_{xy}/2} \left( V_{eff}(z, \sqrt{x^2 + y^2}, L_z/2) \right)^2 dx dy dz \quad (4.9)$$

Durch den Faktor 2 vor dem Integral ergibt sich, dass die Standardabweichung des Potentials (4.3) und  $\sigma$  nach Gleichung (4.9) bei gleichen Parametern  $L_{xy}$  und  $L_z$  denselben Wert liefern, und die beiden Beschreibungen damit äquivalent sind.

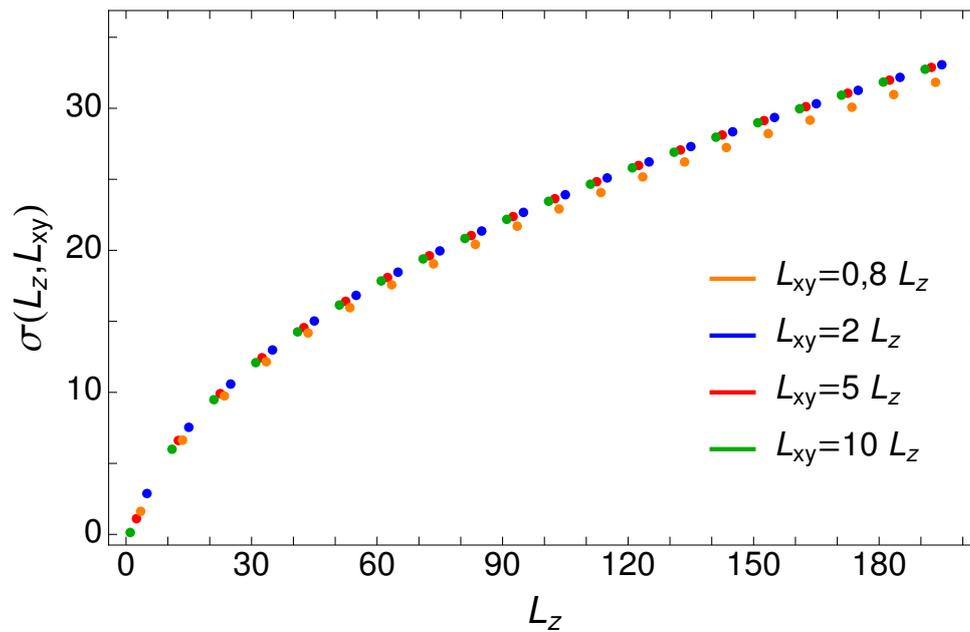


Abbildung 4.2: Halbwertsbreite  $\sigma$  in Abhängigkeit von  $L_z$  für verschiedene Werte von  $L_{xy}$ . Man sieht klar, dass  $\sigma$  für  $L_{xy} > L_z$  nicht von der Wahl von  $L_{xy}$  abhängt. Bei  $L_{xy} < L_z$  sieht man Abweichungen von diesem Verlauf.

Nun wird  $\sigma(L_z, L_{xy})$  für verschiedene Werte von  $L_{xy}$  berechnet. Aufgrund der periodischen Randbedingungen in x- und y-Richtung bei den numerischen Simulationen sollte  $L_{xy}$  auch bei der Berechnung von  $\sigma$  keinen Einfluss haben, solange  $L_{xy} > L_z$  gilt. Dann kann man später einen sinnvollen Vergleich zwischen den numerischen Ergebnissen und der aus  $\sigma$  berechneten Längenskala ziehen.

Man sieht bereits in Abbildung 4.2, dass  $\sigma$  sich wohl proportional zu  $\sqrt{L_z}$  verhält (für große  $L_z$ ). Um diesen Zusammenhang genauer zu quantifizieren und eine mögliche Korrektur zu bestimmen, wird  $1/L_z$  gegen  $\sigma/\sqrt{L_z}$  aufgetragen (siehe Abbildung 4.3).

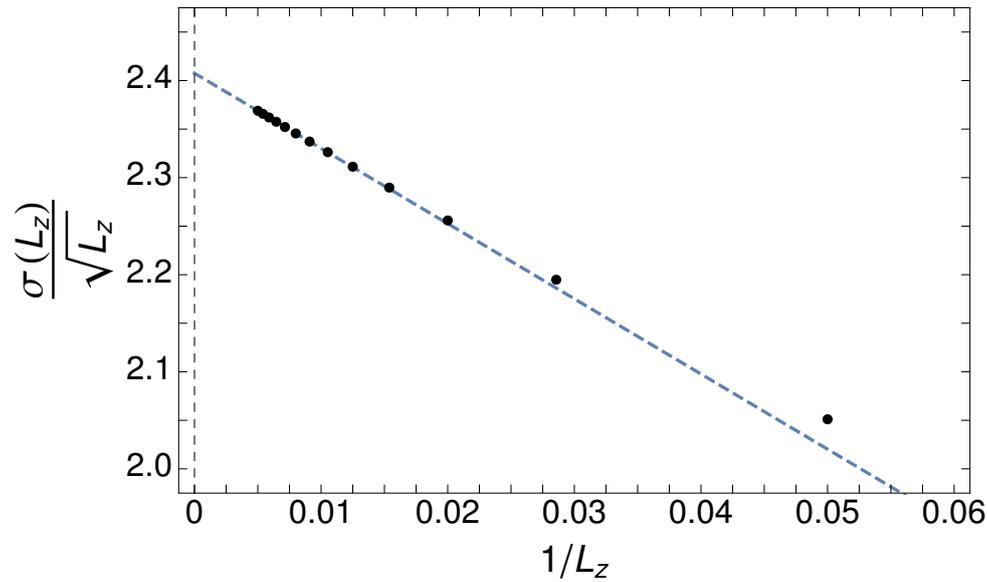


Abbildung 4.3: Bestimmung einer linearen Korrektur zum Verhalten von  $\sigma$  für große  $L_z$ .

