

Numerische Untersuchung ungeordneter Elektronensysteme

Diplomarbeit im Fach Physik

an der Universität Bayreuth
am 25. April 2003
eingereicht von

Gerald Schubert

1. Gutachter : Prof. Dr. H. Fehske
2. Gutachter : Prof. Dr. W. Pesch

Inhaltsverzeichnis

Exposé	1
1 Ausgewählte Ansätze zur Beschreibung des Lokalisierungsproblems	3
2 Numerische Methoden	11
2.1 Exakte Diagonalisierung	12
2.1.1 Abfall der Wellenfunktion - Lokalisierungslänge	13
2.1.2 Inverse Partizipationszahl	17
2.1.3 Optische Leitfähigkeit	18
2.2 Leitwertberechnung mittels Greenscher Funktionen	21
2.3 Momentenverfahren	27
2.3.1 Polynomkern-Methode	27
2.3.2 Lokale Zustandsdichte	30
2.3.3 Berechnung der Momente	32
2.3.4 Verteilungsfunktion und Verteilungsdichte	33
2.3.5 Charakteristische Größen der Verteilung	37
2.3.6 Maximum-Entropie-Methode	40
3 Anderson-Modell	43
3.1 Lokalisierungslänge	44
3.2 Inverse Partizipationszahl	45
3.3 Leitfähigkeit	47
3.4 Leitwert	50
3.5 Lokale Zustandsdichte	52
3.5.1 Verteilungsdichte	53
3.5.2 Typische Zustandsdichte	54
3.6 Zusammenfassung der Ergebnisse für das dreidimensionale Anderson-Modell	58
3.7 Vergleich mit dem ein- und zweidimensionalen Anderson-Modell	61
4 Perkulationsmodell	65
4.1 Fragmentierung des Spektrums	67
4.2 Diskussion der speziellen Energien	68
4.2.1 Zustände im Bandzentrum	68
4.2.2 Betrachtung von Teilclustern	71
4.3 Quantenperkulationsschwelle	73
5 Korrelierte Unordnung	75

Zusammenfassung	79
A Herleitung der Formel für die optische Leitfähigkeit	81
B Motivation der Polynomkern-Approximation	87
C Reduktion der Bandbreite der Andersonmatrix	91
Literaturverzeichnis	93

Exposé

Seit nunmehr über vierzig Jahren ist die Frage, wie der Charakter einer elektronischen Wellenfunktion in einem ungeordneten Medium von der Stärke der Unordnung abhängt, nicht vollständig geklärt. Trotz großer Fortschritte in der Entwicklung neuer analytischer und numerischer Methoden sowie der Verfügbarkeit immer leistungsfähigerer Computer bleiben noch viele Fragen rund um den unordnungsinduzierten Metall-Isolator-Übergang offen. Das Ziel dieser Arbeit besteht darin, etablierte Lokalisierungskriterien für die Wellenfunktion mit den Ergebnissen eines neuartigen, auf der Betrachtung der lokalen Zustandsdichte basierenden Kriteriums zu vergleichen. Der Schwerpunkt der Betrachtung liegt hierbei auf dem Anderson-Modell. Darüberhinaus werden auch das Perkulationsmodell und der Effekt korrelierter Unordnung untersucht.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: Nach kurzer Einführung in das Thema und Klärung der grundlegenden Begriffe bietet Kapitel 1 einen Überblick über ausgewählte Ansätze zur Beschreibung des Lokalisierungsproblems. In Kapitel 2 werden verschiedene Methoden zur Berechnung der gängigen Lokalisierungskriterien – Lokalisierungslänge, dc-Leitfähigkeit und inverse Partizipationszahl – beschrieben. Ebenso wird ein Momentenverfahren – die Polynomkern-Methode – vorgestellt, mittels derer die Verteilung der lokalen Zustandsdichte effektiv berechnet werden kann. Der typische Wert dieser Verteilung kann als Lokalisierungskriterium herangezogen werden, da er für lokalisierte Zustände verschwindet und für delokalisierte Zustände einen endlichen Wert besitzt. Kapitel 3 faßt die erhaltenen Ergebnisse für das Anderson-Modell zusammen und vergleicht die Vor- und Nachteile der Kriterien und Methoden miteinander. Als abschließender Test für die typische Zustandsdichte als Lokalisierungskriterium werden in Kapitel 4 und 5 noch das Perkulationsmodell sowie das Anderson-Modell mit korrelierter Unordnung untersucht.

1 Ausgewählte Ansätze zur Beschreibung des Lokalisierungsproblems

Ein Großteil des Erfolges der theoretischen Festkörperphysik beruht auf Ausnutzung der Translationsinvarianz in geordneten Kristallen, die eine Klassifizierung der elektronischen Zustände als Blochwellen ermöglicht. Auf diese Weise ist man in der Lage, die Bandstruktur relativ komplizierter Materialien zu berechnen. Durch das Auftreten von Störstellen oder anderer Gitterfehler ist diese Symmetrie für reale Kristalle jedoch gebrochen. Für den Fall, daß die Störstellenkonzentration niedrig ist, bildet die Theorie der Blochwellen weiterhin eine gute Näherung, und der Effekt der durch die Fehler im Gitter bedingten Unordnung kann störungstheoretisch behandelt werden. So werden die über den gesamten Kristall ausgedehnten Blochwellen an den Störstellen gestreut, was bei hinreichend hoher Konzentration zu vollständiger Lokalisierung führen kann. Dadurch wird der ursprünglich elektrisch leitfähige Kristall zu einem Isolator. In einem solchen, von relativ hoher Unordnung bestimmten Fall stellt die von einem kleinen Parameter abhängige Störungstheorie keine gültige Beschreibung mehr dar. In diesem Fall verwendet man zur Beschreibung effektive Feldmethoden wie die CPA¹, die durch Einführung gemittelter Größen qualitativ sehr gute Ergebnisse liefern. Um den Effekt der vorhandenen Unordnung als fundamentale Eigenschaft einer Probe systematisch zu untersuchen, bieten sich verschiedene von realen Systemen abstrahierende Modelle, wie z. B. das Anderson-Modell an. Das Auffinden einer einheitlichen Beschreibung, im Rahmen derer sowohl der schwach ungeordnete Fall verunreinigter Metalle wie auch der Fall starker Unordnung in Legierungen oder amorphen Substanzen beschrieben werden kann, ist ein Ziel der Lokalisierungstheorie.

Es ist seit langer Zeit bekannt, daß Störstellen in Halbleitern zu gebundene Zustände außerhalb des Leitungs- und Valenzbandes führen können [40]. In der als Grundstein der Lokalisierungstheorie geltenden Veröffentlichung von Anderson [3] im Jahr 1958 wurde zum ersten Mal die vollständige Lokalisierung von Zuständen innerhalb eines Bandes aufgrund starker Unordnung diskutiert. Dies spiegelt sich in der Einhüllenden der Wellenfunktion wider, die von einem gewissen Gitterplatz \mathbf{r}_{\max} aus wie

$$|\psi(\mathbf{r})| \sim \exp \left\{ -\frac{\|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\max}\|}{\lambda} \right\} \quad (1.1)$$

abfällt, wobei λ als Lokalisierungslänge bezeichnet wird. Die Existenz solcher lokalisierter Wellenfunktionen läßt sich im Fall starker Unordnung qualitativ leicht verstehen. Als einfachste Näherung kann man eine derartige Wellenfunktion als einen an der Stelle einer

¹coherent potential approximation

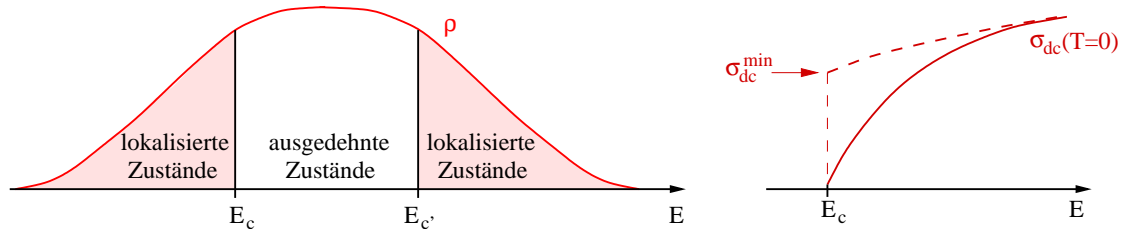


Abbildung 1.1: Links: Schematische Darstellung der Zustandsdichte ρ und der Mobilitätskanten E_c bzw. $E_{c'}$, die lokalisierte von ausgedehnten Zuständen trennen. Rechts: Möglichkeiten des Verhaltens der Gleichstromleitfähigkeit σ_{dc} im Grenzfall $T = 0$ bei Annäherung der Fermienergie an E_c .

besonders tiefen Potentialfluktuation gebundenen Zustand beschreiben. Zu diesem sind noch verschiedene Beiträge anderer gebundener Zustände als Störung beigemischt. Da nur diejenigen Zustände signifikant mischen, die in etwa die gleiche Energie haben, genügt es, die Betrachtung auf andere Potentialfluktuationen ähnlicher Tiefe zu beschränken. Aufgrund der zufälligen Verteilung der lokalen Potentiale sind diese im Mittel weit entfernt, wodurch sich lediglich ein exponentiell kleiner Überlapp ergibt. Daher reichen die Beimischungen nicht aus, um den Zustand zu delokalisieren. So ist im Fall des eindimensionalen Anderson-Modells beliebig schwache Unordnung ausreichend, um alle Zustände zu lokalisieren [6, 40], und lediglich im Fall $d \geq 3$ gilt die Existenz ausgedehnter Zustände für einen Bereich endlicher Unordnungsstärke als gesichert. Die von Mott [39] geprägte Vorstellung über das Verhalten in $3d$ postuliert die Existenz der sogenannten Mobilitätskanten E_c und $E_{c'}$, die lokalisierte von ausgedehnten Zuständen trennen (vgl. Abb. 1.1). Für delokalisierte (metallische) Zustände kann man nach Ioffe und Regel (vgl. z. B. in [46]) eine Abschätzung für die mittlere freie Weglänge der Elektronen ℓ treffen. Falls diese kleiner wird als der Gitterkonstante a oder die Fermiwellenlänge λ_F , so liegt ein lokalisierter Zustand vor. Für Elektronen im Zentrum des Bandes liegt die Fermiwellenlänge in der Größenordnung von a , während nahe der Bandkanten $\lambda_F \gg a$ ist. Dadurch kann es für einen festen Wert der Unordnung vorkommen, daß nahe der Bandkante lokalisierte Zustände vorliegen, während sie im Bandzentrum ausgedehnt sind. Die Lage der Mobilitätskanten hängt von der Stärke der Unordnung W ab. Mit wachsender Unordnung nimmt durch die Abnahme von ℓ der Bereich, in dem ausgedehnte Zustände möglich sind, immer weiter ab, bis schließlich bei der kritischen Unordnung W_c nur noch lokalisierte Zustände vorliegen. In realen Systemen kann der Metall-Isolator-Übergang zwischen ausgedehnten und lokalisierten Zuständen aufgrund von drei Mechanismen erfolgen. Dies sind der durch die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen bedingte Mott-Hubbard-Übergang, der unordnungsinduzierte Anderson-Übergang, sowie der mögliche Metall-Isolator-Übergang der bei Elektron-Phonon-Wechselwirkung infolge der Peierls-Verzerrung auftritt. Da diese Effekte von verschiedenen Parametern abhängig sind, ist eine separate Betrachtung möglich. So ist der Anderson-Übergang, der im Rahmen dieser Arbeit untersucht werden soll, der im verdünnten Limes entscheidende Mechanismus, da die Coulombwechselwirkung zwischen den Elektronen aufgrund der geringen Dichte

vernachlässigt werden kann. Innerhalb des betrachteten Modells geschieht dies durch Beschränkung auf ein Einelektronensystem.

Zur Unterscheidung zwischen lokalisierten und ausgedehnten Zuständen haben sich verschiedene Lokalisierungskriterien bewährt [17]. Zur Charakterisierung lokalisierter Zustände kann man neben dem von Anderson ursprünglich verwendeten Kriterium eines verschwindenden Imaginärteils von $\hat{\Sigma}$ in (1.4) auch folgende Größen heranziehen:

- im thermodynamischen Limes endliche inverse Partizipationszahl
- endliche Lokalisierungslänge
- verschwindende typische Zustandsdichte
- Unabhängigkeit der Eigenwerte von den verwendeten Randbedingungen
- verschwindende Gleichstromleitfähigkeit

Von besonderem Interesse ist infolge der experimentellen Zugänglichkeit die Gleichstromleitfähigkeit σ_{dc} . Liegt die Fermienergie des Systems innerhalb eines Bereiches, wo nur lokalisierte Zustände existieren, verschwindet σ_{dc} , während innerhalb der Mobilitätskanten ein endlicher Wert auftritt. Dies wirft die Frage auf, ob der Übergang bei E_c kontinuierlich ist, oder ob ein sprunghafter Abfall von einer minimalen metallischen Leitfähigkeit σ_{dc}^{\min} auf null auftritt. Die bis heute erhaltenen experimentellen Ergebnisse weisen darauf hin, daß der Übergang tatsächlich kontinuierlich ist. Dieses Verhalten ist eine notwendige Voraussetzung für die Gültigkeit der Ein-Parameter-Skalentheorie [1], der ein endlicher Wert von σ_{dc}^{\min} widersprechen würde.

In der ursprünglichen Formulierung versuchte Anderson [3] ein Modell zu entwickeln, das möglichst einfach war, aber trotzdem alle relevanten Effekte des Unordnungsphänomens beschreiben konnte. Hierzu führte er ausgehend von einem normalen Tight-binding-Modell das sogenannte Anderson-Modell

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N w_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j + t \sum_{\langle jk \rangle} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_k \quad (1.2)$$

ein, in dem die Platzenergien w_j zufallsverteilt innerhalb eines gewissen Energieintervalls $[-\frac{W}{2}, +\frac{W}{2}]$ liegen, wobei das Verhältnis von W zu den Hüpfmatrixelementen t die Stärke der Unordnung festlegt. Hierbei bezeichnet N die Anzahl der Gitterplätze, \hat{c}_j^\dagger und \hat{c}_j sind Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren eines Elektrons am Gitterplatz j . Die Summation $\langle jk \rangle$ beschränkt sich auf *alle* nächste Nachbarn j und k (vgl. (2.4) und Abb. 2.2). Basierend auf diesem grundlegenden Modell wurden verschiedene daraus abgeleitete Varianten diskutiert, die sich durch unterschiedliche Verteilungen der Platzenergien oder Anisotropie der Hüpfmatrixelemente auszeichnen. Der Schwerpunkt der Betrachtung in den ersten Jahren nach der Formulierung des Lokalisierungsproblems lag in dessen analytischen Untersuchung mittels der Technik der Greenschen Funktionen. Der bis dahin kanonische Weg zur Beschreibung schwacher Unordnung ging von ebenen Wellen aus und behandelte den Effekt der Unordnung in den Diagonalelementen

als Störung. Im Gegensatz dazu ging Anderson von lokalisierten Wellenfunktionen aus und betrachtete die Hüpfmatrixelemente als Störung. In einer Tight-binding-Basis ergibt sich für die Diagonalelemente $\hat{\mathcal{G}}_{jj}$ der Greenschen Funktion $\hat{\mathcal{G}} = \{(E + is)\hat{1} - \hat{H}\}^{-1}$ die Darstellung

$$\hat{\mathcal{G}}_{jj}(E + is) = \frac{1}{E + is - w_j - \hat{\Sigma}_j(E + is)} \quad , \quad (1.3)$$

wobei die Selbstenergie $\hat{\Sigma}$ durch die Störungsreihe

$$\hat{\Sigma}_j(E + is) = \sum_{k \neq j} \frac{t^2}{E + is - w_k} + \sum_{k, l \neq j} \frac{t^3}{(E + is - w_k)(E + is - w_l)} + \dots \quad (1.4)$$

gegeben ist. Der fundamentale Punkt in Andersons Argumentation liegt darin, keine Mittelung auszuführen, sondern die volle Verteilungsdichte p von $X = \mathcal{I}m \left\{ \frac{\hat{\Sigma}}{s} \right\}$ zu diskutieren. Unter Berücksichtigung nur des ersten Terms in (1.4) ergibt sich

$$\lim_{s \rightarrow 0} p(X) = X^{-\frac{3}{2}} e^{-s/X} \quad . \quad (1.5)$$

Während im delokalisierten Fall alle Amplituden $\psi_n(\mathbf{r}_j)$ von der Größenordnung $N^{-\frac{1}{2}}$ sind, wodurch die Summenregeln

$$\sum_{j=1}^N |\psi_n(\mathbf{r}_j)|^2 = \sum_{n=1}^N |\psi_n(\mathbf{r}_j)|^2 = 1 \quad (1.6)$$

erfüllt werden, nehmen die $\psi_n(\mathbf{r}_j)$ im lokalisierten Fall eine diskrete Reihe von Werten an, wobei der größte Betrag von der Ordnung 1 ist, und die anderen relativ schnell abfallen (vgl. Abb. 1.2). Sowohl im lokalisierten wie im delokalisierten Fall führt ein endlicher Imaginärteil zur Verbreiterung der δ -Peaks, die für $s \rightarrow 0$ verschwindet. Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ wird $\mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}_{jj}\}$ im delokalisierten Fall eine kontinuierliche Funktion von E , wohingegen im lokalisierten Fall weiterhin diskrete Peaks vorliegen. Betrachtet man die höheren Entwicklungsterme, so zeigt sich, daß diese das qualitative Verhalten zunächst nicht ändern, sondern lediglich zu einer Renormierung der Hüpfsterme und Platzenergien führen. Ausgehend vom Grenzfall lokalisierter Wellenfunktionen findet der Übergang zum ausgedehnten Bereich statt, wenn die Störungstheorie zusammenbricht. Diese Tatsache ist die Konsequenz der durch die Renormierung bedingten Ausdehnung der ursprünglich kurzreichweitigen Wechselwirkung, was zu einer Zunahme der Lokalisierungslänge und schließlich an der Mobilitätskante zur vollständigen Delokalisierung führt. Andersons Argumentation, die auf hyperkubischen Gittern lediglich approximativ gilt, wurde 1973 von Abou-Chacra et al. [49] auf das sogenannte Bethe-Gitter (vgl. Abb. 1.3) angewendet, wo sie sich als exakt gültig erwies. Aus diesem Grund konzentriert sich die analytische Betrachtung des Lokalisierungsproblems bis heute oft, wenn auch nicht ausschließlich, auf das Bethe-Gitter, worunter auch der Fall der linearen Kette als Bethe-Gitter mit je zwei nächsten Nachbarn pro Platz fällt. Die Besonderheit dieses Gitters besteht in der Schleifenfreiheit, d. h. zwei beliebige Plätze des Gitters sind durch genau einen Weg miteinander verbunden. Entfernt man einen Platz aus dem Gitter, so zerfällt es in unabhängige Teile.

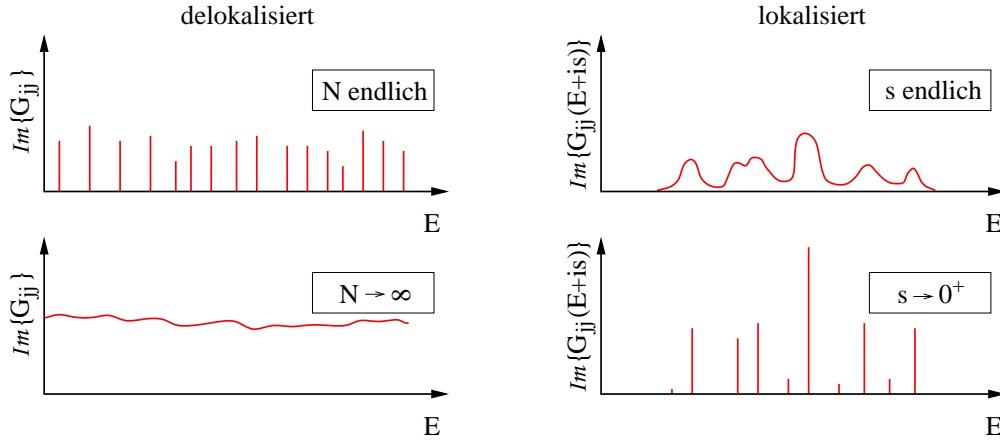


Abbildung 1.2: Schematische Darstellung des Imaginärteils der Diagonalelemente der Green'schen Funktion $\mathcal{I}m\{\mathcal{G}_{jj}\}$ für den Fall lokalisierter und ausgedehnter Zustände. Im lokalisierten Fall bleibt das Spektrum auch im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ diskret. Den kleinen Imaginärteil s kann man als Maß für die Breite der δ -Peaks interpretieren.

Will man hyperkubische Gitter höherer Dimensionen betrachten, so ist man meist auf Verwendung numerischer Verfahren angewiesen, da die analytischen Methoden, die im eindimensionalen Fall möglich sind, im allgemeinen nicht auf höhere Dimensionen verallgemeinerbar sind. Die ersten Versuche einer numerischen Beschreibung Mitte der 70er Jahre basierten auf einer Untersuchung der Abhängigkeit der Eigenwerte von den verwendeten Randbedingungen und des Skalenverhaltens des damit verbundenen dimensionslosen Leitwerts einer Probe in Abhängigkeit von der Systemgröße. Die von Thouless [61] vorgeschlagene Idee basiert darauf, eine Probe der Dimension $(2L)^d$ aus 2^d Blöcken der Größe L^d zusammenzusetzen und deren Eigenschaften zu vergleichen. Es scheint plausibel, daß die Eigenzustände des großen Systems Linearkombinationen der kleinen Blöcke sind, wobei Beimischungen in Abhängigkeit des Überlapps zwischen den Teilsystemen und den Energieunterschieden zwischen deren Eigenwerten auftreten. Während letztere typischerweise dem Niveauabstand der kleinen Blöcke $\Delta\epsilon = (\rho L^d)^{-1}$ entsprechen, wobei mit ρ die Zustandsdichte bezeichnet wird, wählt man als Maß für den Überlapp die Energiedifferenz ΔE , die sich beim Übergang von periodischen zu antiperiodischen Randbedingungen ergibt. Liegt keine Abhängigkeit der Eigenwerte von den gewählten Randbedingungen vor, so ist die sogenannte Thouless-Zahl $\frac{\Delta E}{\Delta\epsilon}$ exponentiell klein und die Eigenzustände des großen Systems sind hauptsächlich in einem Untersystem lokalisiert, wohingegen sich für ausgedehnte Zustände ein endlicher Wert von $\frac{\Delta E}{\Delta\epsilon}$ ergibt. Dementsprechend bietet dieser Quotient ein Maß für die Lokalisierungseigenschaften der Wellenfunktion. Die große Bedeutung dieser Resultate liegt darin, daß ein direkter Zusammenhang zwischen der Thouless Zahl und dem dimensionslosen Leitwert

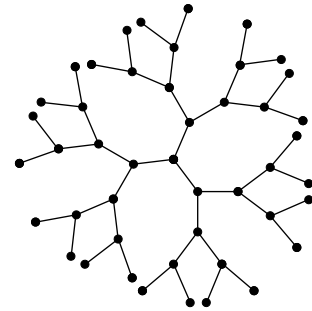


Abbildung 1.3: Ausschnitt aus einem Bethe-Gitter, auf dem die Lokalisierungstheorie exakt ist.

$g = \frac{\hbar}{e^2} G$ der Probe besteht. Dieser ist in Experimenten direkt zugänglich ist, und erweist sich als der einzige Parameter, der die Eigenschaften des Systems doppelter Größe ($L \rightarrow 2L$) beschreibt. Die Weiterführung dieser Idee erfolgte durch Wegner [66] im Rahmen des Formalismus der kritischen Phänomene. Er zeigte, daß die Gültigkeit einer nur von einem Parameter abhängigen Skalentheorie voraussetzt, daß sich die Gleichstromleitfähigkeit in der Nähe der Mobilitätskante verhält wie $\sigma_{dc}(T=0) = (E - E_c)^\mu$, wobei μ den kritischen Exponenten bezeichnet. Die Ein-Parameter-Skalentheorie versucht den dimensionslosen Leitwert $g(La)$ in verschiedenen Dimensionen d als Funktion der linearen Ausdehnung des Systems La zu beschreiben. Je nach Unordnungsstärke erwartet man zwei asymptotische Fälle für den Leitwert. Für Systeme, deren lineare Ausdehnung La größer ist als die mittlere freie Weglänge der Elektronen ℓ , gilt im metallischen Regime das Ohmsche Gesetz

$$g(La) = \sigma(La)^{d-2} \quad , \quad (1.7)$$

wobei die Leitfähigkeit σ eine intensive Größe ist, die nicht von L abhängt. Sind dagegen alle Zustände an der Fermi-Energie lokalisiert, so kann Transport nur aufgrund von Hüpfprozessen eines Elektrons aus einem besetzten in einen unbesetzten Zustand ähnlicher Energie erfolgen. Da diese jedoch weit voneinander entfernt liegen, ist die Übergangswahrscheinlichkeit exponentiell klein. Hier erwartet man

$$g(La) \sim \exp \left\{ \frac{La}{\lambda} \right\} \quad , \quad (1.8)$$

wobei die Lokalisierungslänge λ die für das System charakteristische Längenskala ist.

