



Markus Grimm (Autor)
**Lokalisierungs- und Transportphänomene in
ungeordneten exzitonischen**

Markus Grimm

**Lokalisierungs- und
Transportphänomene in
ungeordneten exzitonischen Systemen**



Cuvillier Verlag Göttingen

<https://cuvillier.de/de/shop/publications/3589>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

Kapitel 1

Einleitung

Motiviert wurde die vorliegende Arbeit durch die Diskussion über die Rolle der Unordnung für die Transporteigenschaften nichtmetallischer amorpher Systeme. Diese stark gestörten Systeme haben in der jüngsten Vergangenheit ein starkes Interesse erfahren, nicht zuletzt wegen der zu erwartenden technologischen Relevanz dieser Materialien.

Die Transporteigenschaften bei sehr tiefen Temperaturen werden in dielektrischen Kristallen durch die langwelligen Phononen bestimmt. Die Wellenlänge akustischer Phononen ist bei Temperaturen um $1K$ von der Größenordnung tausend Angström, d.h. von einigen hundert Atomabständen. Die Phononen sollten daher von der strukturellen Unordnung amorpher Substanzen nicht wesentlich beeinflusst werden, so daß sich die thermodynamischen Eigenschaften nicht von denen der kristallinen Festkörper unterscheiden sollten.

Seit der grundlegenden Arbeit von Zeller und Pohl [8] Anfang der siebziger Jahre ist jedoch bekannt, daß gravierende Unterschiede zwischen kristallinen und nichtkristallinen, dielektrischen Festkörpern bestehen. Die von ihnen durchgeführten Messungen der spezifischen Wärme an amorphen nichtleitenden Gläsern zeigten universelle Anomalien. Die spezifische Wärme gehorcht für tiefe Temperaturen nicht dem Debye'schen T^3 -Gesetz, sondern läßt sich durch ein Gesetz der Form

$$C = \alpha T + \beta T^3 + \dots \quad (1.1)$$

beschreiben. Für die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit wurde ebenfalls ein universelles Verhalten gefunden. Im nichtleitenden Kristall nimmt die Wär-

meleitfähigkeit für tiefe Temperaturen mit T^3 zu, im amorphen System jedoch mit T^2 . Zudem wurde unabhängig von der betrachteten amorphen Substanz ein Plateau bei einer Temperatur von ungefähr $10K$ beobachtet, gefolgt von einem erneuten Anstieg der Leitfähigkeit (siehe Abbildung 1.1).

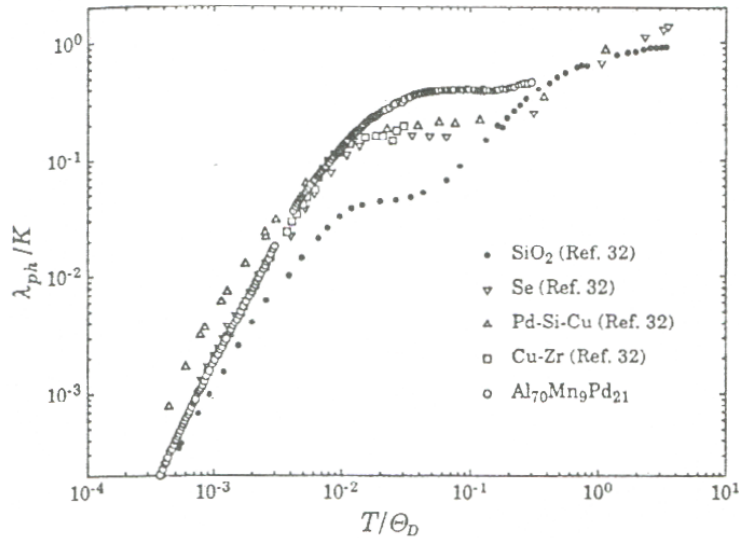


Abbildung 1.1: Wärmeleitfähigkeit verschiedener amorpher Substanzen [8]

Interessant ist, daß die 1984 von Shechtman et. al. [6] gefundenen Quasikristalle ein ganz ähnliches Verhalten der Wärmeleitfähigkeit zeigen [7] (vgl. Abbildung 1.2).

Auch bei diesen Materialien nimmt die Wärmeleitfähigkeit bei tiefen Temperaturen mit T^2 zu, geht dann bei etwas höheren Temperaturen wie in amorphen Substanzen in ein Plateau über, um danach wieder anzusteigen. Bei Kristallen hingegen, fällt die Wärmeleitfähigkeit oberhalb ca. $10K$ exponentiell ab. Dieses Verhalten wurde Anfang der zwanziger Jahre von Peierls [9], [10] im Rahmen einer Störungstheorie untersucht. Die Anharmonizität führt zur Wechselwirkung zwischen den Phononen, wobei die sogenannten „Umklapp-Prozesse“ einen Energieaustausch zwischen den Moden und damit eine Thermalisierung und endliche Wärmeleitfähigkeit verursachen sollten. Diese Umklapp-Prozesse werden oberhalb $10K$ thermisch aktiviert. Ob diese Umklapp-Prozesse wirklich die Wirkung von Streuprozessen haben, die zum thermischen Gleichgewicht führt, kann durch numerische Simulation untersucht werden.