Als Fitparameter für die Gerade  $\beta/L_z + \alpha$  ergeben sich  $\alpha = 2,41$  und  $\beta = -7,75$ . Damit ist die Standardabweichung näherungsweise gegeben durch

$$\tilde{\sigma}(L_z) = 2,41\sqrt{L_z} - \frac{7,75}{\sqrt{L_z}} \quad (4.10)$$

Für große  $L_z$  lässt sich die Halbwertsbreite in dieser Näherung schreiben als

$$\tilde{\sigma}(L_z) \approx 2,41\sqrt{L_z} \quad (4.11)$$

Man sieht, dass  $\tilde{\sigma}$  nach Gleichung (4.10) schon für kleine  $L_z$  den Verlauf von  $\sigma$  sehr gut widerspiegelt, während die  $\sqrt{L_z}$ -Näherung sich erst bei großen  $L_z$  der echten Kurve annähert (siehe Abbildung 4.4).

Für kleine  $L_z$  ist die Puddlebildung unterdrückt, da  $\sigma(L_z) < \Delta$  gilt. Im Skalenargument von Efros und Shklovskii, welches zu Beginn dieses Kapitels erläutert wurde, wird die Längenskala  $L_g$  aus der Gleichung  $\sigma(L_g) \sim \Delta$  bestimmt. Dies führt dann zur Beziehung  $L_g \sim \Delta^2$ .

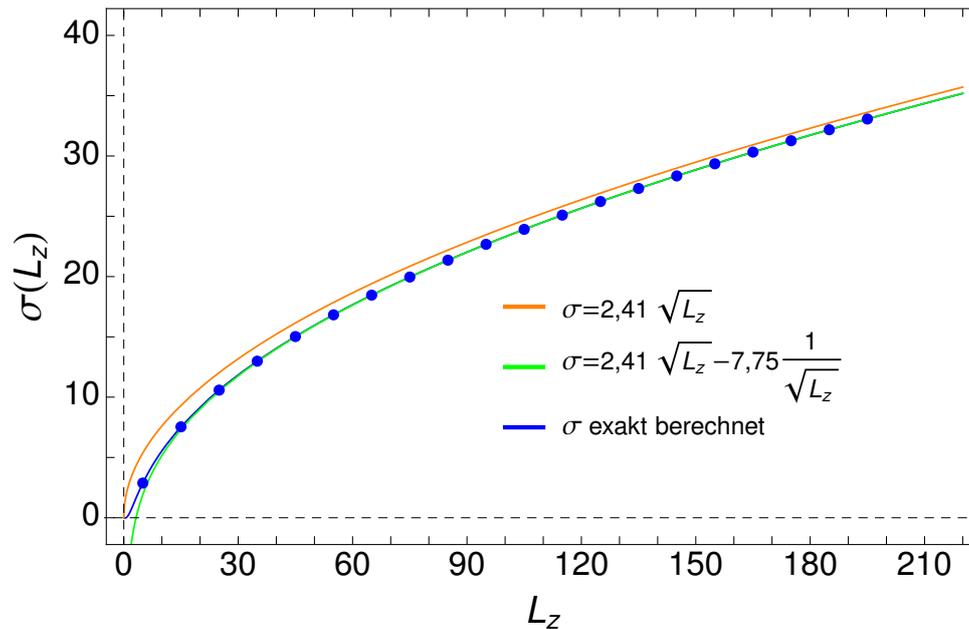


Abbildung 4.4: Standardabweichung in Abhängigkeit der Systemgröße  $L_z$ . Die blauen Punkte sind exakt berechnet nach Gleichung (4.9) und zur gleichfarbigen Kurve interpoliert, die orangene und grüne Kurve sind die beiden Näherungslösungen.

## 4.2 Wahrscheinlichkeit für Puddlebildung

Puddlebildung findet statt, wenn  $|\phi| > \Delta/2$  gilt. Die Wahrscheinlichkeit, dass das gaußverteilte Potential des Anfangszustands diese Bedingung erfüllt, ist gegeben durch

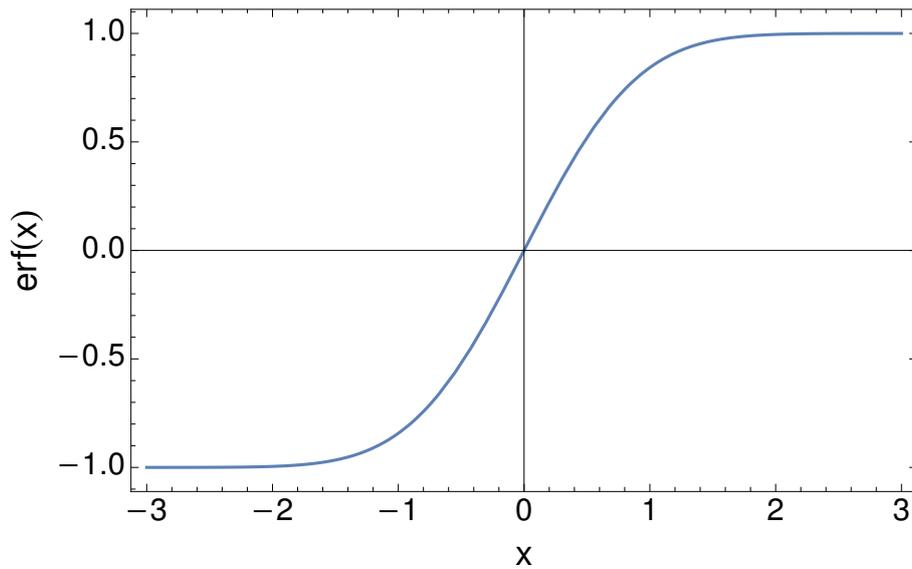
$$\begin{aligned}
 P_L \left( |\phi| > \frac{\Delta}{2} \right) &= 2 \cdot \int_{\Delta/2}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} \exp \left( -\frac{x^2}{2 \sigma^2} \right) dx \\
 &= 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{\Delta}{2\sqrt{2} \sigma} \right)
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