Abrahams et al. [1] stellten 1979 die Behauptung auf, daß die logarithmische Ableitung $\beta(g) = \frac{\partial \ln(g)}{\partial \ln(L)}$ eine Funktion ist, die ausschließlich von g abhängt, d. h. nicht von der Energie, Unordnung oder Systemgröße alleine, was zur Bezeichnung Ein-Parameter-Skalentheorie führte. Unter der Annahme der Stetigkeit und Monotonie von $\beta(g)$ sowie Berücksichtigung des asymptotischen Verhaltens (1.7) und (1.8) stellt sich der Verlauf wie in Abbildung 1.4 dar. Daraus wird die Lokalisierung aller Zustände in $1d$ und $2d$ klar, während im dreidimensionalen Fall sowohl ein Regime existiert, wo der Leitwert mit zunehmender Systemgröße abnimmt (lokalisierter Fall; $\beta < 0$), wie auch ein Bereich, wo der Leitwert mit zunehmende Systemgröße steigt (delokalisierte Fall; $\beta > 0$). Der Schnittpunkt von $\beta(g)$ mit der g -Achse markiert den kritischen Leitwert an der Mobilitätskante. Für den zwdimensionalen Fall ergeben sich zwei Möglichkeiten für den Verlauf von $\beta(g)$. Bei Existenz einer minimalen metallischen Leitfähigkeit σ_{dc}^{\min} liegt ein fester Wert von g vor, für den $\beta(g) = 0$ wird, wohingegen sich $\beta(g)$ im anderen Fall asymptotisch an null annähert. Eine Weiterführung der Ein-Parameter-Skalentheorie erfolgte durch Kombination mit störungstheoretischen Ansätzen [46].

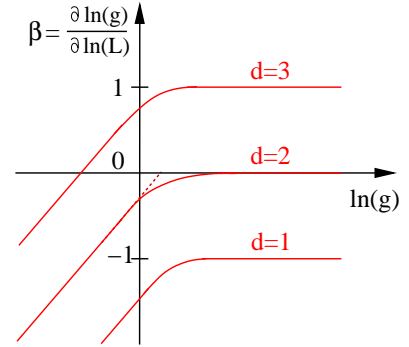


Abbildung 1.4: Schematischer Verlauf der Skalenfunktion $\beta(g)$ für verschiedene Raumdimensionen d . Für $\sigma_{dc}^{\min} \neq 0$ ergibt sich in $2d$ der Verlauf ($\dots\dots$).

Andere Ansätze zur Beschreibung des Lokalisierungsproblems waren die Berechnung der inversen Partizipationszahl [65] mittels exakter Diagonalisierung sowie die Betrachtung der aus dem Abfallverhalten der Wellenfunktion [35, 68] erhaltenen Lokalisierungslänge. Weiterhin wurde auch die Kubo-Formel zur Berechnung der Leitfähigkeit [62] auf ungeordnete Systeme angewendet. Allen diesen Methoden war mit Blick auf die damals verfügbaren Computerressourcen gemeinsam, daß sie auf relativ kleine Systeme und Ensembles beschränkt waren. Der Übergang zu wesentlich größeren Systemen wurde erst durch Entwicklung der Transfermatrixmethode zur Berechnung der quantenmechanischen Transmissionswahrscheinlichkeit quasi eindimensionaler Systeme und einem damit verbundenen Finite-size-scaling [37, 47] möglich. Diese ursprünglich für eindimensionale Systeme entwickelte Technik beruht auf einer iterativen Lösung der Schrödinger-Gleichung. Daraus lassen sich die Amplituden \mathbf{a}_{j+1} der Schicht $j+1$ eines quasi-eindimensionalen Systems berechnen, falls die Amplituden \mathbf{a}_j und \mathbf{a}_{j-1} , sowie die Wechselwirkung $\hat{\mathbf{V}}$ zwischen und \hat{H}_j innerhalb der Schichten bekannt ist:

$$\mathbf{a}_{j+1} = \hat{\mathbf{V}}^{-1}(E\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_j)\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_{j-1} \quad . \quad (1.9)$$

Hierbei sind für ein quasi-eindimensionales System der Länge L und Querschnitt L_{\perp}^{d-1} die Amplituden \mathbf{a}_j Vektoren der Länge L_{\perp}^{d-1} und die Matrizen \hat{H}_j , $\hat{\mathbf{V}}$ haben die Dimension $L_{\perp}^{d-1} \times L_{\perp}^{d-1}$. In der Notation der Transfermatrixmethode

$$\hat{\mathbf{T}}_j := \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{V}}^{-1}(E\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_j) & -\hat{\mathbf{1}} \\ \hat{\mathbf{1}} & 0 \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

läßt sich die Entwicklung der Amplituden in Abhängigkeit des Abstandes vom Startzustand durch ein Matrixprodukt von Transfermatrizen beschreiben:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{L+1} \\ \mathbf{a}_L \end{pmatrix} = \prod_{l=1}^L \hat{\mathbf{T}}_l \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_0 \end{pmatrix} =: \hat{\mathbf{Q}}_L \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_0 \end{pmatrix} \quad . \quad (1.11)$$

Für die Produktmatrix $\hat{\mathbf{Q}}_L$ existiert nach dem Theorem von Oseledec [45] eine Grenzmatrix

$$\hat{\mathbf{\Gamma}} = \lim_{L \rightarrow \infty} (\hat{\mathbf{Q}}_L \hat{\mathbf{Q}}_L^{\dagger})^{\frac{1}{2L}} \quad , \quad (1.12)$$

aus deren Eigenwerten e^{γ_k} man die charakteristischen Lyapunov-Exponenten γ_k der Matrix $\hat{\mathbf{Q}}_L$ erhält. Da der kleinste von diesen den geringstmöglichen Anstieg der Amplitude für $L \rightarrow \infty$ beschreibt, kann dessen Kehrwert $\lambda_{L_{\perp}}$ als größtmögliche Lokalisierungslänge für das quasi-eindimensionale System mit Querschnitt L_{\perp}^{d-1} aufgefaßt werden. Berechnet man nun für verschiedene Werte von L_{\perp} die Lokalisierungslänge und normiert diese auf den Querschnitt des Systems

$$\Lambda := \frac{\lambda_{L_{\perp}}}{L_{\perp}} \quad , \quad (1.13)$$

so zeigt sich bei der Auftragung von $\ln(\Lambda)$ gegen $\ln(L_{\perp})$ ein fundamentaler Unterschied zwischen zwei- und dreidimensionalen Systemen (vgl. Abb. 1.5). Während im zweidi-

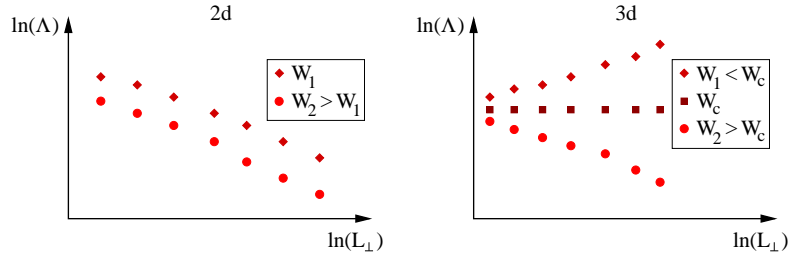


Abbildung 1.5: Schematische Darstellung der renormierten Abfallänge Λ als Funktion des Querschnitts L_{\perp} bzw. $L_{\perp} \times L_{\perp}$ quasi-eindimensionale Systeme für verschiedene Unordnungen W .

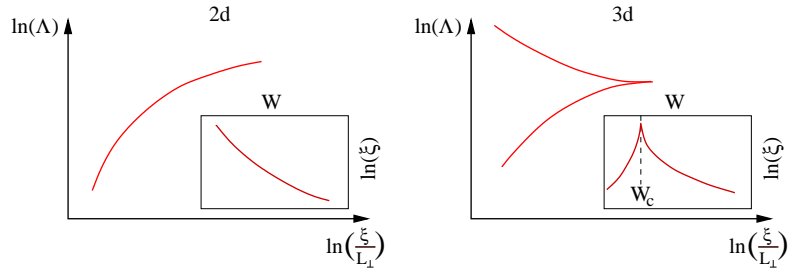


Abbildung 1.6: Schematische Darstellung der Kurve auf die alle Datenpunkte aus Abbildung 1.5 abgebildet werden, wenn sie als Funktion von $\frac{\xi}{L_{\perp}}$ mit dem Skalenparameter ξ dargestellt werden. Die inneren Abbildungen zeigen die Abhängigkeit des Skalenparameters ξ von der Unordnungsstärke W . Aus der Position der Spitze läßt sich im dreidimensionalen Fall der Wert der kritischen Unordnung W_c bestimmen.

mensionalen Fall unabhängig von der Unordnung stets eine Abnahme der renormierten Lokalisierungslänge mit zunehmendem Querschnitt vorliegt, ändert sich dies im dreidimensionalen Fall unterhalb einer gewissen Unordnung W_c . Die dort einsetzende Zunahme der Lokalisierungslänge mit wachsender Systemgröße betrachtet man als Indiz für die Delokalisierung der Zustände. Durch Einführung einer nur von der Unordnung W abhängigen Skalenvariablen $\xi(W)$ ist es möglich, alle Datenpunkte bei Auftragung von Λ gegen ξ/L_{\perp} auf eine universelle Kurve abzubilden (vgl. Abb. 1.6). Trägt man den Wert der Skalenvariablen gegen die Unordnung auf, so kann man anhand der Position des Knicks die kritische Unordnung W_c bestimmen (vgl. innere Abbildung in Abb. 1.6). Als eine weitere Verfeinerung des Finite-size-scaling-Verfahrens wurde in neuster Zeit die Abspaltung irrelevanter Skalenvariablen, die beispielsweise den Effekt der Ränder beschreiben, diskutiert [55, 56]. Eliminiert man diese irrelevanten Anteile, so läßt sich der Wert der kritischen Unordnung durch Betrachtung der korrigierten Größen mit bisher nicht gekannter Genauigkeit bestimmen. Der einzige Schwachpunkt der Transformationsmethode liegt in der Verwendung quasi eindimensionaler Systeme zur Beschreibung höherdimensionaler Kristalle. In diesem Zusammenhang entsteht die Frage, ob die aus einem System mit endlichem (und aus numerischen Gründen meist kleinem) Querschnitt erhaltenen Resultate charakteristisch für ein voluminöses System sind, oder ob der Einfluß des Querschnitts im Limes langer Kettenlängen verloren geht [38].

2 Numerische Methoden

Aufgrund der Schwierigkeit der analytischen Beschreibung des Lokalisierungsproblems hat im Laufe der Zeit die numerische Untersuchung ungeordneter Systeme an Bedeutung gewonnen. Dies wurde zum einen durch konzeptionelle Verbesserungen der verwendeten Methoden und zum anderen durch immer leistungsfähigere Computersysteme ermöglicht. Die verwendeten Methoden lassen sich in drei Gruppen unterteilen.

- Die erste Methode beruht auf vollständiger exakter Diagonalisierung des dem System zugrundeliegenden Hamilton-Operators und verwendet direkt die aus dieser Methode erhaltenen Eigenwerte und Eigenvektoren. In diese Kategorie gehören die Ermittlung des Abfallverhaltens der Amplituden der Wellenfunktion und der *Lokalisierungslänge* anhand direkter Betrachtung der Wellenfunktion sowie die Berechnung der Anzahl der Gitterplätze, die zu einem Zustand „wesentlich“ beitragen mittels der *inversen Partizipationszahl*. Weiterhin kann man aus den exakten Eigenzustände die Matrixelemente des Stromoperators berechnen, die direkt zur *optischen Leitfähigkeit* führen. Allerdings sind alle diese Methoden aufgrund des enormen Speicherbedarfs für die Eigenvektoren der Hamiltonmatrix auf relativ kleine Systeme beschränkt. So lassen sich, auf modernen PCs mit entsprechendem Hauptspeicher und Rechenzeiten von einigen Stunden, Systeme mit bis zu 20^3 Gitterplätzen vollständig diagonalisieren. Selbst auf Großrechnern ist es infolge der schlechten Parallelisierbarkeit der Diagonalisierungsroutinen nicht sinnvoll, wesentlich größere Systeme zu behandeln.
- Die zweite Vorgehensweise besteht in einer Verallgemeinerung der für eindimensionale Systeme entwickelten Methoden. Durch ein Zusammenfügen des realen Systems aus quasi-eindimensionalen Teilsystemen kann man iterative Vorgehensweisen wie die *Transfermatrixmethode* (vgl. Kapitel 1) auch auf höhere Dimensionen verallgemeinern. Neben der dort beschriebenen Bestimmung der Lokalisierungslänge aus den Lyapunov-Exponenten können damit auch Leitwert und Leitfähigkeit im Rahmen des Landauer-Büttiker-Formalismus [12] bestimmt werden. In diese Kategorie gehören auch Verfahren, die auf der Kubo-Formel und Technik der Greenschen Funktionen aufbauen.
- Die dritte Methode, die auch eine Anwendung auf wechselwirkende Systeme erlaubt, ist die Berechnung der lokalen Zustandsdichte des Systems mit Hilfe von hocheffizienten Momentenverfahren. Wenngleich die mittlere lokale Zustandsdichte keine Aussagen über das Lokalisierungsverhalten des Systems trifft, kann aus dem Verschwinden ihres *geometrischen Mittelwerts* auf Lokalisierung geschlossen

werden. Der Grund hierfür liegt in der Änderung der Form der *Verteilung* der lokalen Zustandsdichte. Im Gegensatz zur Normalverteilung im delokalisierten Bereich verschieben sich die Werte bei zunehmender Lokalisierung zu kleineren Werten, wodurch die Verteilung die Form einer logarithmischen Normalverteilung annimmt. Damit ist es auf PCs möglich, Systeme der Größe 50^3 bis 100^3 zu betrachten, wobei eine gute Parallelisierbarkeit auf Höchstleistungsrechnern noch größere Systeme zugänglich macht. Allerdings zeigt sich, daß für eine aussagekräftige Auflösung sehr viele Momente nötig sind.

2.1 Exakte Diagonalisierung

Der direkteste Zugang zu den Lokalisierungseigenschaften der Wellenfunktionen besteht in der exakten Diagonalisierung des Hamiltonoperators, dargestellt in einer Basis des Ortsraums. Hierzu ist es nötig, die $L^d = N$ Gitterpunkte des realen Gitters in geeigneter Weise als einen Vektor dieser Länge darzustellen. Am einfachsten ist dies mittels Sortierung in lexikographischer Ordnung zu erreichen. So erfolgt die Bezeichnung der Gitterplätze, wie in Abbildung 2.1 für den dreidimensionalen Fall dargestellt, beispielsweise nicht mehr durch das Zahlentripel $(1, 1, 1), \dots, (1, 1, L), \dots, (L, L, L)$, sondern mittels des Index $1, \dots, L, \dots, L^3$. Die so definierte Zuordnung zwischen der realen Position im Kristall $\mathbf{r} \in \{1, \dots, L\}^d$ und den Indizes $j \in 1, \dots, L^d$ ist bijektiv. Sie läßt sich in allgemeiner Form darstellen als

$$j = x_1 + \sum_{i=0}^{d-2} (x_{d-i} - 1)L^{d-1-i} \quad , \quad (2.1)$$

bzw. ihre Umkehrabbildung durch die Rekursionsformel

$$x_{d-k} = \left[\frac{j - \sum_{i=1}^k x_{d-i+1} L^{d-i}}{L^{d-k-1}} \right] \quad \text{für } k = 0, \dots, d-1 \quad . \quad (2.2)$$

Hierbei bezeichnet die Gauss-Klammer $[\cdot]$ den ganzzahligen Anteil der umschlossenen Zahl, z. B. $[\pi] = 3$.

Die nächste Aufgabe besteht darin, eine Matrixdarstellung des Hamiltonoperators

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N w_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j + \sum_{\langle jk \rangle} t_{jk} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_j \quad (2.3)$$

in der so gewählten Basis zu finden. Hierbei sind \hat{c}_j^\dagger und \hat{c}_j Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren eines Elektrons an dem Gitterplatz $\mathbf{r} = \mathbf{r}(j)$, der dem Index j entspricht.

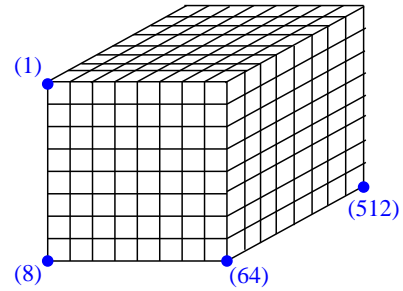


Abbildung 2.1: Umnummerierung der Gitterplätze am Beispiel eines $3d$ -Gitters der Dimension 8^3

Die Summation $\langle jk \rangle$ beschränkt sich darauf, daß $\mathbf{r}(j)$ und $\mathbf{r}(k)$ nächste Nachbarn sind. Mit den Bezeichnungen aus Abbildung 2.2 läßt sich diese z. B. für den dreidimensionalen Fall explizit darstellen:

$$\sum_{\langle jk \rangle} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_j = \sum_{k=1}^N \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k+1(x)} + \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k-1(x)} + \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k+1(y)} + \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k-1(y)} + \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k+1(z)} + \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k-1(z)} \quad . \quad (2.4)$$

Unabhängig von der speziellen Wahl der Parameter w_j und t_{jk} für die in späteren Kapiteln betrachteten Hamiltonoperatoren \hat{H} , haben diese gemeinsam, daß sie ein Tight-binding-Modell beschreiben bei dem nur das Hüpfen zu nächsten Nachbarn zuzüglich eines Platzenergie-Terms berücksichtigt wird. In der Darstellung des Gitters mittels kartesischer Koordinaten heißt dieses, daß für den Gitterplatz \mathbf{r} nur $2d+1$ Terme potentiell von null verschieden sein können (vgl. Abb. 2.2). Ob diese Terme tatsächlich ungleich null sind, hängt vom betrachteten Modell ab. Berechnet man entsprechend der Formel (2.1) die Indizes j , die den nicht verschwindenden Elementen eines bestimmten Gitterplatzes entsprechen, spielen die jeweils verwendeten Randbedingungen eine wichtige Rolle. Während für periodische Randbedingungen alle Plätze $2d$ nächste Nachbarn besitzen, fehlen den Randplätzen bei Verwendung offener Randbedingungen einige Einträge.

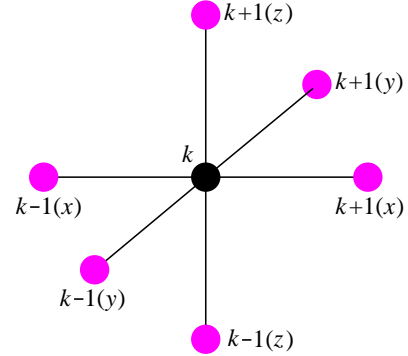


Abbildung 2.2: Nicht verschwindende Terme im 3d-Tight-binding-Modell.

Um zur Matrixdarstellung von \hat{H} zu gelangen, baut man diese Spalte für Spalte aus den entsprechenden Einträgen des „Sterns“ von Abbildung 2.2, zentriert auf die Stelle $j = 1, \dots, L^3$, auf. Das heißt in der Spalte j steht in Zeile j die Platzenergie w_j und in den Zeilen k , die den Indizes der nächsten Nachbarn gemäß Formel (2.1) entsprechen, stehen die t_{kj} . Für periodische Randbedingungen besitzt daher jede Spalte (und wegen der Hermitizität von \hat{H} auch Zeile) genau $2d+1$ mögliche Einträge, während für offene Randbedingungen die Spalten, die den Plätzen am Rand entsprechen, weniger Einträge haben. Ein typisches Bild einer solchen Matrix für ein System von 5^3 Gitterplätzen mit periodischen Randbedingungen ist in Abbildung 2.3 gezeigt.

2.1.1 Abfall der Wellenfunktion - Lokalisierungslänge

Ausgehend von der Existenz der Mobilitätskanten kann man für das Verhalten der Wellenfunktion zwei verschiedene Fälle ableiten. Innerhalb des Bereichs zwischen den Mobilitätskanten, wo die Zustände ausgedehnt sind, sollte der Betrag der Wellenfunktion – von statistischen Fluktuationen abgesehen – unabhängig von der Position im Kristall sein. Demzufolge sollte sich bei einer Auftragung des auf die Maximalamplitude

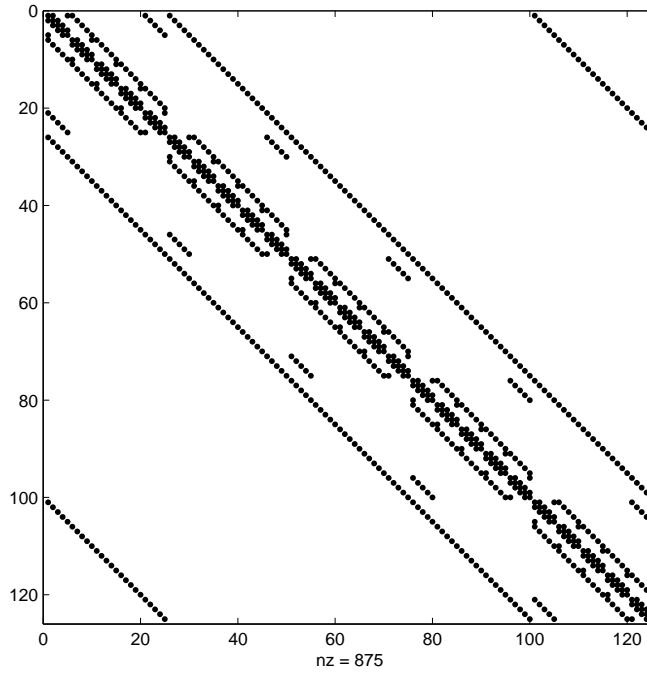


Abbildung 2.3: Matrixdarstellung des Hamiltonoperators eines 5^3 -Systems mit nächster Nachbarwechselwirkung und periodischen Randbedingungen

normierten Betrags der Amplituden an den jeweiligen Gitterplätzen

$$\phi_j := \frac{|\psi_j|}{|\psi_{\max}|} \quad (2.5)$$

gegen den Abstand $r = \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\max}\|$ dieses Platzes vom Maximum kaum eine Abhängigkeit von r zeigen. Im Bereich großer Unordnung hingegen, wo man eine exponentielle Lokalisierung der Wellenfunktion gemäß

$$|\psi(r)| \sim f(\mathbf{r}_j) \exp\left\{-\frac{r}{\lambda}\right\} \quad (2.6)$$

erwartet, wobei λ die Lokalisierungslänge bezeichnet und die Funktion $f(\mathbf{r}_i)$ die statistischen Fluktuationen beschreibt, ergibt sich ein anderes Bild. Hier liegt die globale Tendenz einer exponentiellen Abnahme von ϕ_j mit zunehmendem r vor. Die statistische Natur der Unordnung spiegelt sich in der Wellenfunktion wider, und so sind die Amplituden für Gitterplätze im gleichen Abstand vom Maximum in verschiedenen Richtungen, sowie für verschiedene Realisierungen der Unordnung, unterschiedlich groß. Bei einer logarithmischen Auftragung von ϕ_j gegen r erhält man eine ganze Datenwolke von Punkten, durch die man eine Ausgleichsgerade mit der Steigung $-\frac{1}{\lambda}$ legen kann. Für eine geeignete statistische Mittelung bieten sich zwei Verfahren an: Zum einen kann man eine Regression durch die gesamte Datenwolke vornehmen oder andererseits erst für alle Datenpunkte, die den gleichen Abstand vom Maximum haben, einen Mittelwert bilden

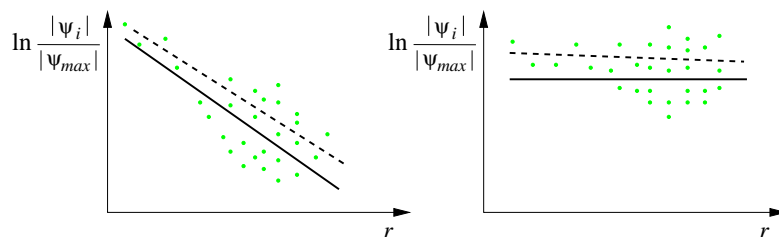


Abbildung 2.4: Schematisches Verhalten des Betrags der Amplituden der Wellenfunktion im lokalisierten Bereich (links) und im delokalisierten Bereich (rechts) als Funktion des Abstandes vom Gitterplatz mit maximaler Amplitude. Man beachte die logarithmische Auftragung der Ordinate. (—) Regressionsgerade über alle Datenpunkte, (----) Regressionsgerade nach Mittelung über Schalen konstanten Abstands.