Fermi, Pasta und Ulam [1] untersuchten Mitte der fünfziger Jahre im ersten Compu-

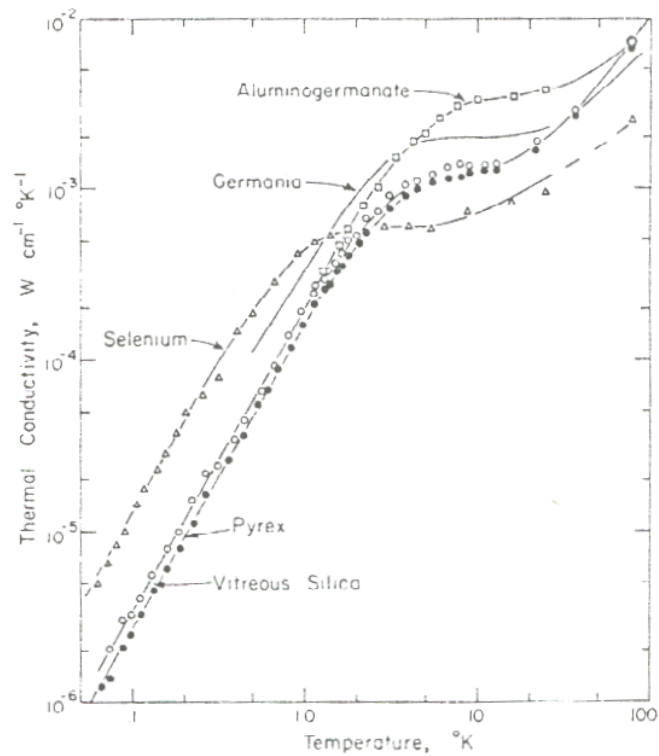


Abbildung 1.2: Wärmeleitfähigkeit verschiedener Quasikristalle [7]

terexperiment der Physik auf dem Großrechner MANIAC-I ein harmonisches, eindimensionales System mit schwacher Anharmonizität. Das Ziel dieser Untersuchungen war, eine der fundamentalen Annahmen der statistischen Mechanik zu testen: die Gleichverteilung der Energie zwischen den Moden in einem harmonischen System mit einer schwachen anharmonischen Störung. Zu ihrer Überraschung fanden sie bei der Anregung einer einzelnen Eigenmode in der Zeitevolution des Systems keine Gleichverteilung der Energie. Vielmehr befand sich nach einer bestimmten Zeitdauer nahezu die gesamte anfängliche Energie in der Ausgangsmode wieder. Diese Wiederkehr der Energieanregung ist als „FPU-recurrence“ bekannt. Auf der Suche nach einer Erklärung der „FPU-recurrence“ untersuchten Zabusky und Kruskal [11] im Jahre 1965 die Korteweg-de-Vries Gleichung, die im Kontinuumslimit die FPU-Kette mit kubischer Anharmonizität beschreibt. Es wurden solitäre Wellen mit teilchenartigem Charakter gefunden und damit eine qualitative Erklärung der „FPU-recurrence“ gegeben.

Auch bei akustischen Messungen an Gläsern [12] zeigen die nichtleitenden amorphen Materialien ein universelles Verhalten, das von dem der kristallinen Gegenstücke ab-

weicht. Neutronenstreuexperimente von Buchenau et.al. [13] bestätigen dieses Verhalten und zeigen, daß bei tiefen Temperaturen eine gegenüber den kristallinen Substanzen erhöhte Modendichte existiert. Man kann die niederfrequenten, harmonischen Moden mit librationsartigen Schwingungen gekoppelter SiO_4 -Tetraeder identifizieren. Die tiefen Frequenzen deuten auf eine weiche Kopplung dieser Tetraeder an den atomaren Hintergrund hin.

Zur Erklärung des Tieftemperaturverhaltens von Gläsern wurde schon früh von Anderson, Halperin und Varma [14] und parallel dazu von Phillips [15] ein phänomenologisches Tunnelmodell vorgeschlagen. Dabei wird davon ausgegangen, daß gewisse Molekülgruppen in amorphen Systemen mehrere Gleichgewichtslagen einnehmen können. Dem wird durch ein Doppelmuldenpotential Rechnung getragen. Die beiden Minima sind energetisch verschieden und durch eine Energiebarriere voneinander getrennt. Damit kann bei einer geeigneten Parameterwahl für die Modendichte der Tunnelanregungen und für die Ankopplung an die akustischen Phononen das T^2 Verhalten der Wärmeleitfähigkeit erklärt werden, nicht jedoch das Plateau und der erneute Anstieg der Leitfähigkeit oberhalb des Plateaus. Konzeptionelle Schwierigkeiten des Modell bestehen zum einen darin, daß für $\omega \rightarrow 0$ eine endliche Dichte der Tunnelaufspaltungen existieren muß und andererseits darin, daß die mikroskopische Natur der Tunnelzentren bis heute noch nicht geklärt ist.

Dieses Modell wurde von Karpov et.al. [16] phänomenologisch verfeinert, indem die Tunnelzentren durch ein „weiches“ anharmonisches Potential mit temperaturabhängigen Parametern konkretisiert wurden. Durch Anpassen dieser Parameter [17] („Soft-Potential-Modell“) können die Experimente gut beschrieben werden.

Ein alternativer Erklärungsversuch ist das fraktale Konzept von Orbach [18] und Alexander [19]. Im Temperaturbereich der Plateaus wird dabei davon ausgegangen, daß die Gitterschwingungen lokalisiert und von fraktaler Natur sind. Sie werden „Fraktonen“ genannt. Oberhalb des Plateaus wird dann mit zunehmender Temperatur eine steigende Anharmonizität indiziert, wodurch die Fraktonen miteinander wechselwirken. Die Leitfähigkeit steigt wieder an. Es ist jedoch fraglich, inwieweit amorphen Substanzen eine fraktale Struktur zugesprochen werden kann. Einzig Aergele sind amorphe Materialien, bei denen diese Eigenschaft direkt beobachtet wird [20].