$\operatorname{erf}(x)$  ist die gaußsche Fehlerfunktion. Ihr Verlauf ist in Abbildung 4.5 zu sehen. Sie ist definiert durch

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\tau^2} d\tau \tag{4.13}$$

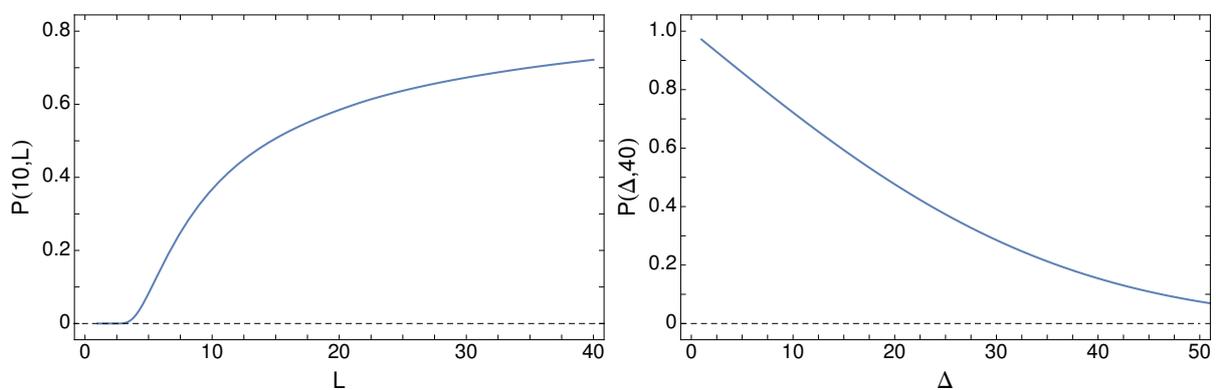
Man kann nun  $\sigma(L_z)$  aus Gleichung (4.9) in die Wahrscheinlichkeit (4.12) einsetzen, um den Verlauf der Wahrscheinlichkeit für Puddlebildung zu erhalten.

In Abbildung 4.6 sieht man den Verlauf der Wahrscheinlichkeit, einmal für variable Systemgrößen  $L$  und einmal in Abhängigkeit der Energielücke  $\Delta$ . Für wachsende Dicke bei

Abbildung 4.5: Verlauf der gaußschen Fehlerfunktion  $\text{erf}(x)$ .

konstanter Energielücke steigt die Wahrscheinlichkeit für Puddlebildung erst stark an und flacht dann ab. Bei sehr kleinen Systemen ( $L < 5$ ), ist die Puddlebildung komplett unterdrückt, die Wahrscheinlichkeit ist hier Null. Im rechten Plot sieht man, dass die Wahrscheinlichkeit mit steigendem  $\Delta$  abnimmt, solange die Systemgröße konstant ist. Die Gesamtdichte von neutralen Atomen steht in Beziehung zur oben berechneten Wahrscheinlichkeit, da diese Dichte ebenfalls den Volumenanteil beschreibt, in welchem der Betrag des Potentials  $\Delta/2$  überschreitet. Daraus lässt sich dann eine typische Länge  $L_C$  des Systems definieren.

$$P_{L_C} \left( \left| \phi \right| > \frac{\Delta}{2} \right) \stackrel{!}{=} \zeta n_0(\Delta) \quad (4.14)$$

Abbildung 4.6: Wahrscheinlichkeit, dass Puddlebildung bei variierender Länge und  $\Delta = 10$  (links) sowie bei  $L = 40$  in Abhängigkeit von  $\Delta$  (rechts) auftritt.

Da man die Wahrscheinlichkeit aus dem unkorrelierten Potential bestimmt, wurde die Abschirmung des Potentials durch Austausch von Elektronen zwischen geladenen Dopants nicht berücksichtigt. Aus diesem Grund kann man über den Faktor  $\zeta$  auf der rechten Seite der Gleichung keine Aussagen machen. Im Folgenden wird  $\zeta = 1$  angenommen.

Um die typische Länge  $L_C$  zu erhalten, sucht man Nullstellen der Funktion  $P_L(|\phi| > \frac{\Delta}{2}) - n_0(\Delta)$  in  $L$ , abhängig von  $\Delta$ .

### 4.3 Dichteverlauf in Abhängigkeit der Energielücke

Damit man aus Gleichung (4.14) eine sinnvolle Längenskala extrahieren kann, ist es notwendig, den Verlauf der Dichte neutraler Atome zu kennen. Im Bereich  $10 \leq \Delta \leq 40$  wird eine Interpolation der numerisch bestimmten Werte verwendet.

Für das asymptotische Verhalten von  $n_0$  bei großen Energielücken gibt es jedoch keine exakte Beschreibung. Möglich wäre hier, die Vorhersage aus dem Skalenargument von Efros und Shklovskii zu verwenden, welche  $n_0 \sim \Delta^3$  liefert. Da dieses Verhalten jedoch aus der  $\Delta$ -Abhängigkeit der Screening-Länge folgt, fehlen hier logarithmische Korrekturen. Diese Abweichung muss später noch berücksichtigt werden.