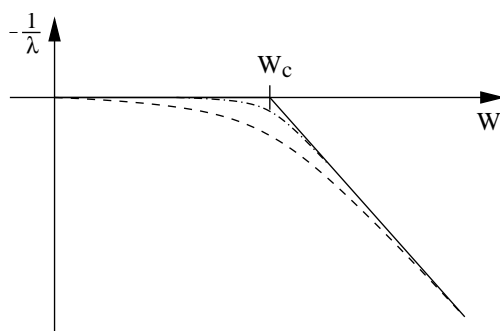
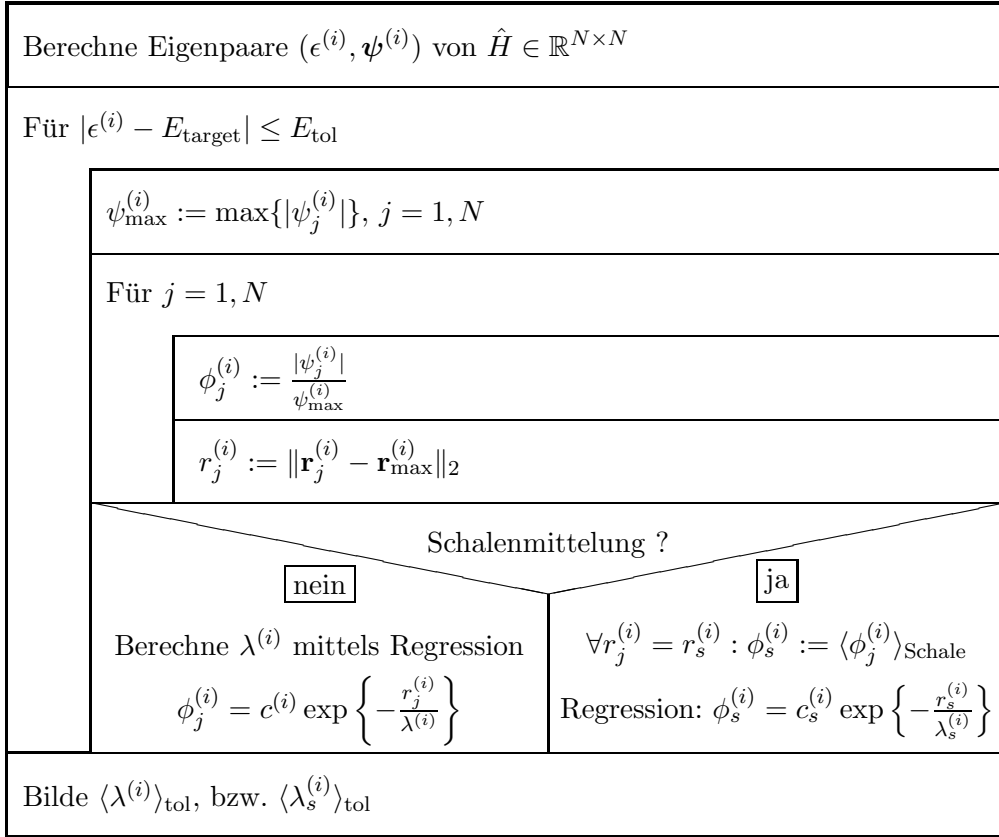


Abbildung 2.5: Inverse Lokalisierungslänge als Funktion der Unordnung für verschiedene Systemgrößen. (----) erwarteter Verlauf für endliches System aufgrund von Finite-size-Effekten (-.-.-) erwarteter Verlauf für größeres System, (—) idealisiert für ein unendlich ausgedehntes System.

und die Regression über die Mittelwerte der einzelnen „Schalen“ ausführen [35]. Es zeigt sich, daß die so ermittelten Steigungen, respektive Lokalisierungslängen für die beiden Methoden innerhalb der Fehler gleich sind, und daß sich lediglich eine konstante Verschiebung der Ausgleichsgeraden ergibt. Das qualitative Verhalten der Wellenfunktion für den Fall starker und schwacher Unordnung ist in Abbildung 2.4 zusammengefaßt. Die Tatsache, daß die Regressionsgerade für die Schalenmittelung nicht so gut mit dem erwarteten Verhalten – waagrecht im delokalisierten Bereich, starker Abfall im lokalisierten Bereich – übereinstimmt wie die Regressionsgerade für die gesamte Datenwolke, läßt sich dadurch erklären, daß sich derartige Erwartungen auf das asymptotische Verhalten für große r beziehen. Wenn man durch die Schalenmittelung jeden Abstand nur einmal berücksichtigt, geht das höhere Gewicht der weiter entfernten Gitterplätze, die wesentlich mehr Punkte in ihrer Schale haben, verloren. Daher wichtet man die nahe benachbarten Gitterplätze, bei denen das asymptotische Verhalten noch nicht deutlich wird oder Fluktuationen zu großen Abweichungen führen können, zu stark.

Das unterschiedliche Verhalten für ausgedehnte und lokalisierte Zustände ermöglicht eine Bestimmung der kritische Unordnung W_c . Dazu trägt man die Steigung der Regressionsgeraden für verschiedene Unordnungen W und festgehaltene Energie $E = 0$ gegen



Algorithmus 2.1.1: Berechnung der Lokalisierungslänge mittels Auswertung des Abfallverhaltens der Wellenfunktion.

die Stärke der Unordnung auf. Beginnend bei kleiner Unordnung, bei der die Zustände ausgedehnt sind, und deren Lokalisierungslänge dementsprechend gegen ∞ geht, erwartet man eine Steigung von null. Andererseits erwartet man für den lokalisierten Bereich endliche Lokalisierungslängen, die umso kürzer sein sollten, je stärker die Unordnung ist. Bei Betrachtung eines endlichen Systems kann man mit dieser Methode nicht erwarten, einen scharfen Übergang zwischen ausgedehnten und lokalisierten Zuständen zu finden. Lediglich im thermodynamischen Limes kann man von einem Knick der Kurve ausgehen, der solange das System endlich ist, immer verschmiert sein wird (vgl. Abbildung 2.5). Algorithmus 2.1.1 faßt die Schritte zusammen, die nötig sind, zu einem Ergebnis ähnlich Abbildung 2.5 zu gelangen. Da der Wert der Lokalisierungslänge (zumindest für große W) relativ stark von der jeweiligen Realisierung der Unordnung abhängt, ist es sinnvoll, zusätzlich zu der Mittelung über einen kleinen Energiebereich E_{tol} wie in Algorithmus 2.1.1 auch noch eine Mittelung über ein Ensemble verschiedener Realisierungen durchzuführen.

2.1.2 Inverse Partizipationszahl

Eine weitere Möglichkeit zur Charakterisierung des Verhaltens der Wellenfunktion besteht darin, ein Maß dafür zu finden, an wievielen Plätze die Amplitude der Wellenfunktion „wesentlich“ von null verschieden ist. Zur Vereinfachung der Notation seien im weiteren alle Wellenfunktionen auf

$$\sum_{j=1}^N |\psi_j|^2 = 1 \quad (2.7)$$

normiert. Dies ist für die aus den Diagonalisierungsroutinen von *LAPACK*¹ erhaltenen Eigenfunktionen automatisch der Fall. Während die von der Form von ψ unabhängige Norm daher keine Unterscheidung zwischen ausgedehnten und lokalisierten Zuständen zuläßt, ermöglichen die höheren, geradzahigen Potenzen der Wellenfunktion

$$P_q^{-1} := \sum_{j=1}^N |\psi_j|^{2q} \quad (2.8)$$

die beiden Regimes voneinander zu trennen. In der Literatur liegt der Schwerpunkt der Betrachtung meist auf der sogenannten inversen Partizipationszahl

$$P^{-1} := P_2^{-1} \equiv \sum_{j=1}^N |\psi_j|^4 \quad , \quad (2.9)$$

die das Inverse der Anzahl der Plätze mit „wesentlich“ von null verschiedener Amplitude beschreibt. Die Bezeichnung ist hier nicht einheitlich, denn manche Autoren sprechen in diesem Zusammenhang von der „inverse participation number“ [31], während auch der irreführende Begriff des „inverse participation ratio“ [65] geläufig ist. Zu unterscheiden sind diese beiden synonym verwendeten Begriffe für P^{-1} jedoch vom ebenfalls gebräuchlichen „participation ratio“

$$\tilde{p} = \frac{1}{N \sum_{j=1}^N |\psi_j|^4} \quad , \quad (2.10)$$

welches in der Tat das Verhältnis der beitragenden Plätze zur Gesamtzahl aller beschreibt.²

Die Tatsache, daß die inverse Partizipationszahl ein Maß für die beteiligten Gitterplätze darstellt, sieht man am besten anhand zweier extremer Beispiele. Ist ein Zustand vollständig ausgedehnt mit konstanter Amplitude, so beträgt deren Betrag an jedem Gitterplatz aufgrund der Normierung $\sqrt{1/N}$, was zu $P^{-1} \sim 1/N$ führt. Im thermodynamischen Limes sollte P^{-1} für ausgedehnte Zustände also verschwinden. Ein anderes Bild ergibt sich, wenn die Wellenfunktion auf M Plätze mit Amplitudenbetrag $\sqrt{1/M}$

¹Linear Algebra *PACK*age, erhältlich via <http://www.netlib.org>

²Zu beachten ist, daß P^{-1} und \tilde{p} nicht zueinander reziprok sind, sondern sich um einen zusätzlichen Faktor N unterscheiden.

lokalisiert ist, und die Amplituden an allen anderen Plätzen verschwinden. In diesem Fall folgt $P^{-1} \sim 1/M$. Obwohl der numerische Faktor, der in P^{-1} auftritt von der jeweiligen Wahl der Verteilung der Amplituden abhängt, bleibt die Tendenz dieser einfachen Betrachtung für den Grenzfall großer Systeme gültig.

2.1.3 Optische Leitfähigkeit

Will man zur Charakterisierung des Lokalisierungsverhaltens der Wellenfunktion eine Größe heranziehen, die auch experimentell unmittelbar zugänglich ist, so bieten sich Transportgrößen wie beispielsweise die Gleichstromleitfähigkeit im Grenzfall $T \rightarrow 0$ an. Für eine Probe mit lokalisierten Eigenzuständen erwartet man für Systeme, die größer sind als die Lokalisierungslänge, das Verhalten eines Isolators, während für ausgedehnte Zustände der nun mögliche Transport zu einer endlichen dc³-Leitfähigkeit σ_{dc} führt. Zur Berechnung von σ_{dc} erweist es sich als günstig, zunächst im Rahmen einer linearen Antworttheorie die frequenzabhängige optische Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ zu berechnen, und danach σ_{dc} aus dem Grenzübergang $\omega \rightarrow 0$ zu bestimmen. Eine detaillierte Herleitung der Kubo-Formel zur Berechnung der optischen Leitfähigkeit findet sich in Anhang A. Für deren Realteil ergibt sich

$$\begin{aligned} \text{Re}\{\sigma(\omega)\} = \frac{\pi t_0 e^2}{\hbar^2 N a} & \left[\left(-\langle \psi_0 | \hat{H}_0^x | \psi_0 \rangle - 2t_0 \sum_{n>0} \frac{|\langle \psi_0 | \hat{J} | \psi_n \rangle|^2}{\hbar \omega_n} \right) \delta(\omega) + \right. \\ & \left. + t_0 \sum_{n>0} \frac{|\langle \psi_0 | \hat{J} | \psi_n \rangle|^2}{\hbar \omega_n} (\delta(\omega + \omega_n) + \delta(\omega - \omega_n)) \right] , \end{aligned} \quad (2.11)$$

wobei a die Gitterkonstante und t_0 das isotrope Hüpfmatrixelement zu den nächsten Nachbarn bezeichnet. Die dimensionslosen Operatoren \hat{J} und \hat{H}_0^x sind durch

$$\hat{J} = -i \sum_{m=1}^N \left(\hat{c}_m^\dagger \hat{c}_{m+1(x)} - \hat{c}_{m+1(x)}^\dagger \hat{c}_m \right) , \quad (2.12)$$

$$\hat{H}_0^x = \sum_{m=1}^N \left(\hat{c}_m^\dagger \hat{c}_{m+1(x)} + \hat{c}_{m+1(x)}^\dagger \hat{c}_m \right) \quad (2.13)$$

gegeben. Der als Drude-Gewicht bezeichnete Koeffizient von $\delta(\omega)$ in (2.11) entspricht der eigentlichen Gleichstromleitfähigkeit des Systems. Um diesen Wert numerisch zugänglich zu machen, nutzt man die f-Summenregel

$$\int_{-\infty}^{\infty} \text{Re}\{\sigma(\omega)\} d\omega = -\frac{\pi t_0 e^2}{\hbar^2 N a} \langle \psi_0 | \hat{H}_0^x | \psi_0 \rangle . \quad (2.14)$$

Nach Berechnung der optischen Leitfähigkeit für endliche Frequenzen ist zur Bestimmung der dc-Leitfähigkeit noch der Erwartungswert der kinetischen Energie in x -Richtung

³direct current (= Gleichstrom)

Wähle Realisierung der Unordnung	
Exakte Diagonalisierung von $\hat{H} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ liefert $\{\epsilon_j, \psi_j\rangle\}_{j=1, \dots, N}$	
Für alle $ \psi_l\rangle$ mit $\epsilon_l < E_F$	
Für alle $ \psi_k\rangle$ mit $\epsilon_k > E_F$	
	Bilde Matrixelemente $\langle \psi_k \hat{j} \psi_l \rangle$ und Übergangsenergien $\epsilon_k - \epsilon_l$
	$[\hat{H}_0^x]_{ll} := \langle \psi_l \hat{H}_0^x \psi_l \rangle$
	Einsortieren von $\frac{1}{N} \cdot \frac{ \langle \psi_k \hat{j} \psi_l \rangle ^2}{\epsilon_k - \epsilon_l}$ in Histogramm liefert $\sigma(\omega)$
	Drude-Anteil $D := \frac{1}{N} \left(-\frac{1}{2} \sum_l [\hat{H}_0^x]_{ll} - \sum_{k,l} \frac{ \langle \psi_k \hat{j} \psi_l \rangle ^2}{\epsilon_k - \epsilon_l} \right)$
Bilde für jedes Intervall den Mittelwert über die Unordnungsrealisierungen	

Algorithmus 2.1.2: Berechnung der optischen Leitfähigkeit und des Drude-Gewichts.

$\langle \hat{H}_0^x \rangle$ zu bilden. Der zweite Term im Drude-Gewicht stimmt betragsmäßig mit dem Integral über σ für endliche Frequenzen überein. Die explizite Berechnung des Drude-Peaks ist nur bei periodischen Randbedingungen nötig, da dieser für offene Ränder in Richtung des \mathbf{E} -Feldes verschwindet. Trotzdem kann bei offenen Randbedingungen aufgrund der im thermodynamischen Limes möglichen infinitesimal kleinen Übergangsenergien $\hbar\omega_n$ auch eine nichtverschwindende dc-Leitfähigkeit auftreten.⁴ Die Vorgehensweise zur Berechnung von $\sigma(\omega)$, um Kurven wie in Abbildung 3.5 zu erhalten, ist in Algorithmus 2.1.2 zusammengefaßt. Der numerisch aufwendigste Teil liegt in der exakten Diagonalisierung von \hat{H} mittels *LAPACK*-Routinen. Durch die Beschränkung auf wechselwirkungsfreie Systeme können die Gesamtwellenfunktionen $|\psi_0\rangle$ bzw. $|\psi_n\rangle$ als Produkte von Einteilchenwellenfunktionen $|\psi_l\rangle$ dargestellt werden. Daher genügt es für die Berechnung der Matrixelemente von \hat{j} Einteilchenanregungen zu betrachten. Da für $T = 0$ diese Anregungen aus dem Grundzustand heraus erfolgen, liefert aufgrund von (A.29) lediglich derjenige Zustand $|\psi_l\rangle$ mit $E_l < E_F$ einen von null verschiedenen Beitrag, der durch

⁴Da eine reale Messung immer nur über eine endliche Zeitdauer Δt durchgeführt werden kann, ist es aufgrund dieser nicht möglich, eine Frequenz $\omega \ll \frac{1}{\Delta t}$ von $\omega = 0$ zu unterscheiden.

den Stromoperator in einen Zustand $|\psi_l\rangle$ jenseits der Fermienergie angeregt wird (vgl. Abb. 2.6).

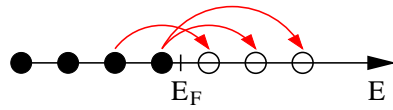


Abbildung 2.6: Beispiele für mögliche Einteilchenanregungen.

Um eine aussagekräftige Mittelung über verschiedene Realisierungen der Unordnung durchführen zu können, ist es nötig, die mit $\frac{\langle\psi_l|\hat{j}|\psi_k\rangle}{E_k-E_l}$ gewichteten δ -Peaks⁵ in geeigneter Weise zu verbreitern. Die einfachste Möglichkeit hierfür besteht in der Erstellung eines linearen Histogramms. Für eine detailliertere Diskussion der Histogrammerstellung vergleiche Kapitel 2.3.4. Für ein makroskopisches System erwartet man einen stetigen Verlauf von $\sigma(\omega)$ bei Annäherung an $\omega = 0$.

Allerdings ist dies numerisch für die betrachteten relativ kleinen Systeme nicht gut erfüllt. So liefert eine Extrapolation der Kurve von $\sigma(\omega)$ für $\omega \rightarrow 0$ einen Wert, der zum Teil wesentlich von dem abweicht, was man durch Auswertung des Drude-Gewichts erhält. Rein formal ergibt sich dieses Problem aus der Reihenfolge der drei Grenzwerte, die nötig sind, um zur Gleichstromleitfähigkeit zu kommen. Zunächst ist der thermodynamische Limes $N \rightarrow \infty$ mit $a = \text{const}$ durchzuführen, der hier durch Verwendung von periodischen Randbedingungen als relativ problemlos angesehen werden kann. Danach ist allerdings erst der Limes $\omega \rightarrow 0$ zu bilden, bevor man in einem letzten Schritt $T \rightarrow 0$ gehen lassen kann. Dadurch bleibt eine Aufweichung der Fermikante und die damit verbundene Möglichkeit von Übergängen bei kleinsten Frequenzen bis zum Schluß erhalten. Da die Ableitung von (2.11) allerdings von vorneherein auf der Annahme $T = 0$ basierte, kann ein Versuch, hieraus den Limes $\omega \rightarrow 0$ zu erhalten, wegen der falschen Reihenfolge der Grenzprozesse nicht erfolgreich unternommen werden. Die Probleme sind jedoch auf den Gleichstromlimes beschränkt, und man erwartet, daß die Herleitung bei $T = 0$ für alle endlichen Frequenzen ein korrektes Ergebnis liefert. Da für Systeme mit offenen Rändern in Richtung des E-Feldes der Drude-Peak verschwindet, ergibt sich für die optische Leitfähigkeit in diesem Fall

$$\sigma_{\text{reg}}(\omega) = \frac{\pi t_0 e^2}{\hbar^2 N a} t_0 \sum_{n>0} \frac{|\langle\psi_0|\hat{j}|\psi_n\rangle|^2}{\hbar\omega_n} (\delta(\omega + \omega_n) + \delta(\omega - \omega_n)) \quad . \quad (2.15)$$

Diese von Beginn an für $T = 0$ hergeleitete Formel erhält man ebenfalls als Grenzfall der aus einer allgemeineren Herleitung [11] für endliche Temperaturen stammenden Kubo-Greenwood-Formel [22, 33]

$$\sigma_{\text{reg}}(\omega) = \frac{\pi t_0 e^2}{\hbar N a} t_0 \sum_{k,l} \frac{|\langle\psi_k|\hat{j}|\psi_l\rangle|^2}{\hbar\omega} (f(\epsilon_l) - f(\epsilon_k)) \delta(\hbar\omega + \epsilon_l - \epsilon_k) \quad . \quad (2.16)$$

Hierbei bezeichnen $|\psi_k\rangle$ und $|\psi_l\rangle$ beliebige Vielteilchenzustände mit zugehörigen Energien ϵ_k und ϵ_l sowie

$$f(\epsilon) = \frac{1}{\exp\left\{\frac{\epsilon-\mu}{k_B T}\right\} + 1} \quad (2.17)$$

⁵für die numerische Rechnung setze $\hbar = t_0 = 1$

die Fermiverteilung bei Temperatur T und chemischem Potential μ . Läßt man hier T gegen null gehen, so wird aus der Fermiverteilung $f(\epsilon)$ eine Heavysidesche Sprungfunktion $\theta(\epsilon)$. Berücksichtigt man weiter, daß bei Anregungen aus dem Grundzustand $|\psi_l\rangle \equiv |\psi_0\rangle$ heraus stets $\epsilon_l < \epsilon_k$ ist, so zeigt sich aufgrund des Verschwindens der zweiten δ -Distribution in (2.15) die Äquivalenz zu (2.16).

2.2 Leitwertberechnung mittels Greenscher Funktionen

Will man (2.15) auswerten, so ist es für die Berechnung der Matrixelemente von \hat{j} nötig, das System explizit zu diagonalisieren. Dadurch ist die Anwendung dieser Methode in der Praxis auf relativ kleine Systeme (sinnvolle Größen sind etwa $10^3 \dots 15^3$) beschränkt. Einen Ausweg bietet hier die Verwendung der Technik der Greenschen Funktionen. Hierzu definiert man für $z = E + i\gamma \in \mathbb{C}$ die als Einteilchen Greensche Funktion bezeichnete Resolvente

$$\hat{\mathcal{G}}(z) = (z\hat{\mathbb{1}} - \hat{H})^{-1} \quad , \quad (2.18)$$

die für alle z mit nichtverschwindendem Imaginärteil γ eine analytische Funktion von z ist, während an den Stellen der reellen Eigenwerte ϵ_k von \hat{H} Pole längs der reellen Energieachse liegen. Verwendet man die Darstellung von $\delta(E - \hat{H})$ im Eigenfunktionssystem $|k\rangle$ von \hat{H} einerseits und die Plemelj-Formel (A.33) andererseits, so liefern die daraus resultierenden Identitäten

$$\delta(E - \hat{H}) = \sum_k \delta(E - \epsilon_k) |k\rangle \langle k| = \quad (2.19)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \{ \hat{\mathcal{G}}(E + i\epsilon) \} = -\frac{1}{2\pi i} (\hat{\mathcal{G}}(E + i\epsilon) - \hat{\mathcal{G}}(E - i\epsilon)) \quad (2.20)$$

die Möglichkeit einer alternativen Darstellung von $\mathcal{Re}\{\sigma\}$, für deren Berechnung eine explizite Kenntnis der Eigenfunktionen des Systems nicht nötig ist. Durch Einfügen einer zusätzlichen E -Integration in (2.16) und der Darstellung von $\frac{df(E)}{dE}$ als Differenzenquotient für $E - E_F = \hbar\omega \ll t_0$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{Re}\{\sigma(\omega)\} &= \frac{\pi t_0^2 e^2}{\hbar N a} \sum_{k,l} \frac{|\langle \psi_k | \hat{j} | \psi_l \rangle|^2}{\hbar \omega} (f(\epsilon_l) - f(\epsilon_k)) \delta(\hbar\omega + \epsilon_l - \epsilon_k) = \\ &= \frac{\pi t_0^2 e^2}{\hbar N a} \sum_{k,l,m} \int dE \frac{df(E)}{dE} \delta(E - \epsilon_l) \delta(E + \hbar\omega - \epsilon_k) \langle k | \hat{j} | l \rangle \langle l | \hat{j} | m \rangle \langle m | k \rangle = \\ &= \frac{\pi t_0^2 e^2}{\hbar N a} \int dE \frac{df(E)}{dE} \text{Sp} \{ \delta(E - H) \hat{j} \delta(E + \hbar\omega - H) \hat{j} \} \quad , \quad (2.21) \end{aligned}$$

wobei die Skalarprodukte unter Ausnutzung von (2.19) als Spur zusammengefaßt werden können. Weiterhin wird im Grenzfall $T = 0$ die Ableitung der Fermiverteilung zu einem negativen δ -Peak an der Stelle der Fermienergie, was im dc-Limes $\omega = 0$ unter Berücksichtigung der zyklischen Invarianz der Spur und (2.20) zu folgendem Ausdruck

für die Leitfähigkeit führt:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{dc}} &= \frac{\pi t_0^2 e^2}{\hbar N a} \mathcal{S}p\{\hat{j} \delta(E_F - H) \hat{j} \delta(E_F - H)\} = \\ &= \frac{t_0^2 e^2}{\hbar \pi N a} \mathcal{S}p\{\hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}(E_F + i\gamma)\} \hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}(E_F + i\gamma)\}\} \quad , \quad (2.22)\end{aligned}$$

wobei der kleine Imaginärteil γ für einen endlichen Abstand von den Polen von $\hat{\mathcal{G}}(z)$ sorgt. Obwohl die Herleitung von (2.22) in Kapitel 2.1.3 ursprünglich unter Verwendung von periodischen Randbedingungen für unendlich ausgedehnte Systeme durchgeführt wurde, findet (2.22) in der Literatur auch für andere Geometrien vielfach Verwendung. Um auch für ein endliches System die Bildung stationärer Zustände zu ermöglichen, bietet sich die sogenannte Landauer-Geometrie an. Bei dieser wird die Probe von zwei ideal leitfähigen, halbunendlichen Zuleitungen kontaktiert, die als makroskopische Reservoirs dienen. Ein statisches \mathbf{E} -Feld innerhalb der Probe erreicht man durch Setzen der beiden Reservoirs auf unterschiedliche Potentialwerte μ , etwa $\mu_L = 0$ und $\mu_R = -eV$. Will man auf dieses System (2.22) anwenden, so ist die Matrix, die man zur Berechnung von $\hat{\mathcal{G}}$ invertieren muß unendlich-dimensional, da das zugrundeliegende System aufgrund der Zuleitungen offen ist. Ein einfaches Abschneiden der Matrix an einer bestimmten Stelle würde allerdings dazu führen, daß das so beschriebene System nicht mehr offen wäre, und voll reflektierende Ränder einführen. Um dies zu vermeiden, bedient man sich eines Tricks [12]: So wie man den Gesamthamiltonoperator \hat{H}_{ges} des Systems aus Probe und Zuleitungen in die beiden Operatoren \hat{H}_P und \hat{H}_Z , die jeweils Probe und Zuleitungen einzeln beschreiben, aufteilen kann, wendet man solch eine Aufteilung auch auf $\hat{\mathcal{G}}_{\text{ges}}$ an:

$$\left[\hat{\mathcal{G}}_{\text{ges}} \right] \equiv \begin{bmatrix} \hat{\mathcal{G}}_Z & \hat{\mathcal{G}}_K \\ \hat{\mathcal{G}}_K^\dagger & \hat{\mathcal{G}}_P \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E + i\gamma)\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_Z & \hat{\tau}_K \\ \hat{\tau}_K^\dagger & E\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_P \end{bmatrix}^{-1} \quad . \quad (2.23)$$

