

Übungen zu „Theorie ungeordneter Systeme“

Prof. Walter Schirmacher, WS 2009/10

Blatt 10

1) Hüpfprozess auf einem kubischen Gitter

Betrachten Sie Ladungsträger, die auf einem einfach-kubischen Gitter (Gitterkonstante a) von Gitterplätzen zu Nächsten-Nachbar-Plätzen hüpfen. Die Bewegungsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit n_ℓ am Platz ℓ ist

$$\frac{d}{dt}n_\ell(t) = -\nu \sum_{\substack{m \neq \ell \\ \text{n.N.}}} \left(n_\ell(t) - n_m(t) \right) \quad (1)$$

ν ist die Hüpfwahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit.

- a) Berechnen Sie die Laplacetransformierte der Greenschen Funktion $G_{\ell, \ell_0}(t)$ (Lösung für $n_\ell(0) = \delta_{\ell, \ell_0}$) im reziproken Raum, d.h.

$$G(\mathbf{k}, s) = \sum_{\ell} e^{i\mathbf{k}[\mathbf{r}_\ell - \mathbf{r}_{\ell_0}]} \int_0^\infty dt e^{-st} G_{\ell, \ell_0}(t)$$

- b) Zeigen Sie, dass im Limes großer Wellenlängen gilt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} G(k, s) = \frac{1}{s + Dk^2}$$

und stellen Sie einen Zusammenhang zwischen der Diffusionskonstanten D und den Größen ν und a her.

Hinweis Gehen Sie genau so vor wie bei dem in der Vorlesung behandelten „skalaren Schwingungsproblem“, das sich ergibt, wenn in (1) die erste durch die zweite Zeitableitung ersetzt wird.

2) Mottisches Variable-Range-Hopping

Betrachten Sie einen Hüpfprozess, bei dem Elektronen phononen-unterstützte Übergänge zwischen den an den Orten $\mathbf{r}_i$ der Verunreinigungen eines dotierten Halbleiters lokalisierten Zuständen $|i\rangle$ machen. Die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit lässt sich schematisch durch

$$\nu_{ij} = \nu_0 e^{-E_{ij}/k_B T} e^{-2r_{ij}/r_0}$$

darstellen, wobei $E_{ij} = |E_i - E_j|$ die Differenz der Energie-Eigenwerte der beiden Zustände und r_0 der effektive Bohrsche Radius der Störstelle ist. Nach Mott ergibt sich der Diffusionskoeffizient und damit die „Hopping-Leitfähigkeit“ aus der „typischen optimalen Hüpftrate“. Letztere ergibt sich aus folgender Darstellung der typischen Energiedifferenz

$$E_{ij}^{\text{typisch}} \approx \frac{A}{r_{ij}^d N(E_F)}$$

wobei d die Dimensionalität und $N(E_F)$ die Zustandsdichte am Fermi-niveau ist.

- a) Berechnen Sie die optimale Hüpftrate ν_{opt} aus $\frac{d}{dr_{ij}} \nu_{ij} = 0$
b) Welche Temperaturabhängigkeit ergibt sich für ν_{opt} ?
c) Berechnen Sie den optimalen Hüpfabstand.
d) Betrachten Sie nun Gaußsche Orbitale, für die gelte

$$\nu_{ij} = \nu_0 e^{-E_{ij}/k_B T} e^{-(r_{ij}/r_0)^2}$$

Berechnen Sie die optimale Hüpftrate ν_{opt} , deren Temperaturabhängigkeit und den optimalen Hüpfabstand.

Geben Sie ein Beispiel für das Auftreten von exponentiell abfallenden Störstellen-Wellenfunktionen an und eins für Gauß-artige Wellenfunktionen.