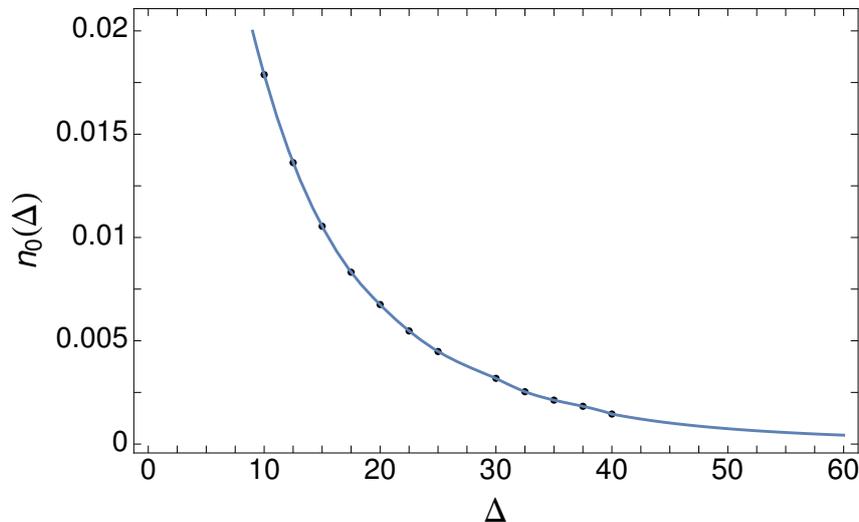


Abbildung 4.7: Interpolation der numerischen Werte für  $n_0$ . Für  $\Delta > 40$  wurde  $n_0 \sim \Delta^{-3}$  verwendet.

Sollten die Korrekturen groß ausfallen, könnte sich  $n_0$  auch wie  $\Delta^{-2}$  verhalten. Diese zweite Vermutung für die Asymptotik kann später als Abschätzung für den Fehler der Längenskala genutzt werden.

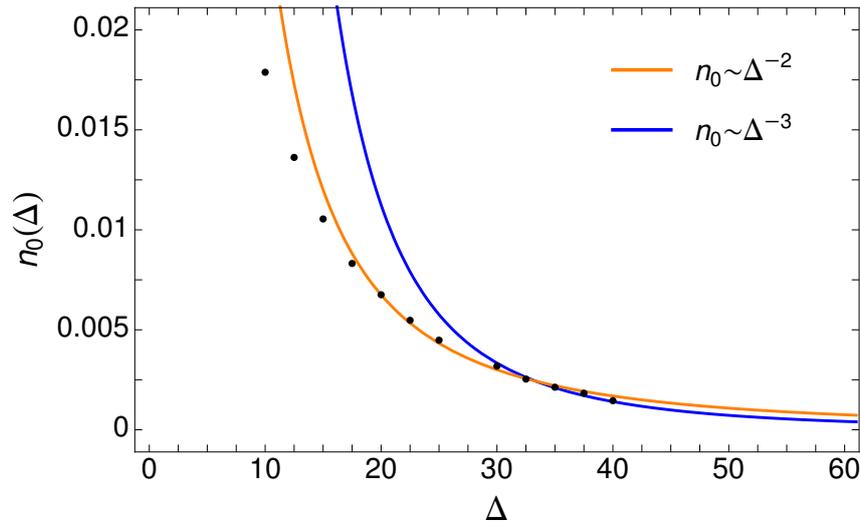


Abbildung 4.8: Dichte der neutralen Atome in Abhängigkeit von  $\Delta$ . Die orangene Kurve ist  $n_0 = 2,7 \cdot \Delta^{-2}$  und die blaue Kurve  $n_0 = 90 \cdot \Delta^{-3}$ .

## 4.4 Bestimmung einer Längenskala

Nun kann man die Gleichung  $1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\Delta}{2\sqrt{2}\sigma(L_C)}\right) \approx n_0(\Delta)$  mit  $\sigma$  aus Gleichung (4.9) und  $n_0 \sim \Delta^{-3}$  nach  $L_C$  lösen. Es ist nicht möglich, einen analytischen Ausdruck für die Lösung dieser Gleichung anzugeben. Für große Systeme kann man die Gleichung jedoch mithilfe einer Näherung exakt lösen. Hier liefert Gleichung (4.11) eine gute Beschreibung von  $\sigma$ . Damit ist  $L_C$  dann definiert über

$$1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\Delta}{2\sqrt{2} \cdot a\sqrt{L_C}}\right) = n_0 \quad (4.15)$$

Diese Gleichung lässt sich dann exakt nach  $L_C$  lösen.

$$L_C(\Delta) = \frac{\Delta^2}{8(a^2 \operatorname{InverseErf}(1 - n_0))^2} \quad (4.16)$$

$\operatorname{InverseErf}$  ist dabei die inverse Funktion der gaußschen Fehlerfunktion und  $a = 2,41$  ist der Fitparameter aus Gleichung (4.11). Nun kann man  $n_0 = 90 \Delta^{-3}$  einsetzen und eine Taylorentwicklung von Gleichung (4.16) um  $\Delta \rightarrow \infty$  machen.

$$L_C(\Delta) = \frac{0,043 \Delta^2}{-9,45 + 6 \ln(\Delta) - \ln(-9,45 + 6 \ln(\Delta))} + O(\Delta^{-2}) \quad (4.17)$$

Da  $\ln(\ln(\Delta)) \ll \ln(\Delta)$  gilt, ist  $L_C$  in führender Ordnung gegeben durch

$$L_C(\Delta) = \frac{0,043 \Delta^2}{6 \ln(\Delta)} \approx \frac{\Delta^2}{139 \ln(\Delta)} \quad (4.18)$$

Im Vergleich zum Argument von Efros und Shklovskii ist die Längenskala also durch ein quadratisches Verhalten in  $\Delta$  mit zusätzlichen logarithmischen Korrekturen gegeben. Wie bereits bei der Betrachtung der Dichte erwähnt, sollte es auch bei der  $\Delta$ -Abhängigkeit von  $n_0$  zu solchen Korrekturen kommen. Beiträge durch solche Korrekturen wären jedoch vernachlässigbar im Rahmen der Präzision von Gleichung (4.18). Die führende Ordnung bleibt  $\Delta^2/\ln(\Delta)$ .