Das Hinzufügen eines infinitesimal kleinen Imaginärteils zu \hat{H}_P ist nicht nötig, da durch die Kopplung an die Zuleitungen ohnehin ein endlicher Imaginärteil auftritt. Dieser hängt mit der mittleren Verweildauer eines Elektrons in der Probe zusammen und vermeidet das Auftreten einer Singularität bei der Invertierung der Matrix. Die Kopplungsmatrix $\hat{\tau}_K$ hat nur an denjenigen Stellen von null verschiedene Einträge, die benachbarte Plätze j und j_Z beschreiben. An denen ist $[\hat{\tau}_K]_{j,j_Z} = t_K$, wobei mit t_K das Hüpfmatrixelement zwischen Probe und Zuleitungen bezeichnet wird. Der Fall $t_K \neq t_0$ wurde ebenso wie ein abweichender Wert der Hüpfmatrixelemente in den Zuleitungen in [43] diskutiert. Für die weitere Betrachtung sollen alle Hüpfmatrixelemente gleich dem der Probe t_0 sein. Um einen expliziten Ausdruck für die eigentlich interessante Größe, die Untermatrix $\hat{\mathcal{G}}_P$, zu erhalten nutzt man aus, daß aufgrund von $\hat{\mathcal{G}}_{\text{ges}} \hat{\mathcal{G}}_{\text{ges}}^{-1} = \hat{\mathbf{1}}$ und (2.23) gilt:

$$\left[(E + i\gamma)\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_Z \right] \hat{\mathcal{G}}_K + \hat{\tau}_K \hat{\mathcal{G}}_P = 0 \quad , \quad (2.24)$$

$$\left[E\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_P \right] \hat{\mathcal{G}}_P + \hat{\tau}_K^\dagger \hat{\mathcal{G}}_K = \hat{\mathbf{1}} \quad . \quad (2.25)$$

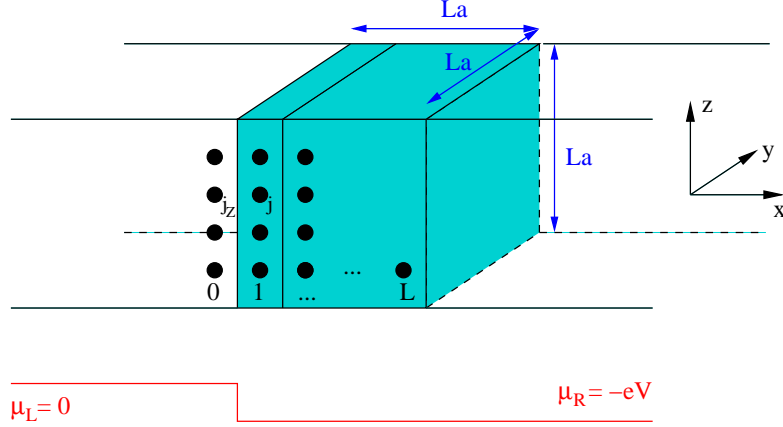


Abbildung 2.7: Schematische Darstellung eines Kristalls in Landauer-Geometrie. Die Bezeichnungen in der Rechnung sind dieser Skizze entnommen.

Mit der Bezeichnung $\hat{g}_p^R = [(E + i\gamma)\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_Z]^{-1}$ für die Greensche Funktion der halbunendlichen Zuleitung, erhält man nach (2.24) und (2.25):

$$\hat{\mathcal{G}}_P = \left[E\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_P - \hat{\tau}_K^\dagger \hat{g}_p^R \hat{\tau}_K \right]^{-1}. \quad (2.26)$$

Durch die spezielle Struktur der Kopplungsmatrix $\hat{\tau}_K$, deren Einträge nur für benachbarte Punkte (j, j_Z) ungleich null sind, folgt

$$[\hat{\tau}_K^\dagger \hat{g}_p^R \hat{\tau}_K]_{k,l} = t_0^2 [\hat{g}_p^R]_{k_Z, l_Z}. \quad (2.27)$$

Geht man weiterhin vom Superpositionsprinzip aus und betrachtet verschiedene Zuleitungen Z als voneinander unabhängig, so führt die Addition ihrer Effekte zu

$$\hat{\mathcal{G}}_P = \left[E\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_P - \hat{\Sigma}^R \right]^{-1} \quad (2.28)$$

$$\text{mit } \hat{\Sigma}^R = \sum_Z t_0^2 [\hat{g}_p^R]_{k_Z, l_Z}. \quad (2.29)$$

Wenn man es erreichen kann, für die Berechnung von \hat{g}_p^R nicht die unendlich-dimensionale Matrix der halbunendlichen Zuleitungen invertieren zu müssen, hat man das Problem der Berechnung von $\hat{\mathcal{G}}_P$ auf die Invertierung einer endlich-dimensionalen Matrix reduziert. Für eine Probe mit N Gitterplätzen hat diese Matrix die Dimension $N \times N$. Trotzdem ist die Darstellung (2.28) exakt, da die Wechselwirkung mit den Zuleitungen vollständig durch den Massenoperator (Selbstenergie) $\hat{\Sigma}^R$, berücksichtigt wird. Im Unterschied zu Berechnungen in wechselwirkenden Elektronensystemen kann $\hat{\Sigma}^R$ hier exakt dargestellt werden. Daher sind die Formulierungen $\hat{\mathcal{G}}_{\text{ges}}^R = [(E + i\gamma)\hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_{\text{ges}}]^{-1}$ und (2.28) vollständig äquivalent. Für die hier betrachtete Geometrie mit halbunendlichen Zuleitungen läßt sich \hat{g}_p^R analytisch in einer Basis aus transversalen Moden berechnen. Mit den Bezeichnungen $\epsilon(k_y, k_z) = 2t_0[\cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$ für die durch $k = \frac{i\pi}{(L+1)a}$, $i = 1, \dots, L$ quantisierten

Energien der transversalen Moden und $E_\Sigma := E_F - \epsilon(k_y, k_z)$ liefert die Rechnung in dieser Basis:

$$\hat{\Sigma}^R(k_y, k_z) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(E_\Sigma - i\sqrt{4t_0^2 - E_\Sigma^2} \right) & \text{für } |E_\Sigma| \leq 2|t_0| \\ \frac{1}{2} \left(E_\Sigma - \text{sgn}\{E_\Sigma\} \sqrt{E_\Sigma^2 - 4t_0^2} \right) & \text{sonst} \end{cases} . \quad (2.30)$$

Um die Matrixelemente von $\hat{\Sigma}^R$ in der lokalen Tight-binding-Basis $|\mathbf{n}\rangle = |n_y, n_z\rangle$ zu erhalten, in der alle anderen Operatoren dargestellt sind, muß man von der Normalmodenbasis $|\mathbf{k}\rangle = |k_y, k_z\rangle$ aus noch einen Basiswechsel unter Berücksichtigung der Amplitude der Mode $|\mathbf{k}\rangle$ am Platz $|\mathbf{n}\rangle$

$$\langle n_y | k_y \rangle = \sqrt{\frac{2}{L+1}} \sin(k_y n_y a) = \sqrt{\frac{2}{L+1}} \sin\left(\frac{i_y n_y \pi}{L+1}\right) \quad (2.31)$$

durchführen. Dies führt zu der folgenden Darstellung der Selbstenergie in der Tight-binding-Basis:

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Sigma}^R \right]_{n,m} &= \langle \mathbf{n} | \hat{\Sigma}^R | \mathbf{m} \rangle = \\ &= \sum_{k_y, k_z} \langle n_y | k_y \rangle \langle n_z | k_z \rangle \hat{\Sigma}^R(k_y, k_z) \langle m_y | k_y \rangle \langle m_z | k_z \rangle . \end{aligned} \quad (2.32)$$

Diesen konzeptionell wichtigen Schritt, die Betrachtung auf einen Teil des Gesamtsystems zu beschränken und den Rest des Systems vollständig durch die Selbstenergie zu beschreiben, kann man sich auch numerisch zu Nutze machen [64]. Anstatt die Greensche Funktion für den gesamten Kristall zu berechnen, geht man sukzessiv zu immer kleineren Teilen des Kristalls über, indem man eine Ebene nach der anderen entfernt, und deren Wirkung durch eine Modifikation der Selbstenergie beschreibt. Auf diese Weise ist es möglich, das gesamte ursprünglich offene System durch die Greensche Funktion von zwei Ebenen des Kristalls und entsprechende Selbstenergien, die das restliche System repräsentieren, darzustellen. Um die Selbstenergien zu berechnen, geht man von den bekannten Selbstenergien der Zuleitungen (2.32) aus und iteriert die von der rechten Seite kommende Selbstenergie mittels der Dyson-Gleichung für die Greensche Funktion [60] durch das System. Mit den Bezeichnungen \hat{H}_k für den Hamiltonoperator der Schicht k , in dem außer den Diagonaltermen nur Hüpfterme innerhalb dieser Ebene auftreten, und $\hat{\mathbf{V}}_{k-1, k}$ der Matrix, welche das Hüpfen zwischen den Schichten $k-1$ und k beschreibt, wobei $\hat{\mathbf{V}}_{k, k-1} = \hat{\mathbf{V}}_{k-1, k}^\dagger$ gilt, erhält man als Iterationsvorschrift:

$$\hat{\Sigma}_{k-1}^R = \hat{\mathbf{V}}_{k-1, k} [E \hat{\mathbf{1}} - \hat{\mathbf{V}}_{k, k} - \hat{\Sigma}_k^R]^{-1} \hat{\mathbf{V}}_{k, k-1} . \quad (2.33)$$

Damit läßt sich die Selbstenergie des rechten Kontakts bis zur Ebene 1 durchiterieren, was zusammen mit der Selbstenergie des linken Kontakts $\hat{\Sigma}_0$ die Berechnung der Greenschen Funktion des Systems aus Ebene 0 und 1 ermöglicht:

$$[E \hat{\mathbf{1}} - \hat{H}_{01} - \hat{\Sigma}_0^R - \hat{\Sigma}_1^R] \hat{\mathcal{G}}_{\text{ges}}^R = \hat{\mathbf{1}} . \quad (2.34)$$

Um den Vorteil, hier nur eine $L^2 \times L^2$ Matrix invertieren zu müssen, auch wirklich bei der Auswertung von (2.22) ausnutzen zu können, ist es notwendig, daß sich der Stromoperator auch in einer Form darstellen läßt, in der er auf diese beiden Ebenen beschränkt ist. Dies ist tatsächlich der Fall, da aufgrund der Stromerhaltung der konkrete Verlauf des Potentialgefälles innerhalb des Kristalls für den Strom unerheblich ist, und man anstelle der intuitiven Wahl eines gleichmäßigen Abfalls über die gesamte Länge des Systems, eine für die Numerik günstigere Wahl treffen kann [42]. Um die gewünschten Eigenschaften für den Stromoperator zu erhalten bietet es sich an, für das Potential eine stufenförmigen Verlauf anzunehmen, bei dem alle Gitterplätze ab Ebene 1 und die rechte Zuleitung auf das Potential $\mu = -eV$ gesetzt werden, während die linke Zuleitung weiterhin auf $\mu = 0$ bleibt. Dadurch ist außer der ersten Ebene der gesamte Kristall formal feldfrei, was zu einer Modifikation der Stromoperatoren \hat{j} aus (A.17) und \hat{j} aus (2.12) führt:

$$\hat{j} = -\frac{iet_0}{\hbar L^2 a^2} \sum_{m=1}^{L^2} \left(\hat{c}_{m,0}^\dagger \hat{c}_{m,1} - \hat{c}_{m,1}^\dagger \hat{c}_{m,0} \right) =: \frac{et_0}{\hbar L^2 a^2} \hat{j} \quad . \quad (2.35)$$

Der Normierungsfaktor N im Nenner von (A.17), der ursprünglich zur Mittelung über die N Summanden eingeführt wurde, wird hier aufgrund der veränderten Summationsgrenzen durch L^2 ersetzt. Will man nicht die intensive Größe der mittleren Leitfähigkeit pro Atom, sondern probenspezifische Leitfähigkeit bezogen auf die Querschnittsfläche des Kristalls berechnen, so entfällt der Faktor L^2 . Es versteht sich angesichts dieser Herleitung von selbst, daß die Spur in (2.22) nur über die Plätze in den Ebenen 0 und 1 zu bilden ist. Damit ist es möglich, für ein gegebenes System mit bestimmter Realisierung der Unordnung und Lage der Fermienergie die Leitfähigkeit zu berechnen. Als probenspezifische Größe ist der Leitwert G zur Diskussion besser geeignet als die Leitfähigkeit. Zwischen dem Leitwert und der Leitfähigkeit besteht für makroskopische Systeme der Kantenlänge La der Zusammenhang

$$G = \sigma(La)^{d-2} \quad . \quad (2.36)$$

Wendet man diesen auf (2.22) an, so ergibt sich letztlich für den Gleichstrom-Leitwert eines Systems bei $T = 0$ für eine vorgegebene Lage der Fermienergie E_F

$$G_{\text{dc}}^{\square} = \frac{e^2}{h} \frac{2t_0^2}{L^2} \mathcal{S}p \left\{ \hat{j} \mathcal{I}m \{ \hat{\mathcal{G}}(E_F + i\gamma) \} \hat{j} \mathcal{I}m \{ \hat{\mathcal{G}}(E_F + i\gamma) \} \right\} \quad , \quad (2.37)$$

wobei das Symbol \square andeuten soll, daß der Leitwert hier auf eine Einheitsfläche mit nur einem Atom bezogen ist. Den eigentlichen Leitwert G_{dc} , den eine Messung an dem Kristall liefert, erhält man durch Multiplikation mit L^2 :

$$G_{\text{dc}} = G_{\text{dc}}^{\square} L^2 = 2 \frac{e^2}{h} t_0^2 \mathcal{S}p \left\{ \hat{j} \mathcal{I}m \{ \hat{\mathcal{G}}(E_F + i\gamma) \} \hat{j} \mathcal{I}m \{ \hat{\mathcal{G}}(E_F + i\gamma) \} \right\} \quad . \quad (2.38)$$

Der numerisch aufwendigste Teil der Berechnung von G besteht in der in jedem Iterationsschritt zur Berechnung der Selbstenergie der neuen Schicht $\hat{\Sigma}_{k-1}^{\text{R}}$ nötigen Invertierung einer dichtbesetzten komplexen $L^2 \times L^2$ Matrix in (2.33). Je nach Systemgröße spielt auch

Berechne Amplituden der Normalmoden $\langle \mathbf{n} \mathbf{k} \rangle$ nach (2.31)	
Selbstenergie der Kontakte $\hat{\Sigma}_0^R, \hat{\Sigma}_{L+1}^R$ in Normalmodenbasis gemäß (2.30)	
$\hat{\Sigma}_0^R$ und $\hat{\Sigma}_{L+1}^R$ in Tight-binding-Basis aus (2.31) und (2.32)	
Für $k = L, \dots, 2$	
	Iteriere Selbstenergie durch den Kristall: $\hat{\Sigma}_{k-1}^R$ ergibt sich aus (2.33)
Berechne Greensche Funktion $\hat{\mathcal{G}}^R$ für Ebene 0 und 1 nach (2.34)	
Berechne $\hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}^R\}$ mittels Wirkung von \hat{j} (2.39)	
Spurbildung in (2.38) unter Ausnutzung von (2.40)	

Algorithmus 2.2.1: Berechnung des Gleichstromleitwertes mittels Technik der Greenschen Funktionen für ein System in Landauer-Geometrie.

die abschließend nötige Invertierung der $2L^2 \times 2L^2$ Matrix zur Berechnung der Greenschen Funktion in (2.34) eine wesentliche Rolle, da die Komplexität der Matrixinvertierung mit der dritten Potenz der Matrixdimension steigt. Dahingegen ist der Aufwand der Multiplikation mit \hat{j} vernachlässigbar, da es nicht nötig ist diese explizit durchzuführen. Die aus (2.35) abzulesende Wirkung von \hat{j} besteht lediglich in einer Vertauschung der Spalten, die den Ebenen 0 und 1 entsprechen, und Hinzufügen eines Minuszeichens in den neuen Spalten der Ebene 0:

$$\hat{j} \begin{bmatrix} [\mathbf{M}_0] & [\mathbf{M}_1] \end{bmatrix} = i \begin{bmatrix} [-\mathbf{M}_1] & [\mathbf{M}_0] \end{bmatrix} . \quad (2.39)$$

Weiterhin ist es auch nicht nötig, für die Spurbildung die volle Matrix-Multiplikation von $\hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}\}$ mit sich selbst durchzuführen, sondern es genügt die $2L^2$ Skalarprodukte der k -ten Zeile mit der k -ten Spalte von $\hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}\}$ aufzusummieren:

$$Sp\{\hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}\} \hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}\}\} = \sum_k \left[\hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}\} \hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}\} \right]_{kk} = \sum_{k,l} \left[\hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}\} \right]_{kl} \left[\hat{j} \mathcal{I}m\{\hat{\mathcal{G}}\} \right]_{lk} . \quad (2.40)$$

Eine Zusammenfassung dieser Methode liefert Algorithmus 2.2.1. Die statistische Natur der Unordnung bedingt weiterhin eine Mittelung über verschiedene Realisierungen. Es zeigt sich, daß die Ergebnisse dieser Methode für G_{dc} bzw. σ_{dc} nicht mit denen aus Kapitel 2.1.3 übereinstimmen. Der primäre Grund hierfür ist in den verschiedenen Randbedin-

gungen zu suchen. Während sich die in 2.1.3 berechnete Leitfähigkeit ausschließlich auf den Kristall mit den verwendeten offenen, bzw. periodischen Randbedingungen bezieht, berechnet man hier die Leitfähigkeit des Gesamtsystems aus Kristall *und* Zuleitung. Eine weitere Frage betrifft die Gültigkeit von (2.36). Die Tatsache, daß dieser Zusammenhang für makroskopische Systeme gilt, ist allgemein akzeptiert und auch experimentell gut bestätigt. Allerdings treten in Systemen, deren Abmessungen in der Größenordnung der charakteristischen Längenskalen des Systems liegen Quantenkorrekturen zur Leitfähigkeit auf. Zu diesen zu beachtenden Längenskalen gehören die Fermi-Wellenlänge λ_F der Elektronen sowie die mittlere freie Weglänge ℓ und Phasenkohärenzlänge L_ϕ [12]. Die auf einer Skala von $L_\phi \gg \ell$ nichtlokalen Quantenkorrekturen zur Leitfähigkeit führen dazu, daß im mesoskopischen Bereich das Konzept lokaler Größen wie der Leitfähigkeit nur noch von formaler Bedeutung ist und man zur Beschreibung mesoskopischer Systeme besser probenspezifische Werte, wie den Leitwert heranziehen sollte [41].

2.3 Momentenverfahren

Im Hinblick auf die Betrachtung größerer Systeme ist es nötig, eine Möglichkeit zu finden, mittels derer man die Eigenwerte des Hamiltonoperators approximativ bestimmen kann, ohne dafür die Matrix vollständig exakt diagonalisieren zu müssen. Will man Größen berechnen, für die lediglich einige wenige Eigenwerte und Zustände am Rand des Spektrums von Bedeutung sind, wie beispielsweise Grundzustandsenergien und wenige angeregte Zustände, besteht eine effektive Vorgehensweise in der Verwendung des Lanczos-Algorithmus [10]. Sucht man nach einer geringen Anzahl von Eigenwerten im Inneren des Spektrums, so ist es möglich mit iterativen Teilraumverfahren wie dem Jacobi-Davidson-Verfahren zu arbeiten, welches ebenso auf die Berechnung einiger weniger Zustände beschränkt ist. Für die Berechnung von Größen, bei denen eine Vielzahl oder die Gesamtheit der Eigenwerte eine wichtige Rolle spielen, wie bei der Zustandsdichte, ist man gezwungen auf andere Methoden auszuweichen. Hierfür ist es günstig, ein Verfahren zu benutzen, welches eine Approximation an das gesamte Spektrum auf einmal liefert. Ein seit längerer Zeit in Bayreuth erfolgreich eingesetztes Verfahren, das diesen Kriterien genügt, ist die sogenannte Polynomkern-Methode (KPM)⁶, die auf einem Algorithmus von Silver et al. [54] beruht.

2.3.1 Polynomkern-Methode

Ziel der in Anhang B beschriebenen Polynomkern-Approximation ist es, eine beliebige Funktion $f(x)$ nach einem orthogonalen Funktionensystem zu entwickeln. Da man diese Entwicklung bei einer bestimmten Ordnung M abbricht, muß man zur Vermeidung von Gibbs-Oszillationen Dämpfungsfaktoren g_m einführen, durch die der Einfluß der höheren verwendeten Entwicklungsterme stetig bis auf null für $M+1$ vermindert wird. Mittels der Variablensubstitution $\phi := \arccos(x)$, durch welche die Entwicklung formal auf eine Fourier-Reihe zurückgeführt wird, läßt sich die Approximation \tilde{f} an die ursprüngliche

⁶kernel-polynomial-method

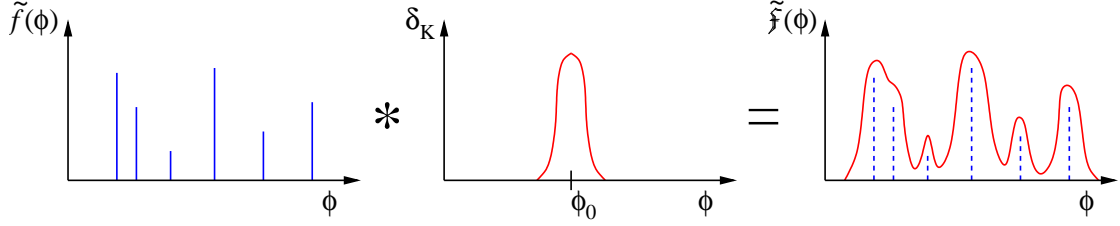


Abbildung 2.8: Schematische Darstellung des Einflusses der Faltung der Funktion mit dem Integralkern. Im rechten Bild deuten die gestrichelten Linien die Positionen der ursprünglichen Delta-Peaks an.

Funktion \tilde{f} in Form des Faltungsintegrals

$$\tilde{f}(\phi) = \int_0^{2\pi} \delta_K(\phi - \phi_0) \tilde{f}(\phi_0) d\phi_0 \quad (2.41)$$

mit dem π -antiperiodische Integralkern $\delta_K(\phi - \phi_0)$ darstellen. Dieser, der KPM ihren Namen verleihende Polynomkern

$$\delta_K(\phi - \phi_0) = \frac{1}{2\pi} \left(g_0 + 2 \sum_{m=1}^M g_m \cos(m(\phi - \phi_0)) \right) , \quad (2.42)$$

stellt eine polynomiale Approximation der Diracschen Delta-Distribution dar, falls das Integral $\int \delta_K(\phi) d\phi$ über eine Periode von 2π gleich 1 ist, was durch $g_0 = 1$ garantiert wird. Die Wahl der weiteren g_m , $m \geq 1$ bestimmt nun das Approximationsverhalten von \tilde{f} und die Form von δ_K . Aus der Darstellung der Approximationsfunktion durch ein Faltungsintegral kann man auch anschaulich eine Aussage über die Auflösung treffen (vgl. Abb. 2.8). Die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten und mittels KPM approximierten Funktionen sind vom Typ der Spektralfunktionen, bestehen also im weitesten Sinne aus einer Summe von δ -Peaks mit unterschiedlichen Gewichtungsfaktoren. Durch die Faltung mit dem Polynomkern werden diese Peaks entsprechend δ_K verbreitert. Falls die Abstände zweier einzelner Peaks von $\tilde{f}(\phi)$ kleiner sind als die Breite von δ_K , so verschwimmen sie in \tilde{f} zu einem breiten Peak und können nicht mehr getrennt aufgelöst werden. Weiterhin wird auch die Glättung der Gibbs-Oszillationen durch dieses Bild deutlich. Anstelle der unendlich scharfen δ -Peaks, für deren Approximation unendlich viele Terme nötig wären, treten jetzt Polynome vom Grad M auf, die durch eine Reihenentwicklung bis zu dieser Ordnung exakt wiedergegeben werden können. Eine optimale Wahl dieser Gibbs-Faktoren bezüglich Positivität des Kerns δ_K und der bestmöglich erreichbaren Auflösung der Approximationsfunktion in ϕ wurde von Silver et al. [54] hergeleitet. Mittels einer Variationsrechnung zur Minimierung der Varianz $\int \phi^2 \delta_K(\phi) d\phi$ unter der Nebenbedingung der Normiertheit von δ_K ergibt sich für die Dämpfungsfaktoren

$$g_m = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n=0}^{M-m} \sin\left(\frac{(n+1)\pi}{M+2}\right) \sin\left(\frac{(n+m+1)\pi}{M+2}\right) , \quad (2.43)$$

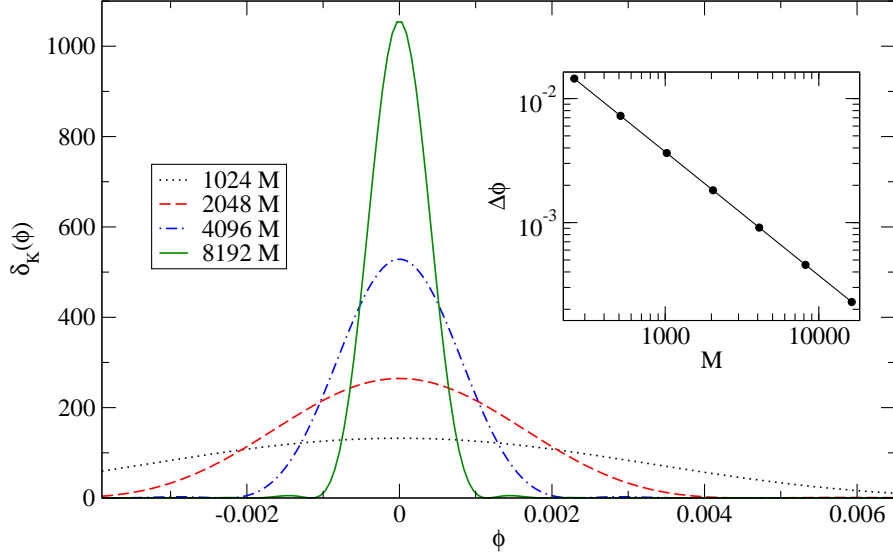


Abbildung 2.9: Verlauf des Jacksonkerns $\delta_K(\phi)$ als Funktion von $\phi = \arccos(x)$ für verschiedene Anzahlen von Chebyshev-Momenten M . Im rechten Teilbild ist als Maß für die Auflösung von $\delta_K(\phi)$ die halbe Breite auf halber Höhe des Maximums $\Delta\phi$ als Funktion der Anzahl der Chebyshev-Momente M dargestellt. Die durchgezogene Linie entspricht der Ausgleichsgeraden $\Delta\phi \sim M^{-1}$.

