ETH
Eidgenössische Technische Hochschule Zürich
Swiss Federal Institute of Technology Zurich

Physik hinter modernen Technologien
Serie 1

FS 2011
Prof. M. Sigrist

Aufgabe 1.1 Diffusion und Drift im random hopping Modell

Zur Beschreibung von Halbleiter *pn*-Kontakten, wie sie in vielen Solarzellen vorkommen, wird oft ein einfaches Drift-Diffusions-Modell verwendet. In dieser Übung sollen die Prozesse Diffusion und Drift anhand eines stochastischen 1D-random-hopping Modells studiert werden.
Betrachte dazu die zufällige Bewegung von Teilchen auf einem 1D-Gitter. Bei jedem Schritt können die Teilchen einen Platz vor oder zurück hüpfen, wobei für beide Prozesse eine gewisse Wahrscheinlichkeit gelte.

a) Schreibe ein Programm, welches die Position x eines Teilchens als Funktion der Anzahl Schritte n bestimmt, unter der Annahme, dass die Hüpfwahrscheinlichkeit p in beide Richtungen gleich gross ist ($p[r_n = \pm 1] \equiv \Gamma = 0.5$, $r_n = x_{n+1} - x_n$). Wie sieht die Verteilungsfunktion $P(x)$ der Teilchenposition aus und was ist der im Mittel zurückgelegte Weg?

b) Nach m Schritten hat das Teilchen beim Zeitschritt n die Distanz $r_n(m) = x_n - x_{n-m}$ zurückgelegt. Bestimme die Verteilungsfunktion $P_m(y) \equiv P[r(m) = y]$. Wie verhält sich $P_m(y)$ für verschiedene m? Wie gross ist der mittlere Abstand zur mittleren Position nach m Schritten? Welches ist die statistische Bedeutung dieser Grösse?

c) Welche charakteristische Grösse in der in b) hergeleiteten Verteilungsfuktion hat die Bedeutung einer "Diffusionskonstanten"? Zeige numerisch, dass die Verteilungsfunktion der mittleren Abweichung vom Mittelwert der Position mit dieser Grösse skaliert. In welchem Zusammenhang steht diese Grösse mit dem zeitlichen Verlauf eines Diffusionsprozesses?

d) Stelle die diskrete Ratengleichung für die örtliche und zeitliche Entwicklung der Teilchendichte $n_i^{(m)}$ im diskreten 1D-Modell auf (Gitterkonstante a, Zeitschritt τ), wobei die Hüpfwahrscheinlichkeit in beide Richtungen gleich Γ sei. Leite daraus die kontinuierliche Diffusionsgleichung und via Kontinuitätsgleichung das Fick'sche Gesetz für die Diffusionsstromdichte J_D her. Untersuche die Lösung der Diffusionsgleichung für den Fall eines stufenförmigen Dichteprofils $n(x) = \theta(x)$ als Anfangswert bei $t = 0$, analytisch sowie numerisch unter Verwendung der diskreten Ratengleichung.

e) Aufgaben a)-c) haben gezeigt, dass sich unter den Bedingungen der Diffusion Teilchen im Mittel nicht bewegen. Zeige, dass im stochastischen Modell für das Auftreten einer "Drift-Bewegung" gelten muss, dass $p[r_n = +1] \neq p[r_n = -1]$. Es sei nun $p[r_n = \pm 1] = \frac{1 \pm w}{2}$, mit $w \in (0, 1)$. Bestimme wiederum die mittlere Position $r(m)$ sowie die mittlere Abweichung $\delta r(m)$ davon nach m Schritten.

f) Modifiziere die diskrete Ratengleichung aus d) unter Verwendung der unterschiedlichen Hüpfwahrscheinlichkeiten aus e) und leite die entsprechende kontinuierliche Gleichung für die Teilchendichte her.