Untersucht man den Verlauf von  $L_C$ , so fällt auf, dass sich die typische Länge für kleine Energielücken ( $\Delta < 40$ ) linear verhält (siehe Abbildung 4.9). Für größere  $\Delta$  nimmt die Steigung zu. Diese Entdeckung ist insofern interessant, da die linearen Längenskalen aus der Numerik in ebenjenem Bereich aufgenommen wurden, wo auch das Skalenargument ein lineares Verhalten in  $\Delta$  zeigt. Dies wird in Kapitel 5 genauer untersucht.

In Abbildung 4.10 sieht man, wie sehr die logarithmischen Korrekturen zum Verlauf von  $L_C$  beitragen. Die Kurven für verschiedene Werte von  $\zeta$  sind alle viel flacher als die Efros-Shklovskii-Längenskala.

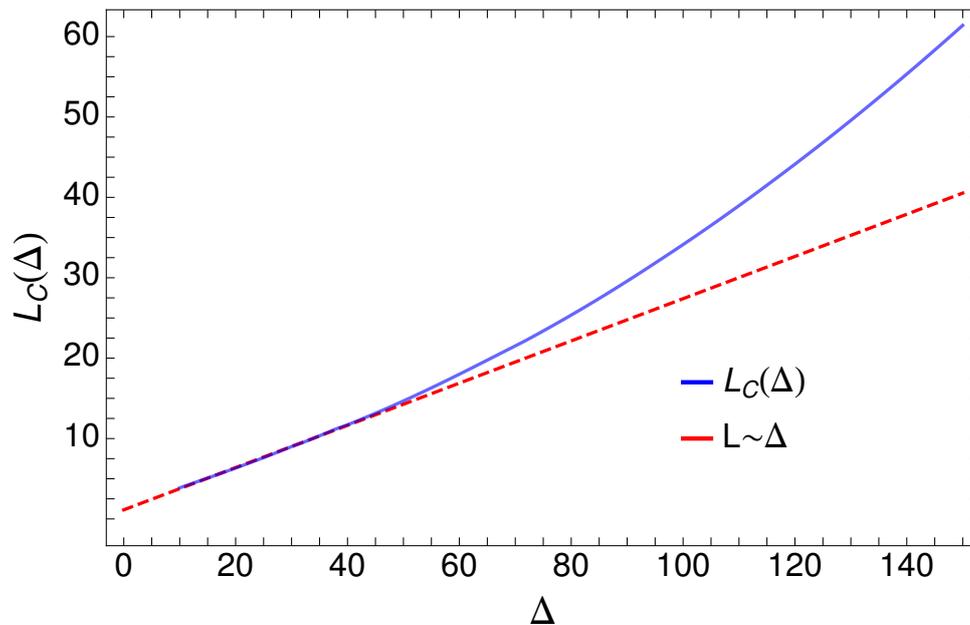


Abbildung 4.9: Verlauf von  $L_C$ . Für kleine  $\Delta$  hat man ein lineares Verhalten, angedeutet durch die gestrichelte rote Gerade, für größere  $\Delta$  nimmt die Steigung zu.

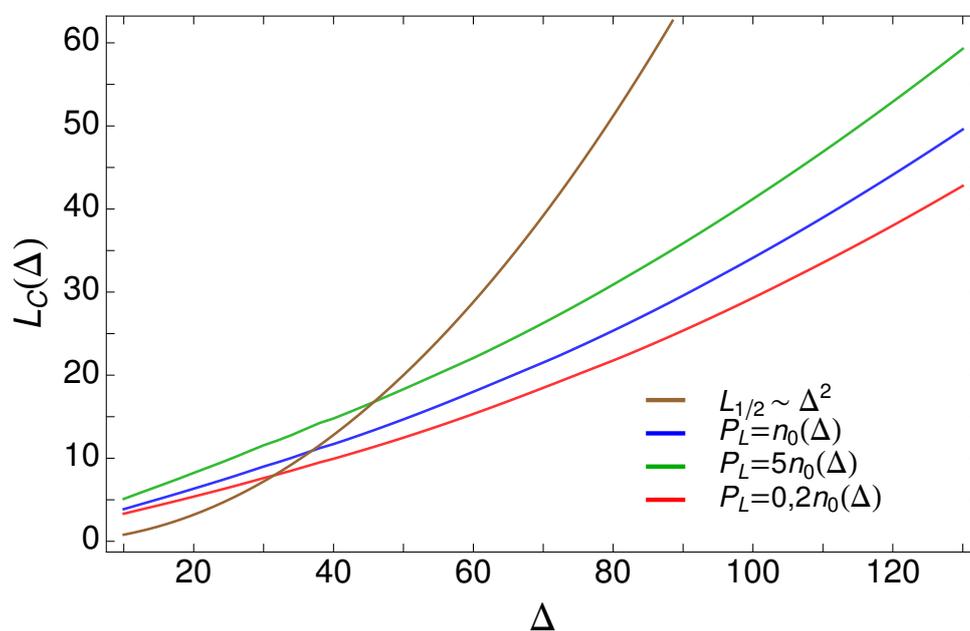


Abbildung 4.10: Verlauf von  $L_C$  für verschiedene Werte von  $\zeta$  in Gleichung (4.14). Außerdem ist eine quadratisch wachsende Kurve dargestellt, welche sich aus dem Argument von Efros und Shklovskii ergibt.