M	256	512	1024	2048	4096	8192	16384	32768
$\Delta\phi[10^{-3}]$	14.5	7.26	3.64	1.82	0.912	0.456	0.229	0.119

Tabelle 2.1: Halbe Halbwertsbreite $\Delta\phi$ des Jackson-Kerns $\delta_K(\phi)$ für verschiedene Anzahlen von Chebyshev-Momenten M

wobei der Normierungsfaktor \mathcal{N} sicherstellen soll, daß alle g_m zwischen 0 und 1 liegen. Dieser ist gegeben durch:

$$\mathcal{N} = \sum_{k=0}^M \sin^2 \left(\frac{(k+1)\pi}{M+2} \right) . \quad (2.44)$$

Durch Einsetzen von (2.43) in (2.42) erhält man eine explizite Darstellung des Integral-kerns als Funktion von $\phi - \phi_0$, die nur noch von dem Parameter der Momentenzahl M abhängt. Dieser Verlauf ist in Abbildung 2.9 für $\phi_0 = 0$ gezeigt. Daraus ist klar ersichtlich, daß die Breite des Kerns mit zunehmender Momentenzahl immer kleiner wird. Um dies mittels einer anschaulichen Größe quantitativ faßbar zu machen, ist es sinnvoll, die halbe Halbwertsbreite $\Delta\phi$, also die halbe Breite bei der Hälfte des Maximalwerts zu betrachten. Der Grund für die Verwendung dieser Größe liegt darin, daß man zwei Linien dann noch als getrennte Objekte erkennen kann, wenn ihr Abstand größer ist als die volle Halbwertsbreite $2\Delta\phi$. Eine Zusammenfassung numerischer Werte für $\Delta\phi$ liefert Tabelle 2.1. Aufgrund des Zusammenhangs $\phi = \arccos(x)$ bedeutet eine gleichmäßige Auflösung in Abhängigkeit von ϕ allerdings, daß die Auflösung in Abhängigkeit von x

davon abhängt, bei welchem x -Wert der Kern (2.42) zentriert ist. So ist wegen

$$\Delta\phi = \left| \frac{\partial\phi}{\partial x} \right| \Delta x = \frac{\Delta x}{\sqrt{1-x^2}} \quad (2.45)$$

die Auflösung in der Nähe der Ränder des Definitionsbereichs $] -1, 1[$ besser. Deshalb können dort für eine vorgegebene Anzahl von Momenten Strukturen aufgelöst werden, die im im Bereich um $x = 0$ noch verwaschen sind. Allerdings läßt sich in der Praxis hieraus kein Vorteil ziehen.

2.3.2 Lokale Zustandsdichte

Will man die elektronischen Eigenschaften eines Kristalls im Rahmen der statistischen Physik beschreiben, so ist es nötig zu wissen, ob es in einem gewissen Energieintervall erlaubte Zustände gibt, und falls ja wieviele. Die Größe, die hierüber eine Aussage trifft, ist die Zustandsdichte

$$\begin{aligned} \rho(E) &= \frac{1}{L^d} \sum_{n=1}^N \delta(E - \epsilon_n) = \\ &= \frac{1}{L^d} \mathcal{S}p\{\hat{\rho}\} = \frac{1}{L^d} \sum_{i=1}^N \langle i | \sum_{n=1}^N \delta(E - \epsilon_n) | n \rangle \langle n | i \rangle \quad , \end{aligned} \quad (2.46)$$

welche die Zahl der Zustände im Energieintervall $[E, E + dE]$ pro Einheitszelle angibt. Eine andere gebräuchliche Normierung ist die Normierung pro Volumen $(La)^d$, die sich von der obigen lediglich um den Faktor der atomaren Dichte a^{-d} unterscheidet [11]. Anhand dieser Definition wird klar, daß es sich bei ρ um eine globale Größe handelt, die durch die Eigenschaften des gesamten Kristalls bestimmt wird. Zur Beschreibung des Lokalisierungsproblems ist es, wie schon von Beginn an von Anderson [3] herausgestellt wurde, von entscheidender Bedeutung, der Betrachtung einen lokalen Aspekt beizumessen. Daher betrachtete dieser die Diagonalelemente der Greenschen Funktion in Ortsdarstellung

$$[\hat{\mathcal{G}}(E)]_{ii} = \sum_{n=1}^N \frac{\langle i | n \rangle \langle n | i \rangle}{E - \epsilon_n} = \sum_{n=1}^N \frac{|\psi_n(\mathbf{r}_i)|^2}{E - \epsilon_n} \quad , \quad (2.47)$$

wobei $\langle n | i \rangle = \psi_n(\mathbf{r}_i)$ die Amplitude der Wellenfunktion eines Elektrons im Zustand $|n\rangle$ am Platz i sowie ϵ_n die Energie des Zustands $|n\rangle$ ist. Aus der Verteilung und den analytischen Eigenschaften der $[\hat{\mathcal{G}}(E)]_{ii}$ können im Limes $N \rightarrow \infty$ Rückschlüsse auf die Lokalisierungseigenschaften gezogen werden, wobei eine Mittelung diese speziellen Eigenschaften unterdrückt [59]. Motiviert durch diese Erkenntnisse scheint es sinnvoll, zur Charakterisierung von Zuständen keine mittleren Größen heranzuziehen, sondern eine lokale Größe zu finden mit Hilfe deren man geeignete Aussagen treffen kann. In Anlehnung an (2.46) und (2.47) kann diese Rolle die sogenannte lokale Zustandsdichte

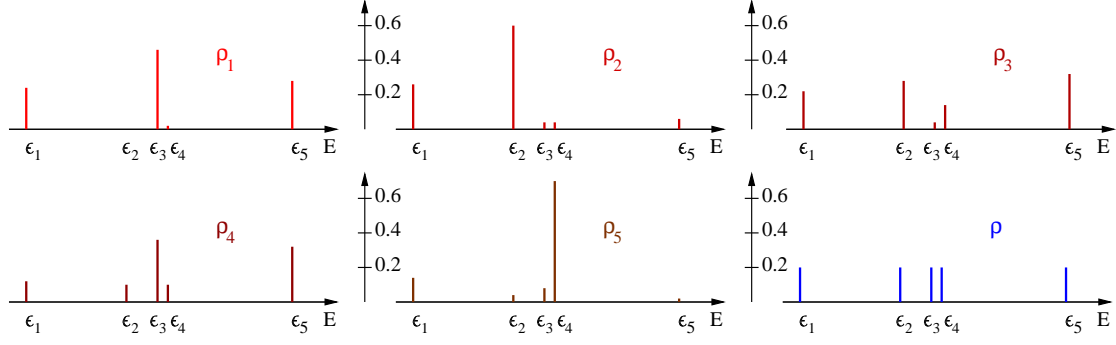


Abbildung 2.10: Schematische Darstellung der Bedeutung der lokalen Zustandsdichte ρ_i anhand des Beispiels (2.49). Mittelung der lokalen Zustandsdichte über alle Gitterplätze liefert die Zustandsdichte ρ , bei der an allen Positionen der Eigenwerte ϵ_n ein δ -Peak mit Gewicht $\frac{1}{N}$ auftritt.

(LDOS)⁷

$$\rho_i(E) = \langle i | \sum_n \delta(E - \epsilon_n) |n\rangle \langle n|i\rangle = \sum_{n=1}^N \delta(E - \epsilon_n) |\psi_n(\mathbf{r}_i)|^2 \quad (2.48)$$

übernehmen. Während die Zustandsdichte (2.46) keinen Unterschied zwischen lokalisierten und delokalisierten Zuständen erkennen läßt, ergibt sich für die lokale Zustandsdichte beim Anderson-Übergang ein qualitativer Unterschied. Dieser ergibt sich daraus, daß die LDOS direkt die lokalen Amplituden der Wellenfunktion am Platz i mißt [15]. Den Unterschied zwischen der Zustandsdichte (2.46) und der lokalen Zustandsdichte ρ_i am Gitterplatz i verdeutlicht man sich am besten anhand eines Beispiels (vgl. Abbildung 2.10). Die Diagonalisierung einer beliebigen 5×5 Matrix liefert deren Eigenwerte ϵ_n und die zugehörigen orthonormierten Eigenvektoren \mathbf{v}_n , die in Form einer Matrix \mathbf{V} geschrieben werden können, wobei der n -te Eigenvektor in der n -ten Spalte steht, und die i -te Zeile dem i -ten Gitterplatz entspricht:

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} +0.4841 & -0.0689 & +0.6851 & +0.1251 & -0.5252 \\ +0.5160 & -0.7693 & -0.2215 & -0.1822 & +0.2442 \\ -0.4723 & -0.5206 & -0.2203 & +0.3695 & -0.5664 \\ +0.3583 & +0.3094 & -0.5947 & -0.3240 & -0.5632 \\ +0.3847 & +0.1912 & -0.2818 & +0.8424 & +0.1627 \end{pmatrix}, \quad (2.49)$$

$$\epsilon_n = \quad -6.949 \quad -1.2156 \quad 0.6377 \quad 1.1271 \quad 8.3998 \quad .$$

Die lokale Zustandsdichte am Platz i besteht aus einer Summe von δ -Peaks bei den Energien ϵ_n mit zugehörigem Gewicht \mathbf{V}_{ni}^2 . Führt man hier nun eine Mittelung über alle N Gitterplätze des Systems durch, so erhält man $\rho \equiv \rho_{av}$. Anhand dieser gemittelten Größe lassen sich keine Unterschiede erkennen, die zwischen den Zuständen $|n\rangle$ bestehen. So ist $\psi_1(\mathbf{r})$ ausgedehnt, wodurch die LDOS bei ϵ_1 für alle Gitterplätze in etwa die gleiche Amplitude besitzt, während $\psi_4(\mathbf{r})$ eindeutig am Platz \mathbf{r}_5 lokalisiert ist.

⁷DOS = density of states

2.3.3 Berechnung der Momente

Die spezielle Form der lokalen Zustandsdichte (2.48) als gewichtete Summe über δ -Peaks ermöglicht es, die zur Berechnung der Polynomkern-Methode benötigten Entwicklungskoeffizienten auf effektive Weise zu berechnen. Da die Chebyshev-Entwicklung nur für Funktionen im Intervall $] -1, 1[$ möglich ist, müssen der Hamiltonoperator und die Energien reskaliert werden. Um sicherzustellen, daß das gesamte Spektrum in das geforderte Intervall fällt, schätzt man den betragsmäßig größtmöglichen Eigenwert ϵ_{\max} mittels des Kreisscheiben-Theorems von Gerschgorin [21, 50] ab. Da alle Eigenwerte von \hat{H} reell sind, nimmt die Form der Abschätzung hier anstelle einer Kreisscheibe die eines Intervalls an:

$$|\epsilon_n| \leq \frac{W}{2} + 2dt_0 =: \epsilon_{\text{mgl}} \quad . \quad (2.50)$$

Diese Abschätzung ergibt sich, da die Diagonalelemente bei Unordnungsstärke W zwischen $-\frac{W}{2}$ und $+\frac{W}{2}$ variieren können, und pro Zeile weitere $2d$ Einträge für die nächsten Nachbarn vorhanden sein können. Damit das Spektrum numerisch sicher im Intervall $] -1, 1[$ liegt, verwendet man als Skalierungsfaktor nicht direkt den Wert aus (2.50), sondern addiert noch einen kleinen Wert ϵ_{add} . Im Rahmen dieser Arbeit hat sich $\epsilon_{\text{add}} = 0.01t_0$ als günstiger Wert erwiesen und liegt allen weiteren Berechnungen zugrunde. Daraus folgt für die skalierten, dimensionslosen „Energien“ x, x_n sowie den Hamiltonoperator $\hat{\mathfrak{X}}$:

$$x := \frac{1}{\epsilon_{\text{mgl}} + \epsilon_{\text{add}}} E \quad , \quad x_n := \frac{1}{\epsilon_{\text{mgl}} + \epsilon_{\text{add}}} \epsilon_n \quad , \quad \hat{\mathfrak{X}} := \frac{1}{\epsilon_{\text{mgl}} + \epsilon_{\text{add}}} \hat{H} \quad . \quad (2.51)$$

Ein weiterer numerischer Vorteil ergibt sich bei der Berechnung der Entwicklungskoeffizienten μ_m durch die Rekursionsbeziehung der Chebyshev-Polynome. Durch iterierte Anwendung von (B.2) läßt sich induktiv für alle $m \geq n \geq 0$ der allgemeine Zusammenhang

$$2T_m(x)T_n(x) = T_{m+n}(x) + T_{m-n}(x) \quad (2.52)$$

zeigen, nach dem sich ein Produkt zweier Chebyshev-Polynome $T_n(x)$ und $T_m(x)$ wieder als Summe von Chebyshev-Polynomen schreiben läßt [2]. Wendet man (2.52) speziell auf die Fälle $n = m$ und $n = m - 1$ an, so ergibt sich

$$\begin{aligned} T_{2m}(x) &= 2T_m(x)T_m(x) - 1 \quad , \\ T_{2m-1}(x) &= 2T_m(x)T_{m-1}(x) - T_1(x) \quad . \end{aligned} \quad (2.53)$$

Dieser Zusammenhang zeigt, daß die explizite Kenntnis einer gewissen Anzahl von Chebyshev-Polynomen genutzt werden kann, um durch Anwendung der Rekursionsbeziehung (2.53) eine doppelt so große Anzahl zu erhalten. Ausgehend von (B.9) und (2.48) erhält man für die Entwicklungskoeffizienten

$$\begin{aligned} \mu_m &= \int_{-1}^1 \rho_i(x) T_m(x) dx = \int_{-1}^1 \sum_{n=1}^N \langle i | \delta(x - x_n) | n \rangle \langle n | T_m(x) | i \rangle dx = \\ &= \sum_{n=1}^N \langle i | n \rangle \langle n | T_m(x_n) | i \rangle = \sum_{n=1}^N \langle i | n \rangle \langle n | T_m(\hat{\mathfrak{X}}) | i \rangle = \langle i | T_m(\hat{\mathfrak{X}}) | i \rangle \quad , \end{aligned} \quad (2.54)$$

wobei im vorletzten Schritt benutzt wurde, daß $\hat{\mathcal{X}}$ hermitesch ist und für die Eigenzustände $|n\rangle$ die Eigenwertgleichung $\hat{\mathcal{X}}|n\rangle = x_n|n\rangle$ gilt. Aufgrund von (2.53) genügt es, zur Berechnung von

$$\begin{aligned}\mu_{2m} &= \sum_{i=1}^N 2\langle i|T_m(\hat{\mathcal{X}})T_m(\hat{\mathcal{X}})|i\rangle - \langle i|T_0|i\rangle \quad , \\ \mu_{2m-1} &= \sum_{i=1}^N (2\langle i|T_m(\hat{\mathcal{X}})T_{m-1}(\hat{\mathcal{X}})|i\rangle - \langle i|T_1(\hat{\mathcal{X}})|i\rangle)\end{aligned}\tag{2.55}$$

Skalarprodukte der Vektoren $T_m(\hat{\mathcal{X}})|i\rangle$ und $T_{m-1}(\hat{\mathcal{X}})|i\rangle$ zu bilden. Diese lassen sich aufgrund von (B.2) ausschließlich durch Matrix-Vektor-Multiplikationen (MVM) des skalierten Hamiltonoperators $\hat{\mathcal{X}}$ mit einem bereits bekannten Vektor berechnen, woher sich der Name Momentenverfahren ableitet. Der Startvektor $|i\rangle$ zur Berechnung der lokalen Zustandsdichte ρ_i ist überall gleich null außer am Gitterplatz \mathbf{r}_i , wo er den Wert 1 besitzt. Die nötigen MVM können wegen der dünnen Besetzung von $\hat{\mathcal{X}}$ sehr effektiv implementiert werden. Da sich $T_{m+1}(\hat{\mathcal{X}})|i\rangle$ direkt aus (B.2) berechnen läßt, falls $T_m(\hat{\mathcal{X}})|i\rangle$ und $T_{m-1}(\hat{\mathcal{X}})|i\rangle$ bekannt sind, müssen zusätzlich zu den Elementen von $\hat{\mathcal{X}}$ gleichzeitig immer nur drei Vektoren abgespeichert werden, wodurch die Berechnung großer Systeme (100^3 oder mehr) möglich ist. Eine ähnliche Drei-Term-Rekursionsbeziehung ist auch aus dem Lanczos-Algorithmus bekannt. Im Gegensatz zu diesem haben die Chebyshev-Polynome den Vorteil sehr guter numerischer Stabilität, was prinzipiell „beliebig“ hohe Momentenzahlen ermöglicht [53]. Eine Zusammenfassung der Vorgehensweise zur Berechnung der Chebyshev-Momente läßt sich aus Algorithmus (2.3.1) entnehmen. Mit den so berechneten Chebyshev-Momenten läßt sich nun nach (B.15) und (2.43) die Polynomkern-Approximation an die lokale Zustandsdichte berechnen. Die hierbei nötige Kosinus-Transformation kann sehr effizient mit Standardroutinen wie *dfftpack*⁸ durchgeführt werden.

2.3.4 Verteilungsfunktion und Verteilungsdichte

Wegen der Größe der Systeme ($\hat{H} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mit $N = 10^5, \dots, 10^6$) kann man die LDOS aus Rechenzeitgründen nicht für alle Gitterplätze des Kristalls berechnen, wie dies im Beispiel (2.49) möglich war. Vielmehr beschränkt man sich darauf dies für eine gewisse Anzahl zufällig ausgewählter Plätze durchzuführen. Einen akzeptablen Kompromiß zwischen Rechenzeit und Beseitigung der statistischen Fluktuationen bietet die Verwendung von 32 Realisierungen der Unordnung (im Weiteren Cluster-Iterationen) bei der jeweils 32 zufällige Gitterplätze ausgewählt werden (Site-Iterationen). Für die Auswertung der statistischen Daten sind zweierlei Punkte zu beachten.

- Für eine feste Clusterrealisierung sind die Positionen der δ -Peaks immer an der gleichen Stelle, da der zugrundeliegenden Hamiltonoperator unverändert bleibt. Allerdings ändern sich die Amplituden der Wellenfunktionen lokal von Platz zu Platz (vgl. Abbildung 2.10).

⁸erhältlich via <http://www.netlib.org>

Initialisiere: $ \psi_{\text{alt}}\rangle := i\rangle$; $ \psi_{\text{akt}}\rangle := \hat{\mathcal{X}} i\rangle$	
Berechne die ersten drei Momente: $\mu_0 = \langle \psi_{\text{alt}} \psi_{\text{alt}} \rangle$; $\mu_1 = \langle \psi_{\text{alt}} \psi_{\text{akt}} \rangle$; $\mu_2 = 2\langle \psi_{\text{akt}} \psi_{\text{akt}} \rangle - \mu_0$	
Für $k = 2, \dots, \frac{M}{2}$	
	$ \psi_{\text{neu}}\rangle = 2\hat{\mathcal{X}} \psi_{\text{akt}}\rangle - \psi_{\text{alt}}\rangle$
	$\mu_{2k-1} = 2\langle \psi_{\text{neu}} \psi_{\text{akt}} \rangle - \mu_1$
	$\mu_{2k} = 2\langle \psi_{\text{neu}} \psi_{\text{neu}} \rangle - \mu_0$
Kopiere um: $ \psi_{\text{alt}}\rangle := \psi_{\text{akt}}\rangle$; $ \psi_{\text{akt}}\rangle := \psi_{\text{neu}}\rangle$	

Algorithmus 2.3.1: Berechnung der Koeffizienten μ_m für die Chebyshev-Entwicklung (B.8) der lokalen Zustandsdichte ρ_i am Platz \mathbf{r}_i . Hierbei ist die Normierung des Startvektors $\langle i|i\rangle = 1$ zu beachten.

- Zum anderen verändern sich für verschiedene Clusteriterationen auch die Positionen der δ -Peaks, da eine Modifikation der Realisierung der Unordnung auch zu einer Verschiebung der Eigenwerte von \hat{H} führt.

Will man die Verteilungsdichte $p(y)$ der lokalen Zustandsdichte berechnen, so ist eine Histogramm-Erstellung in E - und $|\psi_n(\mathbf{r}_i)|^2$ -Richtung nötig, wofür eine jeweils geeignete Intervallbreite zu wählen ist. In E -Richtung sollte diese einerseits nicht zu schmal sein, um über die Verschiebung der Eigenwerte für verschiedene Clusterrealisierungen zu mitteln. Andererseits verschmiert eine zu große Breite der Intervalle die charakteristischen Eigenschaften der Zustände. Dies wirkt sich besonders im Bereich der Mobilitätskante negativ auf die Auflösung aus. Als numerisch günstiger Wert hat sich $\Delta E = 0.05t_0$ erwiesen. Nach der Histogrammerstellung in E -Richtung bleibt noch die Richtung der Amplituden $|\psi_n(\mathbf{r}_i)|^2$. Diese läßt sich anhand von Beispiel (2.49) sowie der Abbildungen 2.10 und 2.11 veranschaulichen. Für eine äquidistante Teilung des Intervalls in dem die Ereignisse liegen in K Teilintervalle der Breite $\Delta y_k \equiv \Delta y$ ist die Histogramm-Erstellung trivial. Die Verteilungsdichte $p(y)$ ergibt sich aus der Anzahl der Ereignisse h_k , die in das Intervall k fallen, und der Normierung

$$\int_{y_0}^{y_n} p(y) dy = \sum_{k=1}^K p_k \Delta y_k = \Delta y \sum_{k=1}^K p_k \stackrel{!}{=} 1 \quad . \quad (2.56)$$

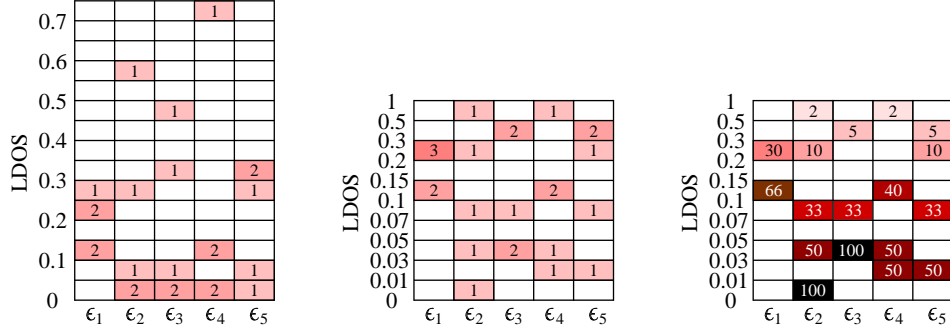


Abbildung 2.11: Schematische Darstellung der Histogrammerstellung für die Verteilungsdichte der Gewichte der δ -Peaks $|\psi_n(\mathbf{r}_i)|^2$ für die Energien ϵ_n des Beispiels (2.49). Vergleich von Intervallaufteilung mit gleichmäßiger Breite (links) sowie variabler Breite (Mitte), wodurch im Bereich kleiner $|\psi_n(\mathbf{r}_i)|^2$ eine höhere Auflösung erreicht wird. Die angegebenen Zahlen beziehen sich hierbei auf die Anzahl der Ereignisse im jeweiligen Intervall. Rechts: Reskalierte Verteilungsdichte, die als Höhe der Balken für die verschiedenen breiten Intervalle interpretiert werden kann.