## 5 Vergleich der Längenskalen

Um einen Vergleich zwischen den vier Längenskalen zu ziehen, wird zuerst das Verhalten im Bereich kleiner Energielücken ( $10 \leq \Delta \leq 40$ ) betrachtet. Wie bereits erwähnt, zeigen alle numerisch bestimmten Längen in diesem Bereich einen Verlauf  $L_i \sim \Delta^{1,1}$  mit  $i = S, B, M$ . In Abbildung 5.1 sind die Längenskalen  $L_i$  und ihre Interpolationen  $a_i \Delta^{1,1} + b_i$  zu sehen. Diese  $\Delta$ -Abhängigkeit unterscheidet sich stark von dem  $\Delta^2$ -Verhalten der Efros-Shklovskii-Längenskala. Das Skalenargument aus Kapitel 4 liefert in diesem Bereich ebenfalls ein fast lineares Verhalten. Durch Multiplikation mit einem konstanten Faktor und Addition eines Offsets kann  $L_C$  auf jede der drei numerischen Kurven gelegt werden. Beide Faktoren sind von der Größenordnung 1. Das Skalenargument beschreibt also alle drei numerisch bestimmten Längenskalen. Desweiteren zeigen das Screening im Bulk und an der Oberfläche das gleiche Skalenverhalten.

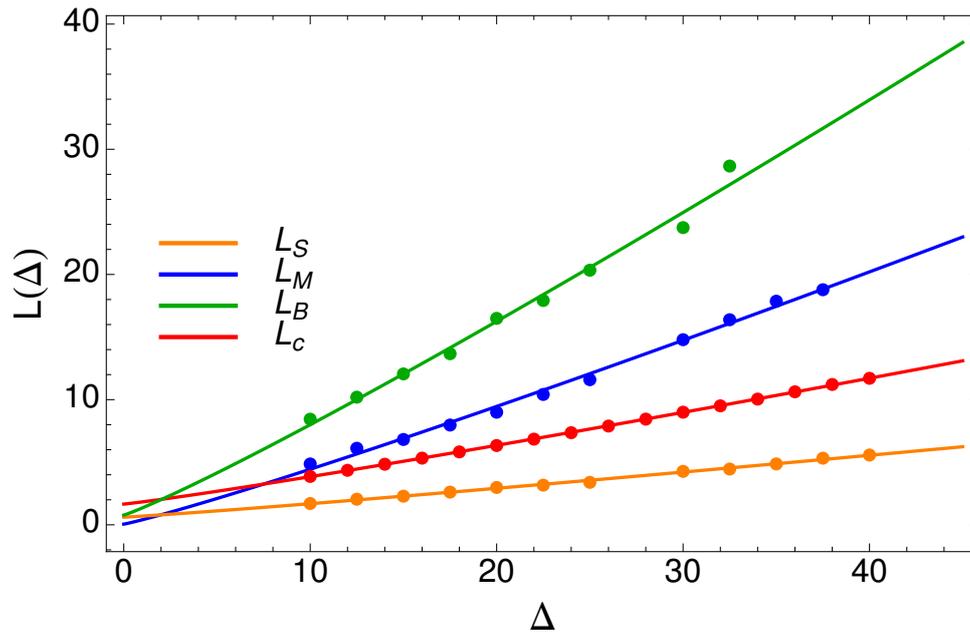


Abbildung 5.1: Fast linearer Verlauf der Längenskalen mit  $L_i \sim \Delta^{1,1}$ .  $L_S$  beschreibt das Screening nahe der Oberfläche,  $L_M$  ist die maximale Dicke einer Probe mit unterdrückter Puddlebildung in der Mitte und  $L_B$  beschreibt die Dicke, bei der im Mittel keine Puddlebildung im System stattfindet. Die Länge  $L_C$  ergibt sich aus der Skalenanalyse und zeigt das gleiche Verhalten in  $\Delta$  wie die numerischen Längenskalen.

Bemerkenswert ist, dass das Skalenargument eigentlich nur eine Vorhersage für die typische Länge  $L_M$  machen sollte, da auch bei der Herleitung der Skalenlänge das Potential in der Mitte betrachtet wird. Da jedoch alle anderen auftretenden Längenskalen das glei-

che Verhalten in  $\Delta$  zeigen, eignet sich  $L_C$  zur Beschreibung aller numerisch bestimmten typischen Längen. Das bedeutet auch, dass Oberflächen- und Bulkeffekte aufgrund des gleichen Skalenverhaltens von ähnlicher Wichtigkeit sind.

Nun sollen die numerischen Ergebnisse zu größeren Werten von  $\Delta$  extrapoliert werden. Da das Ergebnis des Skalenarguments die numerischen Ergebnisse gut beschreibt, wird  $L_C$  mit passendem Vorfaktor und Offset verwendet, um den Verlauf für große  $\Delta$  zu beschreiben. Das liefert dann Funktionen der Form

$$L_i = \tilde{a}_i L_C + \tilde{b}_i, \quad i = S, B, M \quad (5.1)$$

Das asymptotische Verhalten von  $L_C$  ist gegeben durch  $\Delta^2/\ln(\Delta)$  (siehe Gleichung 4.18), was eindeutig nicht einem Verhalten mit  $\Delta^{1,1}$  entspricht. Der Exponent nahe 1 beschreibt das System also nur bei kleinen Werten von  $\Delta$  und ist kein sinnvoller Exponent zur Extrapolation der Längenskalen. Die Längenskalen sehen in diesem Bereich also nur linear aus, das eigentliche Verhalten ist aber durch das Skalenargument gegeben.

Die Fitparameter der einzelnen Längenskalen sind  $\tilde{a}_S = 0,49$ ;  $\tilde{a}_B = 3,32$ ;  $\tilde{a}_M = 2,01$  und  $\tilde{b}_S = -0,21$ ;  $\tilde{b}_B = -4,81$ ;  $\tilde{b}_M = 3,28$ .

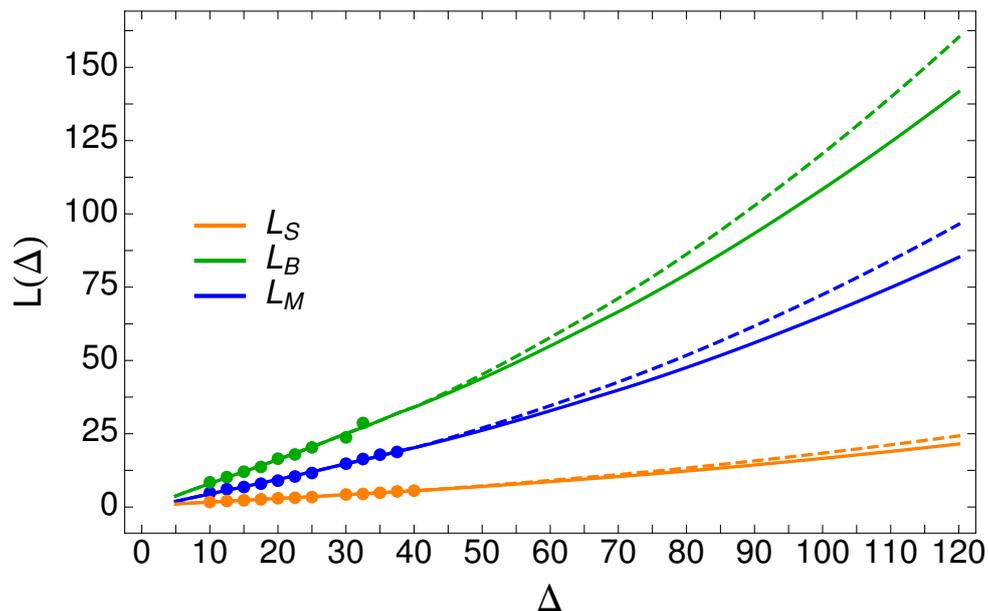


Abbildung 5.2: Extrapolation der numerischen Längenskalen durch einen Fit der Form  $\tilde{a}_i L_C + \tilde{b}_i$ . Das lineare Verhalten der numerischen Werte gilt nicht mehr bei großen Werten von  $\Delta$ . Die gestrichelten Linien wurden mit  $n_0 \sim \Delta^2$  berechnet und zeigen, wie stark das Ergebnis von der verwendeten Interpolation für  $n_0$  abhängt.

Mit diesen Ergebnissen ist es auch möglich, die typischen Längen zur Unterdrückung von Puddlebildung an der Oberfläche und im Bulk für experimentell relevante Größen von  $\Delta$  zu bestimmen. Bei  $\Delta = 100$  ergibt sich  $L_S = 16,6 \pm 1,8$ ;  $L_M = 65,2 \pm 7,3$ ;  $L_B =$

$108,5 \pm 12,1$ . Die Fehler wurden dabei aus der Abweichung der Ergebnisse für die beiden Interpolationen von  $n_0$  berechnet. Alle Längen sind in Einheiten von  $N^{-1/3}$  mit  $N = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  gemessen.

Nach Wiederherstellen der Einheiten ergibt sich dann, dass die Puddlebildung bis zu einem Abstand von  $(148 - 184) \text{ nm}$  zur Oberfläche unterdrückt ist. In der Mitte einer Probe ist die Puddlebildung unterdrückt, wenn die Dicke des topologischen Isolators  $(579 - 725) \text{ nm}$  nicht überschreitet. Hat die Probe eine Dicke von  $(0,96 - 1,21) \mu\text{m}$ , so ist die Puddlebildung im gesamten System im Mittel um einen Faktor 2 reduziert.

## 6 Fazit und Ausblick

In dieser Arbeit wurde das Verhalten von Längenskalen, welche die Puddlebildung und die Zerstörung von Puddles bestimmen, untersucht. Es stellt sich heraus, dass in einem vollständig kompensierten topologischen Isolator verschiedene Längenskalen eine wichtige Rolle spielen. Numerische Ergebnisse für diese Längen liefern ein Verhalten wie  $\Delta^{1,1}$  im Bereich kleiner Werte der Energielücke ( $10 \leq \Delta \leq 40$ ). Aus einem einfachen Skalenargument wurde der Verlauf der Längenskalen für größere Werte von  $\Delta$  bestimmt. Asymptotisch sind die typischen Längen durch  $\Delta^2/\ln(\Delta)$  gegeben. Ein Anstieg mit einem Exponent nahe 1 liefert also ein falsches Verhalten für große Werte von  $\Delta$ .

Aus der Extrapolation der Längenskalen konnten Vorhersagen für experimentelle Systeme mit  $\Delta \approx 100$  gemacht werden. Der Abstand zur Oberfläche, bei dem Puddlebildung unterdrückt ist, und die Dicke eines topologischen Isolators, bei welcher keine Puddlebildung in der Mitte der Probe auftritt, wurden bestimmt. Die Puddles haben bei tiefen Temperaturen einen großen Einfluss auf die Leitfähigkeit des Bulks. Die Qualität der TIs kann also stark verbessert werden, wenn die Proben dünner als die Bulklängenskala  $L_M$  bzw.  $L_B$  gebaut werden.