Mit der Gesamtzahl aller Ereignisse h_{ges} erhält man für die Höhe des Balkens, der das Intervall k repräsentiert, den Wert $p_k = \frac{h_k}{h_{\text{ges}}\Delta y}$, bzw. für die gesamte Verteilungsdichte

$$p^{(u)}(y) = \sum_{k=1}^K \frac{h_k}{h_{\text{ges}}\Delta y} \left(\theta(y - y_{k-1}) - \theta(y - y_k) \right) . \quad (2.57)$$

Auch im Fall ungleichmäßiger Teilung kann man direkt aus der Anzahl der Ereignisse innerhalb eines Intervalls eine Verteilungsdichte gemäß

$$p^{(\delta)}(y) = \sum_{k=1}^K \frac{h_k}{h_{\text{ges}}} \delta \left(y - \frac{y_k + y_{k-1}}{2} \right) \quad (2.58)$$

konstruieren, was lediglich der Bündelung einiger δ -Peaks entspricht. Da in diesem Fall die Information außer durch die Gewichtskoeffizienten auch durch die unterschiedlichen Abstände der δ -Peaks wiedergegeben wird, ist diese Darstellung für das Auge schwer zu interpretieren. Für eine bessere Darstellung bietet sich eine Renormierung auf die jeweilige Intervallbreite an (vgl. Abb. 2.12). Zur Skalierung der Anzahl der Ereignisse im Intervall k muß neben dem Anteil von h_k an der Gesamtzahl der Ereignisse auch der Anteil von Δy am Gesamtintervall $y_K - y_0$ berücksichtigt werden. Dies liefert für die renormierte Verteilungsdichte bei variabler Intervallbreite:

$$p^{(v)}(y) = \sum_{k=1}^K \frac{h_k(y_k - y_{k-1})}{h_{\text{ges}}(y_K - y_0)} \left(\theta(y - y_{k-1}) - \theta(y - y_k) \right) . \quad (2.59)$$

Während die Koeffizienten $|\psi_n(\mathbf{r}_i)|^2$ in (2.48) das Gewicht von δ -Peaks beschreiben, treten bei Verwendung der KPM durch die endliche Breite $\Delta\phi$ des Jackson-Kerns modifizierter Wert auf. Aufgrund von $\phi_{\text{max}} \cdot \Delta\phi \approx |\psi_n(\mathbf{r}_i)|^2$ sind die dem Histogramm zugrundeliegenden Werte nicht mehr auf das Intervall $[0, 1]$ beschränkt.

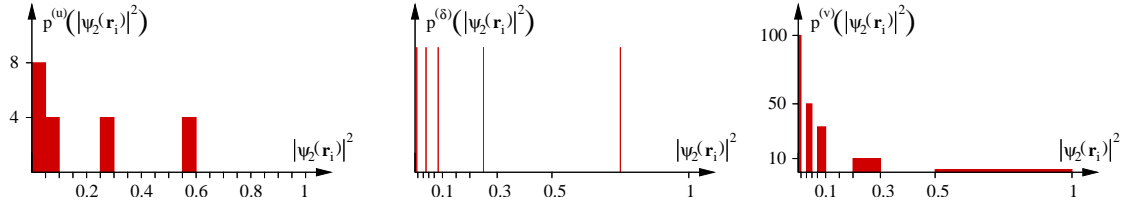


Abbildung 2.12: Schematische Darstellung der die Verteilungsdichten $p^{(u)}$, $p^{(\delta)}$ und $p^{(v)}$ nach (2.57), (2.58) und (2.59) anhand der Amplituden $|\psi_2(\mathbf{r}_i)|^2$ aus Beispiel (2.49). Alle Verteilungsdichten sind auf $\int p(y) dy = 1$ normiert. Die δ -Peaks in der mittleren Skizze haben jeweils ein Gewicht von 0.2. Für die Erstellung von $p^{(v)}$ werden Ereignisse, die in ein relativ breites Intervall fallen so behandelt, als ob dieses aus vielen schmalen Teilintervallen aufgebaut wäre, über die das Ereignis dann gemittelt wird.

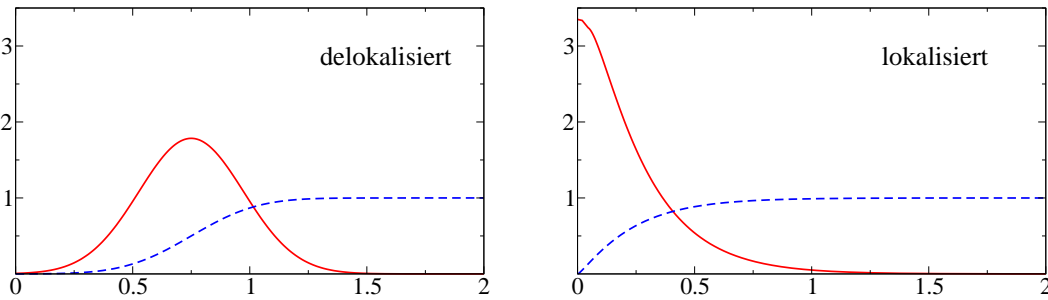


Abbildung 2.13: Schematische Darstellung der Verteilungsdichte $p(y_i(\epsilon_n))$ (—) und der Verteilungsfunktion $\mathcal{P}(y_i(\epsilon_n))$ (---) der KPM-Approximation $y_i(\epsilon_n)$ der lokalen Zustandsdichte $\rho_i(\epsilon_n)$ an verschiedenen Gitterplätzen i für einen ausgedehnten Zustand $|n_1\rangle$ (links) und einen lokalisierten Zustand $|n_2\rangle$ (rechts).

Im Limes vieler Mittelungen, liegen die Formen der Verteilungsdichten zwischen zwei Grenzfällen, die sich in den Histogrammen von ϵ_1 und ϵ_2 bereits abzeichnen. Während die Verteilung für ϵ_1 um einen endlichen Wert zentriert und relativ schmal ist (delokalisierte Zustand), sind die Werte im Fall von ϵ_2 über einen weiten Bereich verteilt und häufen sich bei kleinen Werten von y (lokalisierte Zustand). Abbildung 2.13 zeigt die charakteristischen Formen von $p(y)$ – Normalverteilung im delokalisierten Fall und logarithmische Normalverteilung im lokalisierten Fall – für ein großes, jedoch endliches Ensemble. Bildet man das Integral über die Verteilungsdichte, so erhält man die Verteilungsfunktion

$$\mathcal{P}(y) := \int_{-\infty}^y p(\tilde{y}) d\tilde{y} \equiv \int_0^y p(\tilde{y}) d\tilde{y} \quad , \quad (2.60)$$

wobei die Gleichheit aufgrund der Positivität von y gilt. Der Vorteil der Verwendung integraler Größen bei Betrachtung statistischer Systeme liegt in der Glättungseigenschaft, die den Einfluß einzelner isoliert liegender Ereignisse dämpft.

2.3.5 Charakteristische Größen der Verteilung

Will man aus der gesamten Information, die man durch die Berechnung der Verteilungsdichte erhalten hat, durch Extraktion einer einzelnen Größe auf die charakteristischen Eigenschaften des Systems schließen, so stellt sich zunächst die Frage, ob dies prinzipiell möglich ist. Solange die betrachtete Größe selbstmittelnd ist, liefert eine Mittelung über verschiedene Konfigurationen einen physikalisch sinnvollen Wert. Dies ist dann nicht möglich, falls dieser Mittelwert von der Anzahl der Konfigurationen abhängt, über welche die Mittelung erfolgt (nicht selbstmittelnde Größen). Zur Veranschaulichung des Unterschiedes dieser beiden Arten von Mittelungseigenschaften ist ein einfaches Beispiel [28] hilfreich. Bei einer Umfrage wird sowohl nach dem Einkommen, wie auch nach der Anzahl der Kinder gefragt. Während die mittlere Kinderzahl unabhängig davon ist, wieviele Personen befragt werden, und sich mit zunehmendem Stichprobenumfang lediglich die Schwankung um den Mittelwert reduziert, verhält es sich beim Durchschnittseinkommen anders. Da relativ unwahrscheinliche Ereignisse (Millionäre) einen großen Einfluß auf den Mittelwert haben, wird der aus einem kleinen Ensemble errechnete Mittelwert zu klein sein, da aufgrund des geringen Stichprobenumfangs mit hoher Wahrscheinlichkeit keine Millionäre vertreten sind. Diese Abhängigkeit von wenigen, in der Verteilungsdichte weit vom Mittelwert entfernten Ereignissen ist typisch für nicht selbstmittelnde Größen. Für solche Verteilungen stellt der arithmetische Mittelwert kein signifikantes Charakteristikum dar, und es ist nötig, die gesamte Verteilungsdichte oder äquivalent dazu alle ihre Momente zu betrachten. Angesichts dieser Tatsache stellt sich die Frage, ob es trotzdem eine charakteristische Größe gibt, anhand derer man ein Lokalisierungskriterium ableiten kann. Hierzu ist es sinnvoll, nicht nach einem mittleren, sondern nach einem für die Verteilung typischen Wert zu suchen. Ein in der Literatur [63] häufig verwendetes Maß ist der sogenannte Median (Zentralwert), der durch

$$P(y_{\text{med}}) = \int_0^{y_{\text{med}}} p(\tilde{y}) d\tilde{y} = \frac{1}{2} \quad (2.61)$$

definiert ist. Durch die Integration spiegelt diese Größe gut die Eigenschaften der gesamten Verteilungsdichte wieder, ist jedoch aufwendig zu berechnen. Ein anderer Ansatzpunkt, die Form der Verteilung durch einen einzelnen Parameter beschreiben zu können, ergibt sich daraus, daß der arithmetische und geometrische Mittelwert im Fall einer Normalverteilung nahezu identisch sind, während sie für logarithmische Normalverteilungen, wesentlich voneinander abweichen. Dies legt die Betrachtung von

$$\rho_{\text{ty}}(E) := \exp\left(\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \ln(\rho_k(E))\right) \quad , \quad (2.62)$$

$$\rho_{\text{av}}(E) := \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \rho_k(E) \quad (2.63)$$

nahe, wobei der Index k sowohl für verschiedene Gitterplätze innerhalb des Kristalls als auch für verschiedene Unordnungsrealisierungen steht. Für den Fall, daß der arith-

	ϵ_1	ϵ_2	ϵ_3	ϵ_4	ϵ_5
ρ_{ty}	0.192	0.074	0.126	0.088	0.142
$\frac{\rho_{\text{ty}}}{\rho_{\text{av}}}$	0.961	0.370	0.629	0.442	0.712

Tabelle 2.2: Werte der typischen Zustandsdichte ρ_{ty} sowie deren Verhältnis zur mittleren Zustandsdichte ρ_{av} anhand von Beispiel (2.49).

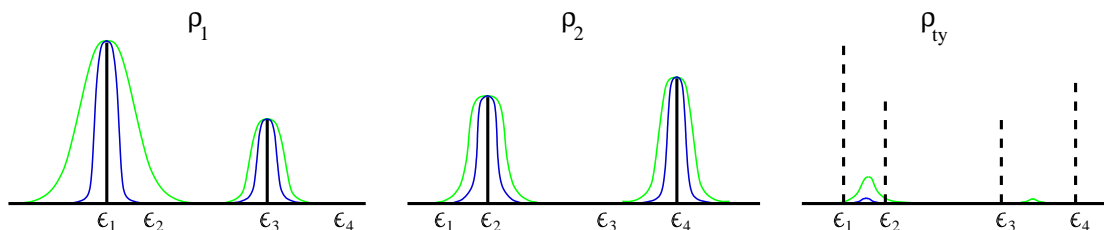


Abbildung 2.14: Schematische Darstellung des Einflusses, den eine unterschiedliche Breite des Jackson-Kerns auf die berechnete typische Zustandsdichte hat. Während für den schmalen Kern (—) die typische Zustandsdichte beinahe überall verschwindet, ist sie für den breiten Kern (—) noch auf einem größeren Bereich endlich.

metische Mittelwert ρ_{av} mit dem geometrischen Mittelwert ρ_{ty} in etwa übereinstimmt, klassifiziert man die Zustände als ausgedehnt. Im Fall lokalisierter Zustände, wo die Verteilung der ρ_i zu kleineren Werten verschoben ist, erwartet man ein Verschwinden des als typische Zustandsdichte bezeichneten geometrischen Mittelwertes ρ_{ty} [15, 27]. $\rho_{\text{av}}(E)$ ist als Approximation der Zustandsdichte $\rho(E)$ aus (2.46) zu interpretieren, die man im Grenzfall der Mittelung über alle Gitterplätze des Kristalls erhält. Aus dem Verhältnis $\frac{\rho_{\text{ty}}}{\rho_{\text{av}}}$ kann man zwischen lokalisierten und ausgedehnten Zuständen unterscheiden. Während das Verhältnis für ausgedehnte Zustände etwa gleich eins ist, verschwindet es im lokalisierten Fall. Angewandt auf Beispiel (2.49) liefert dies die in Tabelle 2.2 angegebenen Werte. Die Tatsache, daß der Wert von $\frac{\rho_{\text{ty}}}{\rho_{\text{av}}}$ selbst für die im Beispiel als lokalisiert identifizierten Zustände (z. B. $|\psi_2\rangle$) relativ hoch ist, liegt an der kleinen Systemgröße. Im Gegensatz zu (2.49), wo die lokalen Zustandsdichten exakt berechnet wurden, ergibt sich bei der Verwendung der KPM ein weiterer Effekt. Da die Breite der Integralkerne von der verwendeten Momentenzahl abhängt, fällt die typische Zustandsdichte mit zunehmender Momentenzahl ab, während dies auf ausgedehnte Zustände keinen Einfluß hat. Durch die endliche Breite der Approximation der δ -Peaks erhalten benachbarte Peaks, deren geometrisches Mittel verschwinden sollte, einen endlichen Überlapp (vgl. Abb. 2.14). Es tritt erst dann in eine Sättigung ein, wenn die Breite der δ -Peaks kleiner als der Abstand der Energieniveaus wird. Im Gegensatz dazu spielt die Breite der δ -Peaks auf die mittlere Zustandsdichte keine Rolle, da hier kein multiplikativer Dämpfungseffekt wie bei der typischen Zustandsdichte auftritt, bei der schon eine Realisierung im Ensemble mit einem Wert null ausreicht, um ρ_{ty} an dieser Stelle zum Verschwinden zu bringen.

Aus technischen Gründen bietet es sich an, bei der Momentenberechnung für $\rho_{\text{av}}(E)$ keinen auf einen Platz lokalisierten Startvektor sondern einen normierten, ausgedehnten

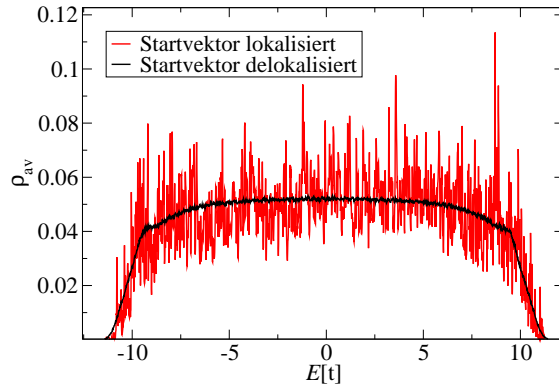


Abbildung 2.15: Vergleich der mittleren Zustandsdichte $\rho_{\text{av}}(E)$ bei Berechnung der Chebyshev-Momente mittels lokalisiertem und delokalisiertem Startvektor am Beispiel des 3D-Anderson-Modells auf einem 50^3 -Gitter mit Unordnung $W = 16$ unter Verwendung von 4096 Chebyshev-Momenten und Mittelung über $32 * 32$ Realisierungen.

ten Zufallsvektor zu verwenden. Diese zusätzliche Mittelung innerhalb jeder Berechnung erniedrigt die Anzahl von Realisierungen, die für eine gute Approximation an $\rho(E)$ nötig sind (vgl. Abb. 2.15). Desweiteren ist es für die Berechnung von $\rho_{\text{av}}(E)$ nur beschränkt sinnvoll, eine große Zahl Chebyshev-Momente zu verwenden. Während eine hohe Auflösung bei der Berechnung der lokalen Zustandsdichte wesentlich ist, wirkt sich eine schlechtere Auflösung im Fall der mittleren Zustandsdichte eher positiv im Sinne einer Glättung aus (vgl. Abb. 2.16). Im Fall des Perkolationsmodells zeigt sich, daß für die Berechnung von ρ_{av} trotzdem eine hohe Auflösung nötig ist, da hier charakteristische Strukturen sonst nicht aufgelöst werden. Für das Anderson-Modell hingegen hat sich die Verwendung einer geringeren Zahl von Momenten als günstig erwiesen. Wegen der Linearität der Fourier-Transformation kann man bei der Berechnung von ρ_{av} Rechenzeit

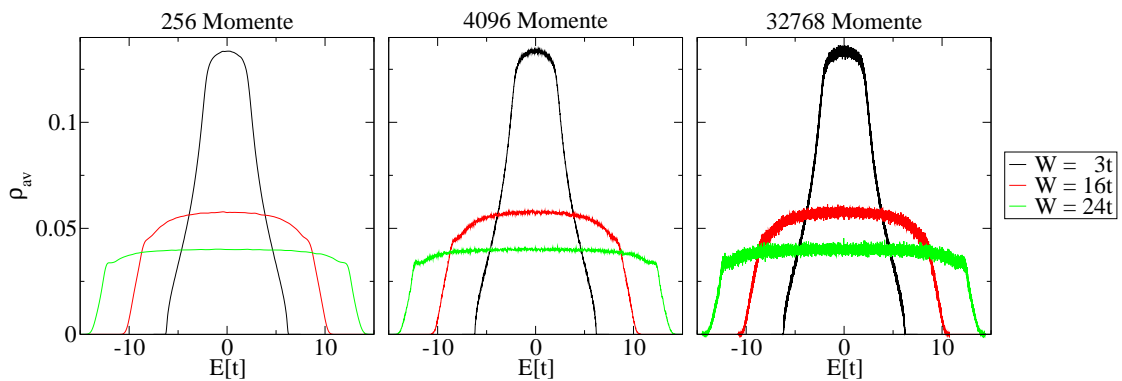


Abbildung 2.16: Vergleich des Einflusses der Anzahl der Chebyshev-Momente M auf die Berechnung der mittleren Zustandsdichte $\rho_{\text{av}}(E)$ am Beispiel des Anderson-Modells auf einem 50^3 -Gitter für kleine, knapp unterkritische und große Unordnung $W[t] = 3, 16, 24$ für eine Mittelung über $32 * 32$ Realisierungen.

sparen, indem man nicht die lokalen Zustandsdichten mittelt, sondern die berechneten Chebyshev-Momente. Dadurch erübrigen sich $K-1$ Fourier-Transformationen. Allerdings ist der Zeitgewinn hier nur marginal, da die Dauer der Fourier-Transformation gegenüber dem Zeitaufwand für die Momentenberechnung vernachlässigbar ist. Lediglich bei Verwendung der MEM (siehe Kapitel 2.3.6) ist diese Zeitersparnis merklich.

2.3.6 Maximum-Entropie-Methode

Die in Anwendungsbereichen wie der Bildverarbeitung sehr erfolgreich eingesetzte Maximum-Entropie-Methode (MEM) hat sich für die Zwecke dieser Arbeit nicht als günstig erwiesen. Aufbauend auf der durch die KPM gefundenen Näherung $\tilde{f}(\phi)$ der betrachteten Funktion $\tilde{f}(\phi)$ definiert man durch

$$S = \int_0^\pi \tilde{\mathfrak{F}}(\phi) - \tilde{f}(\phi) - \tilde{\mathfrak{F}}(\phi) \ln \left[\frac{\tilde{\mathfrak{F}}(\phi)}{\tilde{f}(\phi)} \right] d\phi \quad (2.64)$$

eine informationstheoretische Entropie, wobei $\tilde{\mathfrak{F}}(\phi)$ die neu zu berechnende MEM-Approximation an $\tilde{f}(\phi)$ ist. Man variiert nun das Funktional $S[\tilde{\mathfrak{F}}(\phi)]$ um eine Maximierung von S unter der Nebenbedingung

$$\chi^2 = \sum_{m=0}^M \left(\frac{\hat{\mu}_m - \mu_m}{\sigma_m} \right)^2 \quad (2.65)$$

zu erhalten, wobei mit μ_m bzw. $\hat{\mu}_m$ die Chebyshev-Momente von $\tilde{f}(\phi)$ bzw. $\tilde{\mathfrak{F}}(\phi)$ bezeichnet werden, und σ_m ein Maß für die angestrebte Genauigkeit der Approximation ist. Faktisch entspricht diese Vorgehensweise dem Auffinden einer Approximation deren Anzahl verwendeter Momente um einen gewählten Faktor (etwa 2, ..., 16) größer ist als für die einfache KPM. Weitere Einzelheiten finden sich in [5, 53]. Die Schwierigkeit des Algorithmus besteht darin, daß das Optimierungsverfahren nichtlinear ist, und daß es im Verlauf des Algorithmus nötig ist, eine vollbesetztes Gleichungssystem der Dimension $M \times M$ zu lösen. Dies ist für die in der Literatur [53] verwendeten Momentenzahlen ($M \leq 1024$) mit vernünftigem Rechenaufwand möglich. Im Fall der Berechnung der lokalen Zustandsdichte sind selbst bei Verwendung des höchsten hier sinnvollen Vervielfältigungsfaktors von 4 für die gewünschte Auflösung Momentenzahlen nötig, die über diesem Wert liegen. Es zeigt sich, daß sowohl vom Standpunkt der Laufzeit, wie auch der Genauigkeit der Approximation durch die Verwendung der MEM kein Vorteil gegenüber der KPM mit der entsprechend größeren Zahl an Chebyshev-Momenten erzielt wird (vgl. Tabelle 2.3 und Abbildung 2.17). Auch kommt es bei großen Momentenzahlen und Vervielfältigungsfaktoren (etwa jenseits von $8 * 2048M$) vor, daß der Algorithmus innerhalb üblicher Toleranzgrenzen ($\chi^2 = 10^{-6}$) nicht mehr konvergiert. Im Gegensatz dazu bereitet die Berechnung einer großen Zahl von Chebyshev-Momenten keinerlei numerische Probleme. Daher wird im weiteren auf die Verwendung der MEM verzichtet und die Approximationen ausschließlich mittels KPM berechnet.

	M							
	256	512	1024	2048	4096	8192	16384	32768
KPM	5	10	20	39	77	153	304	610
MEM	7	23	110	750	6838	44637	-	-

Tabelle 2.3: Vergleich des Zeitbedarfs für die Berechnung der lokalen Zustandsdichte mittels KPM und MEM für verschiedene Anzahlen von Chebyshev-Momenten M . Die in Sekunden angegebenen Zeiten beziehen sich auf eine LDOS-Berechnung an einem Gitterplatz eines 50^3 -Gitters für das Anderson-Modell bei mittlerer Unordnung ($W = 12t$) auf einem AMD-Athlon mit 1466 MHz Taktfrequenz.

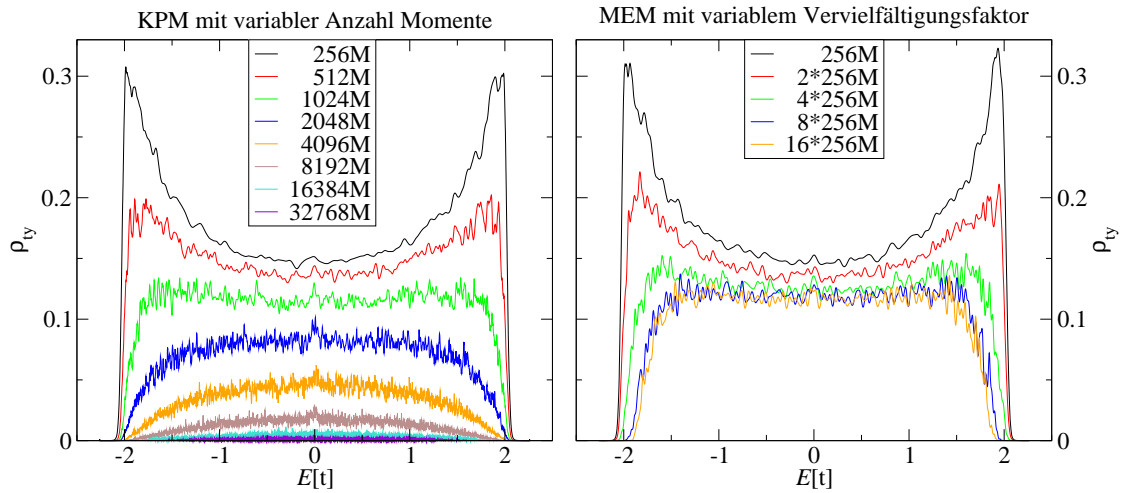


Abbildung 2.17: Vergleich des erreichbaren Auflösungsvermögens durch immer höhere Vervielfältigungsfaktoren bei Verwendung der MEM (rechts) mit den Ergebnissen der KPM (links) anhand der typischen Zustandsdichte ρ_{ty} für das eindimensionale Anderson-Modell mit Unordnung $W = 0.5t$ für ein System mit 10000 Plätzen. Die gezeigten Kurven wurden durch Mittelung über je 32 zufällig ausgewählte Plätze bei 32 Realisierungen der Unordnung berechnet.