Die Ergebnisse sind nur eine Abschätzung der tatsächlichen Größen, da das Skalenargument das unkorrelierte Potential verwendet und dadurch die Eigenabschirmung im Grundzustand nicht berücksichtigt. Außerdem ist der Faktor  $\zeta$  aus Gleichung 4.14 nicht bekannt. Eine weitere Unsicherheit ist, dass der Bulkwert nicht eindeutig festgelegt ist. In dieser Arbeit wurde  $(n_0)_{bulk}$  immer durch das Dichteplateau der größten simulierten Systeme ( $L_{xy} = L_z = 50$ ) festgelegt. Um den echten Grenzwert zu bestimmen, könnte man größere Systeme mit periodischen Randbedingungen und ungescreenter Coulomb-Wechselwirkung simulieren. Auftragen der inversen Systemgröße gegen die mittlere Dichte würde dann den Bulkwert als y-Achsenabschnitt einer Interpolationsfunktion liefern.

Zusätzlich zur genauen Bestimmung des Bulkwerts wäre es hilfreich, eine selbstkonsistente Theorie des Oberflächenpotentials zu verwenden. Damit wäre das Potential an den Oberflächen nicht mehr genau Null, sondern durch die Ladungskonfiguration im Bulk und auf den Oberflächen bestimmt. Hierfür könnte man eine ähnliche Theorie wie Skinner und Shklovskii verwenden (siehe [13]), welche um eine zweite Oberfläche und das Screening im Bulk erweitert wird. Damit ließen sich noch realistischere Vorhersagen für die Längenskalen machen.



# Literaturverzeichnis

- [1] B.I. Shklovskii and A.L. Efros. *Electronic Properties of Doped Semiconductors*. Springer Science & Business Media, Berlin Heidelberg, 2013.
- [2] B. I. Shklovskii and A. L. Efros. Completely Compensated Crystalline Semiconductor as a Model of an Amorphous Semiconductor. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 35, 1972.
- [3] Y. Ando. Topological Insulator Materials. *Journal of the Physical Society of Japan*, 82, October 2013.
- [4] M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang. Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells. *Science*, 318, 2007.
- [5] M. Z. Hasan and J. E. Moore. Three-Dimensional Topological Insulators. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 2, March 2011.
- [6] Z. Ren, A. A. Taskin, S. Sasaki, K. Segawa, and Y. Ando. Optimizing  $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  solid solutions to approach the intrinsic topological insulator regime. *Phys. Rev. B*, 84, Oct 2011.
- [7] B. Zhou, Z. K. Liu, J. G. Analytis, K. Igarashi, S. K. Mo, D. H. Lu, R. G. Moore, I. R. Fisher, T. Sasagawa, Z. X. Shen, Z. Hussain, and Y. L. Chen. Controlling the carriers of topological insulators by bulk and surface doping. *Semiconductor Science and Technology*, 27, 2012.
- [8] J. Lux. *Fluctuations in and out of equilibrium: Thermalization, quantum measurements and Coulomb disorder*. PhD thesis, Universität zu Köln., 2016.
- [9] K. Eto, Z. Ren, A. A. Taskin, K. Segawa, and Y. Ando. Angular-dependent oscillations of the magnetoresistance in  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  due to the three-dimensional bulk Fermi surface. *Phys. Rev. B*, 81, 2010.
- [10] B. Skinner, T. Chen, and B. I. Shklovskii. Effects of bulk charged impurities on the bulk and surface transport in three-dimensional topological insulators. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 117, Sep 2013.
- [11] B. Skinner, T. Chen, and B. I. Shklovskii. Why Is the Bulk Resistivity of Topological Insulators So Small? *Phys. Rev. Lett.*, 109, Oct 2012.

- [12] N. Borgwardt, J. Lux, I. Vergara, Zhiwei Wang, A. A. Taskin, Kouji Segawa, P. H. M. van Loosdrecht, Yoichi Ando, A. Rosch, and M. Grüninger. Self-organized charge puddles in a three-dimensional topological material. *Phys. Rev. B*, 93, Jun 2016.
- [13] B. Skinner and B. I. Shklovskii. Theory of the random potential and conductivity at the surface of a topological insulator. *Phys. Rev. B*, 87, Feb 2013.

## Danksagung

An erster Stelle möchte ich Prof. Dr. Achim Rosch dafür danken, dass er mir dieses interessante Thema vorgeschlagen hat und mich während der gesamten Arbeit unterstützt hat.

Besonders möchte ich auch Qingyufei Terenz Feng danken, der mir bei vielen Fragen numerischer und sonstiger computertechnischer Natur geholfen hat. Außerdem führten Diskussionen mit ihm über die Ergebnisse und deren Interpretation immer wieder zu interessanten neuen Fragen.

Desweiteren gilt mein Dank Jonathan Lux, der mir das Grundgerüst des verwendeten Programms zur Verfügung gestellt hat und mir durch die Erklärung des Algorithmus den Einstieg in diese Arbeit erleichtert hat.

Die numerischen Simulationen wurden auf dem CHEOPS-Cluster des RRZK der Universität zu Köln durchgeführt. Auch hier möchte ich den Verantwortlichen dafür danken, dass ich diese Ressourcen nutzen durfte. Besonderer Dank gilt hier Andreas Sindermann, der mir immer für IT-Fragen zur Verfügung stand.



# Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe. Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten und nicht veröffentlichten Schriften entnommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit ist in gleicher oder ähnlicher Form oder auszugsweise im Rahmen einer anderen Prüfung noch nicht vorgelegt worden. Ich versichere, dass die eingereichte elektronische Fassung der eingereichten Druckfassung vollständig entspricht.

Köln, 18. Juli 2017

---

Thomas Bömerich