3 Anderson-Modell

Um den Effekt von Unordnung auf die Eigenschaften der elektronischen Wellenfunktionen eines Kristall zu untersuchen, wurde 1958 das Anderson-Modell [3] entwickelt. Ausgehend vom Hamiltonoperator des Tight-binding-Modells (2.3) gelangt man zu diesem, indem man die lokalen Potentiale aus einer Zufallsverteilung $p(w_j)$ wählt. Die Hüpfmatrixelemente zu den nächsten Nachbarn werden als räumlich isotrop und gleich dem festen Wert t angenommen, der die Energieskala des Systems festlegt. Dadurch ergibt sich der Hamiltonoperator des Anderson-Modells

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N w_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j + t \sum_{\langle jk \rangle} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_j \quad , \quad (3.1)$$

wobei $N = L^d$ die Anzahl der Gitterplätze bezeichnet und sich die Summe $\langle jk \rangle$ über alle nächsten Nachbarn erstreckt. Die von Anderson betrachtete Kastenverteilung der Platzenergien

$$p(w_j) = \frac{1}{W} \theta \left(\frac{W}{2} - |w_j| \right) \quad , \quad (3.2)$$

wobei das Verhältnis $\frac{W}{t}$ die Stärke der Unordnung festlegt, ist die in der Literatur meistdiskutierte Variante, obwohl auch Gauss- oder Lorentz-Verteilungen behandelt werden. Im Gegensatz zur Breite spielt die Form der Verteilung der Platzenergien für das Lokalisierungsverhalten qualitativ keine Rolle [31]. Daher beschränkt sich die weitere Diskussion auf die Kastenverteilung (3.2), die dem Modell einer Legierung mit „unendlich“ vielen Komponenten entspricht. Durch die Wahl der Platzenergien aus dem Intervall $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$ ist das Spektrum der Andersonmatrix aufgrund des Theorems von Gerschgorin [21, 50] auf $|E| \leq \frac{W}{2} + 2dt$ beschränkt. Während in ein und zwei Dimensionen alle Zustände des Bandes lokalisiert sind, trennen im dreidimensionalen Fall bei schwacher Unordnung die Mobilitätskanten lokalisierte Zustände nahe der Bandkanten von den ausgedehnten Zuständen im Bandzentrum. Mit wachsender Unordnung verkleinert sich der Bereich ausgedehnter Zustände, bis oberhalb der kritischen Unordnung $W_c \approx 16.5t$ das gesamte Band lokalisiert ist. Dieser unordnungsinduzierte Metall-Isolator-Übergang wird als Anderson-Übergang bezeichnet. Unter Verwendung der in Kapitel 2 beschriebenen Methoden sollen die Literaturwerte der kritischen Unordnung, die meist mittels Finite-size-scaling und Transfermatrixmethoden bestimmt wurden, verifiziert werden. Anhand dieser soll überprüft werden, ob das Verschwinden der typischen Zustandsdichte ein geeignetes Kriterium für Lokalisierung darstellt.

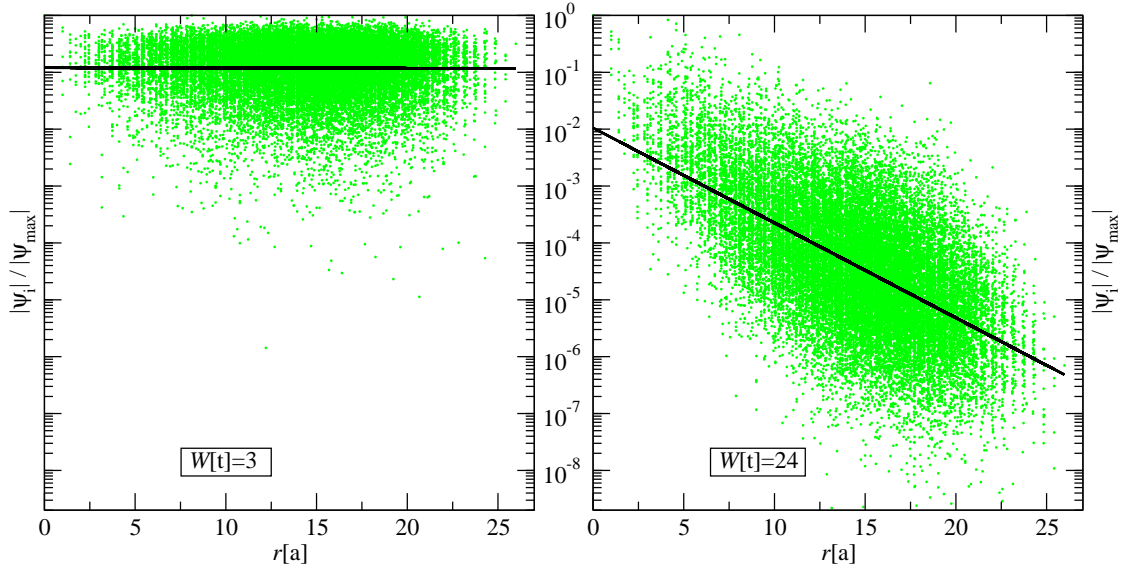


Abbildung 3.1: Vergleich des Abfallverhaltens der normierten Wellenfunktion ϕ_i aus (2.5) für das dreidimensionale Anderson-Modell auf einem 30^3 -Gitter mit periodischen Randbedingungen als Funktion des Abstandes r vom Gitterplatz mit maximaler Amplitude für zwei verschiedene Unordnungen. Links: Delokalisierte Wellenfunktion für $W = 3t$ Rechts: Lokalisierte Wellenfunktion für $W = 24t$. Die Regressionsgeraden (—) ist das Ergebnis der Anpassung der freien Parameter λ und c in (3.3) zur Minimierung der Fehlerquadrate.

3.1 Lokalisierungslänge

Die in Kapitel 2.1.1 beschriebene Prozedur zur Bestimmung der Lokalisierungslänge λ aus dem mittleren Abfallverhalten der normierten Wellenfunktion $\phi_i = \frac{|\psi_i|}{\psi_{\max}}$ bietet eine direkte, wenngleich numerisch aufwendige Möglichkeit, eine Aussage über die Lokalisierung von Zuständen zu treffen. In der Praxis hat sich die Methode der Schalenmittelung [35] als nicht so günstig erwiesen wie die Regression über die gesamte Datenwolke. In Abbildung 3.1 sind exemplarisch für je eine Realisierung schwacher und starker Unordnung der Amplitudenbetrag als Funktion des Abstandes und die zugehörige Ausgleichsgerade durch alle Datenpunkte gezeigt. Für den Fall schwacher Unordnung sind die Amplitudenbeträge im wesentlichen von der Position im Kristall unabhängig, was der Erwartung einer ausgedehnten Wellenfunktion entspricht. Im Gegensatz dazu erkennt man bei starker Unordnung eine Lokalisierung der Wellenfunktion um den Platz mit maximaler Amplitude verbunden mit einem exponentiellen Abfall von ϕ als Funktion des Abstandes r . Die Lokalisierungslänge λ läßt sich bestimmen, indem man in

$$\ln \phi = -\frac{r}{\lambda} + c \quad (3.3)$$

die freien Parameter λ und c so wählt, daß die Fehlerquadrate minimal werden. Einen für die Unordnungsstärke charakteristischen Wert erhält man durch Mittelung über verschiedene Realisierungen. Die auf diese Weise erhaltenen Lokalisierungslängen haben im

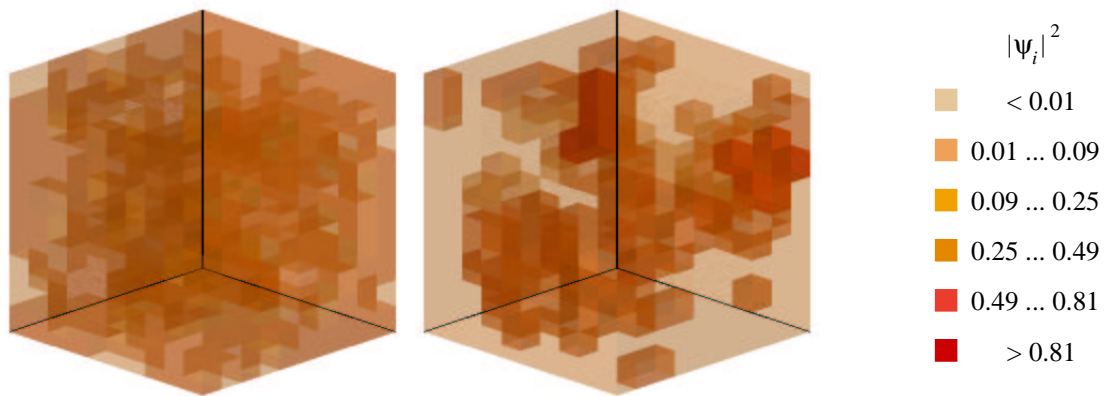


Abbildung 3.2: Vergleich des Amplitudenquadrats der Wellenfunktion $|\psi_i|^2$ für das dreidimensionale Andersonmodell. Links: schwache Unordnung ($W=3t$) genügt nicht um die Wellenfunktion zu lokalisieren. Rechts: Lokalisierung der nichtverschwindenden Amplituden der Wellenfunktion durch starke Unordnung ($W=18t$) auf nur wenige Gitterplätze.

lokalisierten Bereich einen endlichen Wert, wohingegen $\frac{1}{\lambda}$ für ausgedehnte Zustände gegen null geht. Die Abhängigkeit der Lokalisierungslänge von der Unordnungsstärke W ist in in Abbildung 3.16 (\blacktriangle) zu sehen. Während sich in den Grenzfällen starker, bzw. schwacher Unordnung ausgedehnte und lokalisierte Zustände eindeutig unterscheiden, ist eine genaue Unterscheidung im Übergangsbereich nahe $W \approx 16.5t$ nicht möglich.

Die direkte Berechnung der Wellenfunktionen durch exakte Diagonalisierung mittels *LAPACK*-Routinen ist aufgrund des hohen Speicherbedarfs lediglich bis zu Systemgrößen von 21^3 möglich. Durch Verwendung einer geeigneten Transformation (vgl. Anhang C) ist es möglich, die Bandbreite der Andersonmatrix so weit zu reduzieren, daß ihre Eigenwerte mittels einer Bandmatrixroutine aus *LAPACK* für Systeme bis 30^3 berechnet werden können. Die zugehörigen Eigenvektoren ergeben sich durch Anwendung eines iterativen Algorithmus unter Verwendung des konjugierten Residuums [50]. Während die Residuumsnorm $|(\hat{H} - \epsilon_j \mathbf{1})\psi_j|$ der direkt mit *LAPACK* berechneten Eigenvektoren von der Größenordnung der Maschinengenauigkeit $\epsilon \lesssim 10^{-15}$ ist, erreicht der iterative Algorithmus ungefähr 10^{-13} . Im Bereich der kritischen Unordnung muß man wegen der großen Lokalisierungslängen das iterative Verfahren anwenden, wohingegen im stark lokalisierten Bereich die Verwendung von *LAPACK* genügt.

Abbildung 3.2 zeigt eine typische Amplitudenverteilung innerhalb des Kristalls für jeweils schwache und starke Unordnung. Während im Fall schwacher Unordnung ($W = 3t$) die Wellenfunktion über den ganzen Kristall ausgebreitet ist, sind für $W = 18t$ nur wenige Plätze mit nichtverschwindender Amplitude vorhanden.

3.2 Inverse Partizipationszahl

Mittels der exakten Eigenfunktionen des Systems kann man einen weiteren Indikator für Lokalisierung, die inverse Partizipationszahl P^{-1} (vgl. Kapitel 2.1.2) betrachten. Um

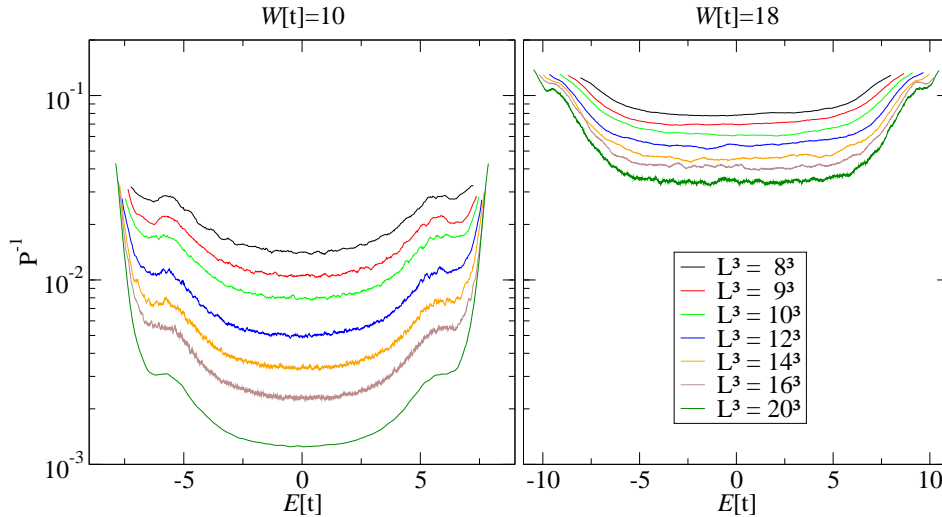


Abbildung 3.3: Abhängigkeit der inversen Partizipationszahl P^{-1} von der Systemgröße L beim dreidimensionalen Anderson-Modell für ausgedehnte Zustände (links) und lokalisierte Zustände (rechts). Die Werte sind das Ergebnis einer Mittelung über 100 Realisierungen. Zur Glättung vorhandener Fluktuationen wurde eine laufende Mittelung über je 100 benachbart liegende Eigenwerte durchgeführt.

ein numerisch zugängliches Maß zu finden, das von den Fluktuationen der Amplituden unabhängig ist, ist es sinnvoll, P^{-1} für verschiedene Systemgrößen zu betrachten und aus dem Skalenverhalten Rückschlüsse auf die Lokalisierungseigenschaften zu ziehen. Weiterhin ist eine Mittelungsprozedur nötig, um eine Unabhängigkeit von den jeweils betrachteten Realisierungen der Unordnung zu erreichen. Die vorhandene Verschiebung der Eigenwerte von einer Realisierung zur anderen kann auf zwei verschiedene Arten behandelt werden. Alternativ zu einer gewöhnlichen Histogrammerstellung [41] kann man über die entsprechenden Eigenwerte (z. B. den jeweils 7. Eigenwert aller Realisierungen) mitteln. Der Vorteil hierbei liegt in der gleichen Gewichtung aller Datenpunkte. Falls die Änderung der Eigenwerte von einer Realisierung zur anderen kleiner ist als der mittlere Abstand der Energieniveaus, sollte dies eine gute Näherung darstellen. Für die so zusammengefaßten Eigenwerte kann man eine über das Ensemble gemittelte inverse Partizipationszahl definieren, was in der Literatur meist durch Bildung des arithmetischen Mittelwertes [41, 65] geschieht. In Abbildung 3.3 sind die Ensemble-Mittelwerte von P^{-1} für lokalisierte und ausgedehnte Zustände bei Unordnungen $W[t] = 10, 18$ dargestellt. Man erkennt im ausgedehnten Fall deutlich die Abnahme von P^{-1} mit zunehmender Systemgröße, die einem Anstieg der Anzahl der beitragenden Plätze um mehr als eine Größenordnung entspricht, wenn das System von 8^3 auf 20^3 vergrößert wird. Zwar nimmt P^{-1} auch im lokalisierten Fall bei Vergrößerung des betrachteten Systems ab, allerdings ohne große Auswirkung auf die Anzahl der beteiligten Plätze. So steigt deren Zahl nicht im gleichen Maße an, wie die Gesamtzahl der im Kristall befindlichen Plätze.

Da die Fluktuationen der Werte für P^{-1} von einer Realisierung zur nächsten, insbesondere für große Werte der Unordnung, sehr groß werden (vgl. Abb. 3.4), stellt sich die

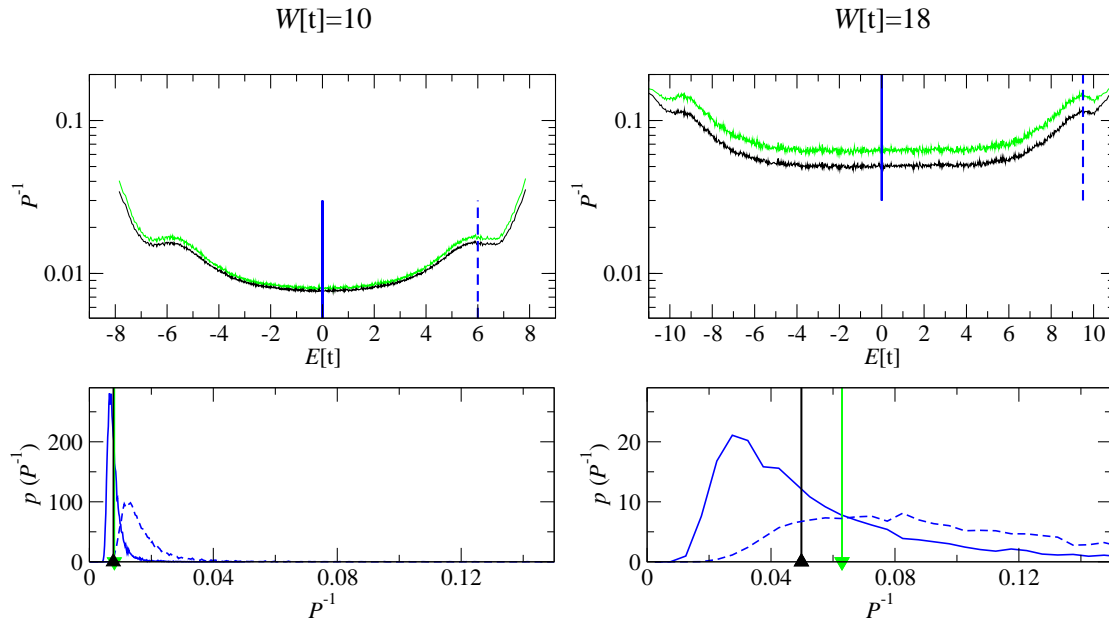


Abbildung 3.4: Oben: Vergleich des arithmetischen und geometrischen Mittelwertes der inversen Partizipationszahl P^{-1} für 1000 Mittelungen über ein System der Größe 10^3 für einen ausgedehnten Zustand (links) sowie einen lokalisierten Zustand (rechts). Für die durch senkrechte Linien markierten Energien sind im unteren Teil der Abbildung die gesamten Verteilungsdichten von P^{-1} dargestellt, wobei für $E = 0$ außerdem zum Vergleich der arithmetische (\blacktriangledown) und geometrische (\blacktriangle) Mittelwert angegeben sind.

Frage, ob der arithmetische Mittelwert überhaupt eine für die Verteilungsdichte $p(P^{-1})$ eine charakteristische Größe ist. Um eine vollständige Beschreibung des Verhaltens der inversen Partizipationszahl des Ensembles zu erhalten, müßte man korrekterweise die komplette Verteilungsdichte [18, 24, 67] oder, äquivalent dazu, alle ihre Momente diskutieren. Für große Unordnung weichen sowohl der arithmetische wie auch der geometrische Mittelwert stark vom wahrscheinlichsten Wert ab, wodurch diese zur Beschreibung der Verteilungsdichte ungeeignet sind. Allerdings spiegelt sich die globale Tendenz – Abnahme wie $\frac{1}{N}$ bzw. Konstanz – anhand derer es möglich ist, ausgedehnte von lokalisierten Zuständen zu unterscheiden in beiden wider. Betrachtet man für eine feste Systemgröße die inverse Partizipationszahl als Funktion der Unordnung W (vgl. Abb. 3.16), so liefert das asymptotische Verhalten von P^{-1} etwa $W_c \approx 16.5t$ als Wert der kritischen Unordnung.

3.3 Leitfähigkeit

Mittels der in Kapitel 2.1.3 diskutierten Kubo-Formel läßt sich die frequenzabhängige optische Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ für das Anderson-Modell berechnen. In Abbildung 3.5 ist diese für verschiedene Werte der Unordnung für ein System mit 15^3 Gitterplätzen unter

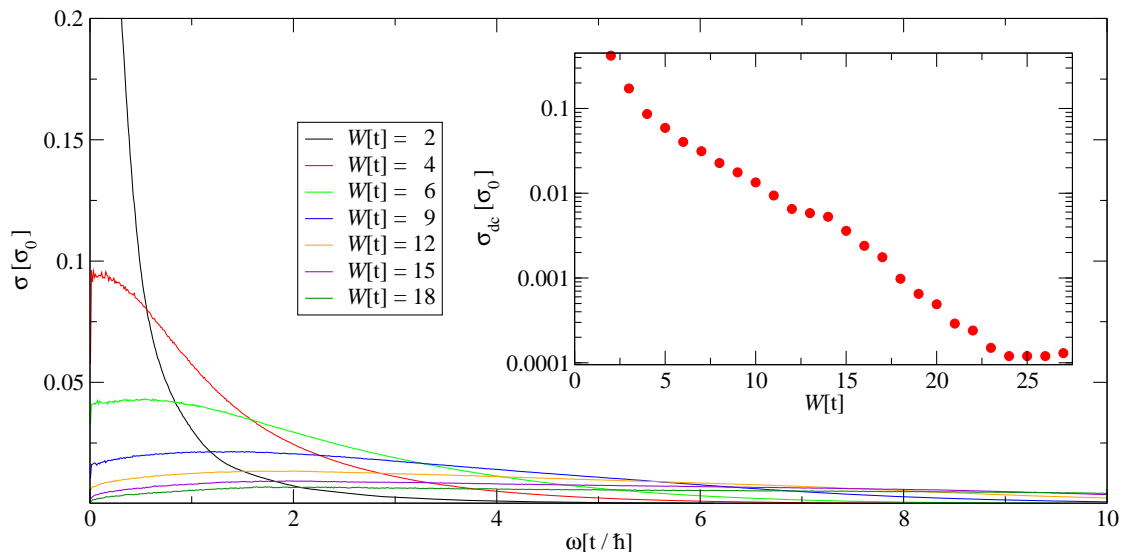


Abbildung 3.5: Optische Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ des dreidimensionalen Anderson-Modells auf einem 15^3 -Gitter unter Verwendung periodischer Randbedingungen und Mittelung über 100 Realisierungen. Hierbei ist die Leitfähigkeit auf $\sigma_0 = \frac{\pi e^2}{\hbar a}$ normiert. In der inneren Abbildung ist der abgeschätzte Limes der Gleichstromleitfähigkeit σ_{dc} gegen die Unordnungsstärke W aufgetragen, wobei sich die Extrapolation $\omega \rightarrow 0$ als problematisch herausstellt (vgl. Abb. 3.6).

Verwendung periodischer Randbedingungen dargestellt. Um eine Darstellung zu finden, die der Struktur von $\sigma(\omega)$ als endliche Summe von δ -Peaks gerecht wird, sortiert man die einzelnen, verschieden gewichteten Peaks in Intervalle (hier der Breite $0.01 \frac{t}{\hbar}$) ein. Es zeigt sich mit zunehmender Unordnung im gesamten Frequenzbereich eine Abnahme von $\sigma(\omega)$. Im Fall schwacher Unordnung liegen die größten Werte von $\sigma(\omega)$ im Bereich kleinen Frequenzen. Aus dem Limes $\omega \rightarrow 0$ erhält man eine direkte Aussage über das Lokalisierungsverhalten der Wellenfunktion. Der Wert, bei dem σ_{dc} verschwindet (vgl. Einschub in Abb. 3.5), ist eine Abschätzung der kritischen Unordnung nach oben und verschiebt sich mit zunehmender Systemgröße zu immer kleineren Werten, bis er im thermodynamischen Limes gegen W_c konvergiert.

Bei der praktischen Ermittlung des dc-Limes der optischen Leitfähigkeit ergibt sich ein Problem. Der bei Verwendung von periodischen Randbedingungen auftretende Drude-Peak erschwert die Extrapolation des Verlaufs von $\sigma(\omega)$ für $\omega \rightarrow 0$. Berechnet man das Drude-Gewicht mittels der f-Summenregel (2.14), erweist sich diese Methode als numerisch unzuverlässig, da sich bei manchen Systemgrößen negative Werte ergeben (vgl. rechtes Teilbild in Abb. 3.6 und [5]). Dieses numerische Problem, das zu einer unphysikalischen negativen Gleichstromleitfähigkeit führt, kann man durch Variation der Systemgröße vermeiden. Unter Vernachlässigung des Drude-Peaks und Extrapolation des Verlaufs von $\sigma(\omega)$ für kleine Frequenzen ergeben sich dc-Leitfähigkeiten, die qualitativ aber nicht quantitativ mit den von Kramer et al. [32] veröffentlichten Werten übereinstimmen. Um der Problematik der Berechnung des Drude-Peaks zu entgehen,

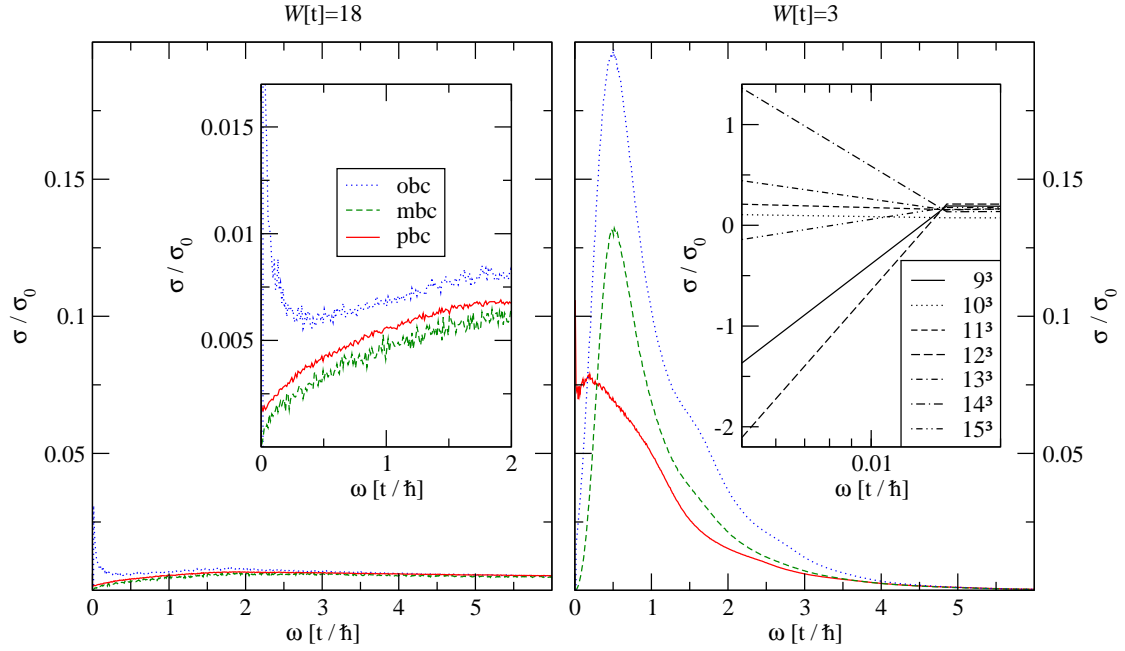


Abbildung 3.6: Hauptbilder: Einfluß der Randbedingungen auf die auf $\sigma_0 = \frac{\pi e^2}{\hbar a}$ normierte optische Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ für zwei verschiedene Unordnungen $W=18t$ (links) und $W=3t$ (rechts) auf einem 10^3 -Gitter und Mittelung über 1000 Realisierungen bei Halfüllung des Bandes. Hierbei stehen pbc für periodische, sowie obc für offene Randbedingungen und mbc bezeichnet periodische Randbedingungen in transversaler Richtung, allerdings offene Ränder in Richtung des \mathbf{E} -Feldes. Linker Einschub: Die Detailansicht von $\sigma(\omega)$ zeigt für pbc und mbc nur unwesentliche Abhängigkeit von den Randbedingungen. Rechter Einschub: Abhängigkeit des Limes $\omega \rightarrow 0$ für Systeme der Größe $9^3, \dots, 15^3$ bei periodischen Randbedingungen.

bietet sich die Möglichkeit an, für das betrachtete System andere Randbedingungen zu wählen, bei denen dieser nicht auftritt. Es zeigt sich (vgl. Abb. 3.6) bei Abänderung der Randbedingungen in Richtung des \mathbf{E} -Feldes von periodisch auf offen bereits für relativ geringe Unordnung ein Verschwinden der niederfrequenten Anteile der optischen Leitfähigkeit. Die Tatsache, daß die dc-Leitfähigkeit für offene Randbedingungen in allen Richtungen im Fall $W = 18t$ wesentlich größer ist als für die beiden anderen Randbedingungen, stellt die Gültigkeit der Anwendung der Kubo-Formel auf ein System mit solchen Randbedingungen in Frage. Da die Kubo-Formel ursprünglich für den thermodynamischen Limes eines unendlich ausgedehnten Systems hergeleitet wurde, ist die Verwendung periodischer Randbedingungen offenbar für endliche Systeme nötig, um diese Bedingung zu erfüllen. Verwendet man hingegen offene Ränder in alle Richtungen, so ist das System endlich, was die Unstimmigkeit der Ergebnisse erklärt. Insgesamt bietet diese Berechnungsmethode bei Verwendung von periodischen Randbedingungen für endliche Frequenzen, wo der Einfluß des Drude-Peaks keine Rolle spielt, eine gute Möglichkeit, die frequenzabhängige Leitfähigkeit eines Kristalls zu berechnen. Betrachtet man Systeme, deren Dimension größer als etwa 10^3 ist, so ist der Verlauf von $\sigma(\omega)$

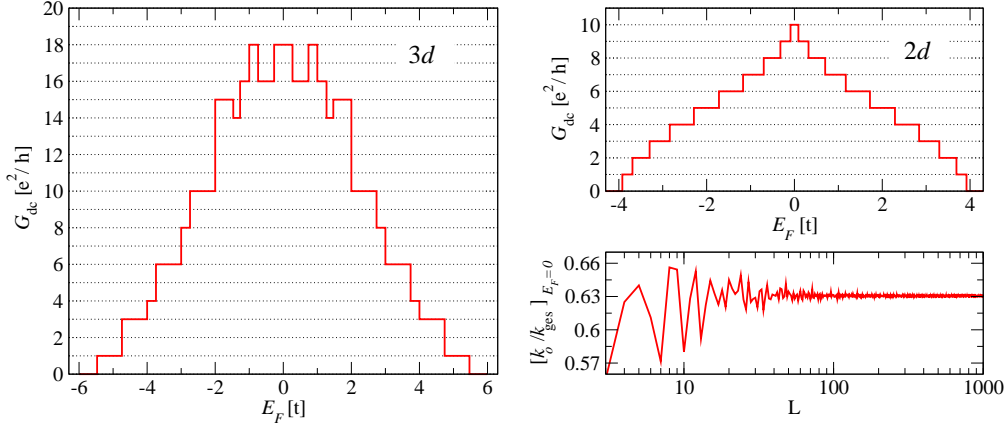


Abbildung 3.7: Quantisierung des Gleichstromleitwertes eines ballistischen Leiters der Dimension 5^3 (links) und 10^2 (rechts oben) als Funktion der Fermienergie E_F . Rechts unten: Anteil der offenen Kanäle k_o an der Gesamtzahl der möglichen transversalen Moden k_{ges} in Abhängigkeit der Systemgröße.

für nicht zu kleine Frequenzen von der Systemgröße unabhängig. Offenbar genügt diese Systemgröße zur Extrapolation des thermodynamischen Limes. Will man allerdings die zur Unterscheidung der Lokalisierungseigenschaften der Wellenfunktionen nötige Gleichstromleitfähigkeit erhalten, so erfüllt die Methode wegen der starken Schwankungen des Drude-Gewichtes die in sie gesetzten Erwartungen nicht.

3.4 Leitwert

Um eine Aussage über die Gleichstromleitfähigkeit σ_{dc} bzw. den Gleichstromleitwert G_{dc} treffen zu können scheint ein besser geeigneter Weg in der Auswertung der zum Landauer-Büttiker-Formalismus äquivalenten [19] Darstellung der Kubo-Formel (2.38) zu liegen. Der so berechnete Leitwert hängt von Dimension und Geometrie der Probe ab. Für diesen ergibt sich im vollständig geordneten Fall eines ballistischen Leiters gerade die mit dem Leitwertquantum $\frac{e^2}{h}$ multiplizierte Anzahl der offenen Transmissionskanäle. Hierbei wird der Kanal $\mathbf{k} = (k_y, k_z)$ dann als offen bezeichnet, wenn die Fermienergie E_F des Systems innerhalb des Subbandes der transversalen Mode \mathbf{k} liegt, also

$$2t(\cos(k_y a) + \cos(k_z a) - 1) \leq E_F \leq 2t(\cos(k_y a) + \cos(k_z a) + 1) \quad . \quad (3.4)$$

Aufgrund der Entartung der diskreten \mathbf{k} -Niveaus ergibt sich für G_{dc} der in Abbildung 3.7 gezeigte stufenförmige Verlauf. Während für den zweidimensionalen Fall die Zahl der offenen Kanäle k_o im Bandzentrum gleich der Anzahl der möglichen Moden k_{ges} ist, also perfekte Transmission vorliegt, trifft dies im dreidimensionalen Fall wegen (3.4) nicht zu. Stattdessen schwankt der Anteil der offenen Kanäle um den asymptotischen Wert von $\frac{k_o}{k_{\text{ges}}} \approx 0.630$. Betrachtet man anstatt des geordneten Falls ein Ensemble ungeordneter Kristalle, so ergibt sich für den Leitwert eine breite Verteilungsdichte. Zur

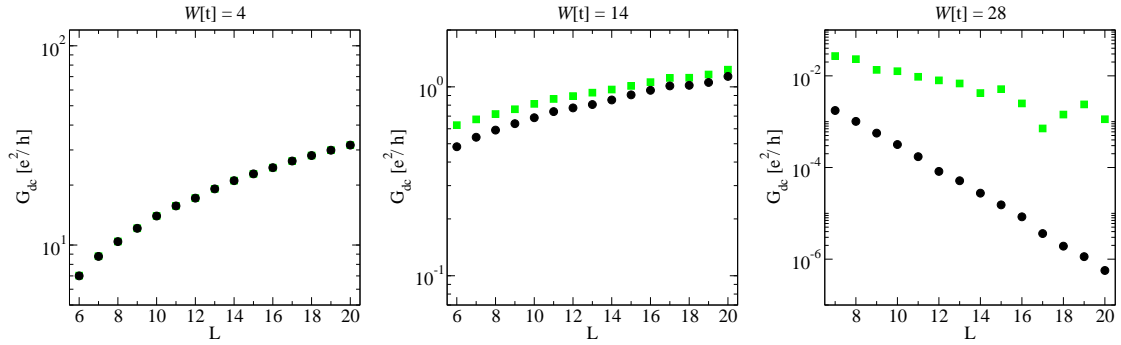


Abbildung 3.8: Vergleich des arithmetischen (■) und des geometrischen (●) Mittelwertes des Gleichstromleitwertes G_{dc} in $3d$ in Abhängigkeit von der Kantenlänge La für verschiedene Unordnungen W .

Charakterisierung dieser, vor allem im stark ungeordneten Bereich, wesentlich von einer Normalverteilung abweichenden Form erweist sich der arithmetische Mittelwert wiederum als ungünstige Größe. Dieser wird von einigen wenigen Ereignissen in den langen Ausläufern der Verteilung dominiert, was zu starken Fluktuationen führt (vgl. Abb. 3.8 rechts). Einen gegenüber diesen Ereignissen deutlich unempfindlicheren Verlauf weist hingegen der Median [63] oder der, als typischer Leitwert bezeichnete, geometrische Mittelwert des Ensembles

$$G_{ty} = \exp \left\{ \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \ln G_m \right\} \quad (3.5)$$

auf. Aus dem Skalenverhalten von G_{dc} mit der Systemgröße läßt sich nun mittels (3.6) die Lokalisierungslänge der Elektronen innerhalb des Kristalls bestimmen. Ausgehend vom konstanten Anteil offener Kanäle im geordneten Fall liegt für Zustände mit $\lambda > La$ ein Anstieg von G_{dc} in führender Ordnung wie L^2 nahe, der den Zuwachs an möglichen transversalen Moden charakterisiert. Für endliche, aber kleine Unordnung erwartet man für den Leitwert Abweichungen von dem des idealen Kristalls, wodurch Korrekturen – in einfachster Näherung in Form eines Polynoms in L im Nenner – nötig werden. Durch Vergleich der Ergebnisse von Kurvenanpassungen mit Polynomen verschiedenen Grades erweist es sich als ausreichend, nur Terme bis zur linearen Ordnung zu berücksichtigen. Geht man schließlich zu großen Werten von W über, bei denen die Systemgröße die Lokalisierungslänge übersteigt, so wird durch den Exponentialfaktor ein Verschwinden des Leitwertes erreicht. Dies motiviert den Ansatz

$$G_{dc}(L) = \frac{L^2}{a + bL} \exp \left\{ -\frac{L}{\lambda} \right\} \quad (3.6)$$

für das Skalenverhalten, wobei die freien Parameter a , b , λ so bestimmt werden müssen, daß eine bestmögliche Übereinstimmung von G_{dc} mit den Daten erzielt wird. In Abbildung 3.9 wurde dies für die Leitwerte von Systemen verschiedener Kantenlängen La und Unordnungen W durchgeführt. Zur nichtlinearen Anpassung der freien Parameter in (3.6) an die vorhandenen Daten wurde der Levenberg-Marquardt-Algorithmus [48]

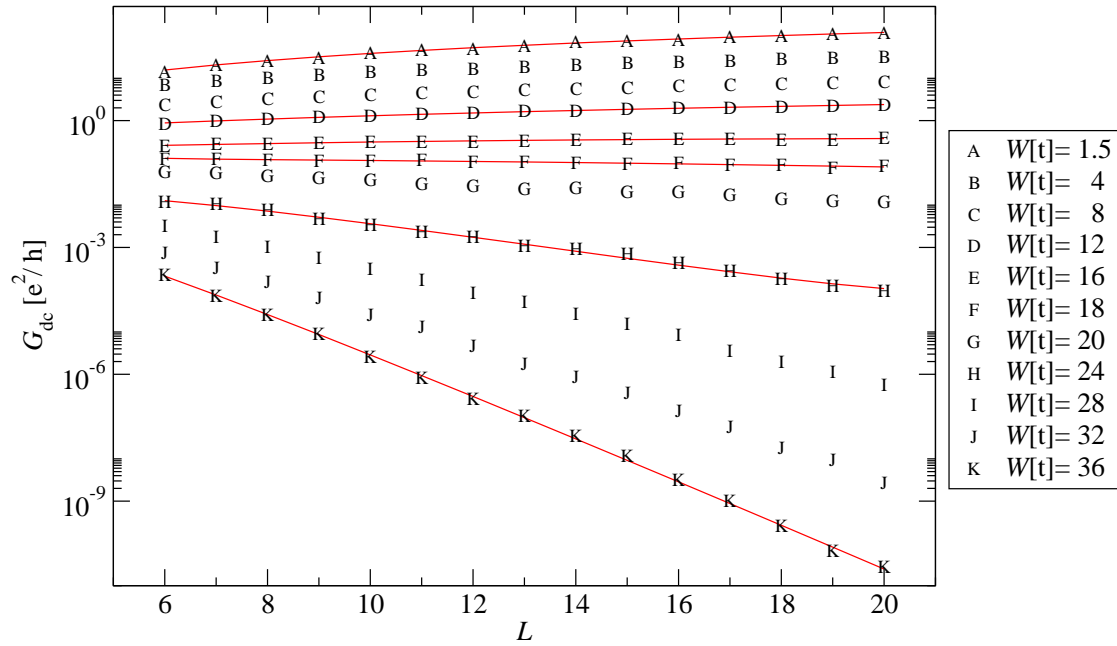


Abbildung 3.9: Abhängigkeit des geometrischen Mittelwertes des Gleichstromleitwertes G_{dc} nach (2.38) von der Kantenlänge La beim dreidimensionalen Anderson-Modell. Für jede Gittergröße L wurde die Mittelung über jeweils 1000 Realisierungen einer Unordnungsstärke W durchgeführt. Die durchgezogenen Linien entsprechen exemplarisch den Anpassungskurven gemäß (3.6) für einige Werte von W .

benutzt. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung des berechneten Verlaufs mit den Datenpunkten und die aus diesem Verfahren gewonnenen Lokalisierungslängen stimmen innerhalb der statistischen Schwankungen gut mit den Werten aus Kapitel 3.1 überein. Einen Überblick über die auf diese Weise gewonnenen Lokalisierungslängen für verschiedenen Werte von W bietet Abbildung 3.16 (▼). Auch diese Methode ermöglicht keine genaue Festlegung der Mobilitätskante, da die nichtlineare Anpassung der freien Parameter an die vorhandenen Daten nicht eindeutig ist. So ergeben verschiedene Kombination der freien Parameter in etwa gleich gute Approximationen, führen jedoch zu sehr unterschiedlichen Werten von λ .

3.5 Lokale Zustandsdichte

Als bisher in der Literatur kaum erwähntes und getestetes Kriterium zur Untersuchung von Lokalisierungseigenschaften elektronischer Wellenfunktionen stellt die Betrachtung der lokalen Zustandsdichte einen zentralen Punkt dieser Arbeit dar. Obwohl bereits Anderson in seiner grundlegenden Arbeit zur Lokalisierungstheorie [3] auf die Bedeutung lokaler Größen und die Betrachtung von Verteilungen anstelle von Mittelwerten hingewiesen hat, wurden diese Ideen in Hinblick auf eine mögliche Verwendung der lokalen Zustandsdichte als Ordnungsparameter für den Anderson-Übergang erst sehr viel

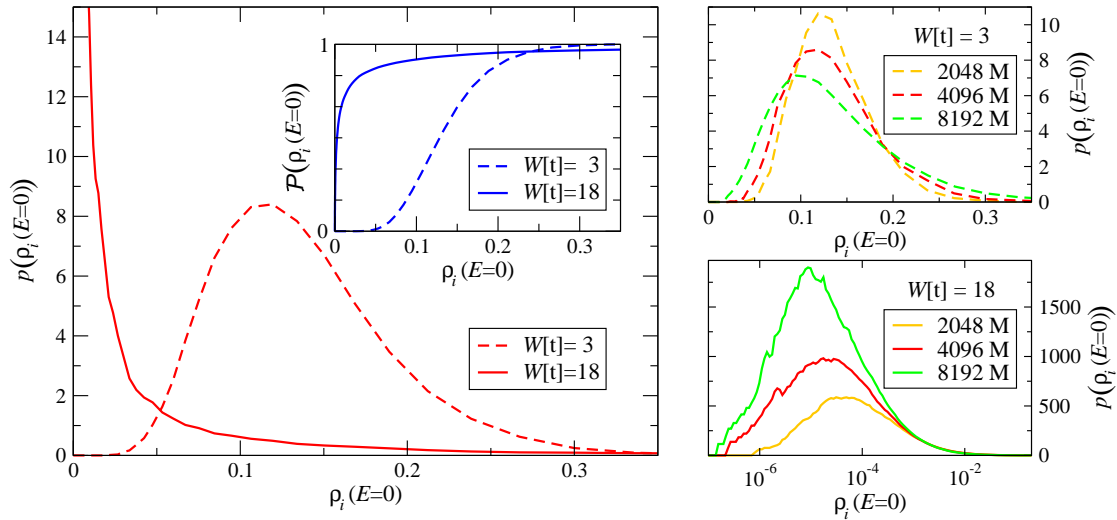


Abbildung 3.10: Hauptbild links: Verteilungsdichte der lokalen Zustandsdichte im Bandzentrum $p(\rho_i(E=0))$ im Fall starker (—) und schwacher (----) Unordnung auf einem 20^3 Gitter. Die Berechnung erfolgte unter Verwendung von 4096 Chebyshev-Momenten und Berücksichtigung von 100×100 Realisierungen. Im Einschub ist die Verteilungsfunktion $\mathcal{P}(\rho_i(E=0))$ gemäß (2.60) dargestellt und die beiden rechten Teilbilder zeigen, welchen Einfluß die Anzahl der verwendeten Chebyshev-Momente M auf den Verlauf der Verteilungsdichte hat.

später wieder aufgenommen [15]. Die heute verfügbaren Rechnerressourcen ermöglichen das Generieren großer Systeme und Ensembles, wodurch statistisch relevante Aussagen ermöglicht werden. Weiterhin haben neu entwickelte numerische Methoden wie die KPM dazu beigetragen, das Lokalisierungsproblem durch Betrachtung von Spektralfunktionen, wie der lokalen Zustandsdichte, effektiv behandeln zu können.

3.5.1 Verteilungsdichte

Nach Andersons ursprünglichem Argument ist es bei der Betrachtung ungeordneter Systeme von fundamentaler Bedeutung, die Verteilungsdichten und nicht die Mittelwerte einer Größe zu diskutieren, da „weder ein wirkliches Atom ein Durchschnittsatom ist, noch ein Experiment jemals an einem Ensemble von Proben durchgeführt wird“ [4]. Demzufolge sollte es möglich sein, aus der Form der Verteilungsdichte der LDOS, oder eventuell aus ihrer Verteilungsfunktion einen Unterschied zwischen ausgedehnten und lokalisierten Zuständen zu erkennen. Während die Verteilungsdichte im delokalisierten Fall in etwa normalverteilt ist, verschiebt sie sich bei zunehmender Ordnung hin zu einer logarithmischen Normalverteilung im lokalisierten Fall (vgl. Abb. 3.10). Vergleicht man für die beiden Unordnungstärken $W[t] = 3, 18$ die Verteilungsdichte der lokalen Zustandsdichte im Bandzentrum $p(\rho_i(E=0))$, so tritt dieser Unterschied deutlich hervor. Bei Verwendung einer größeren Anzahl von Chebyshev-Momenten zur Berechnung der LDOS zeigt sich in beiden Fällen die Tendenz einer Verschiebung der Verteilungsdichte zu niedrigeren Werten, ohne daß sich dabei die Form wesentlich ändert. Auch durch Betrachtung

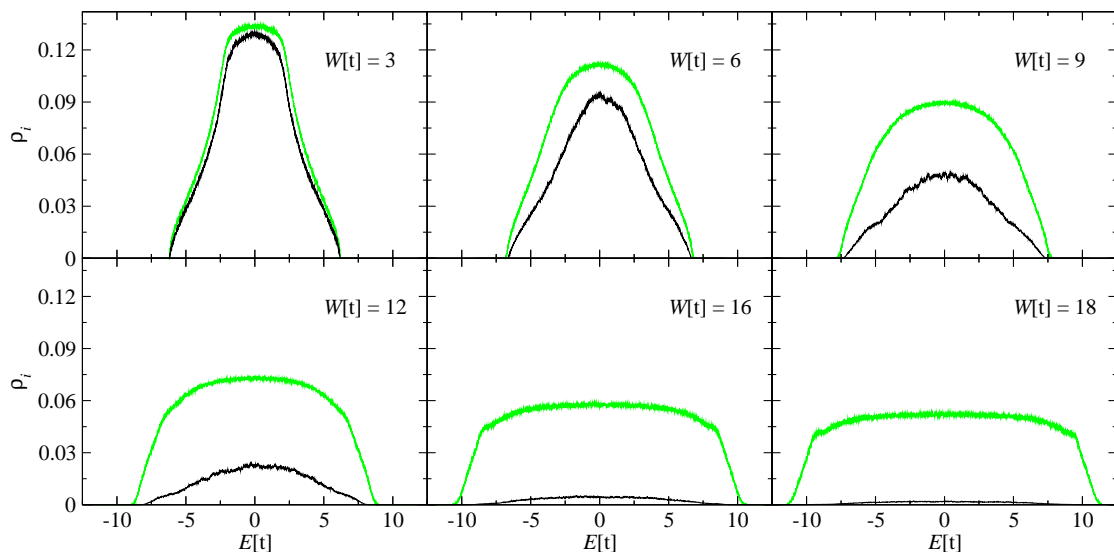


Abbildung 3.11: Mittlere (—) und typische (—) Zustandsdichte für das dreidimensionale Anderson-Modell auf einem 50^3 -Gitter mit periodischen Randbedingungen für verschiedene Werte der Unordnung W . Die Berechnung erfolgte mittels 8192 Chebyshev-Momenten und Mittelung über je 32 zufällig ausgewählten Plätzen bei 32 Unordnungsrealisierungen im Falle von ρ_{ty} und $32 * 32$ delokalisierten Startvektoren für ρ_{av} .

der Verteilungsfunktion lassen sich die beiden Lokalisierungsverhalten voneinander unterscheiden. Für ausgedehnte Zustände erfolgt der Anstieg von $P(\rho_i)$ über einen relativ breiten Bereich, wohingegen im lokalisierten Regime, wo der Großteil des Gewichts bei sehr kleinen Werten von ρ_i konzentriert ist, in diesem Bereich ein steiler Anstieg vorliegt. Ein Vorteil der Betrachtung der Verteilungsdichte besteht darin, daß dieses Kriterium universell für alle Energien des Bandes in gleicher Weise anwendbar ist. Demzufolge ist es nicht nur möglich die kritische Unordnung W_c zu bestimmen, bei der die beiden Mobilitätskanten bei $E = 0$ zusammenlaufen, sondern man kann auch für beliebige Werte von W die Lage der Mobilitätskanten auffinden, indem man die Energien findet, bei denen sich die Form von $p(\rho_i(E))$ von normalverteilt auf log-normalverteilt ändert. Aufgrund der endlichen Systemgrößen gehen die Formen der Verteilungen fließend ineinander über, wodurch eine eindeutige Zuordnung zum einen oder anderen Regime unmöglich wird. Eine eindeutige Differenzierung kann nur im thermodynamischen Limes erfolgen.

3.5.2 Typische Zustandsdichte

Wie in Kapitel 2 erwähnt stellt der Vergleich der mittleren und der typischen Zustandsdichte eine Möglichkeit dar, lokalisierte und delokalisierte Zustände voneinander zu unterscheiden. Das Verhalten dieser beiden Größen für verschiedene Werte der Unordnung ist in Abbildung 3.11 zusammengefaßt. Es zeigt sich deutlich, daß für schwache Unordnung die mittlere und typische Zustandsdichte in etwa übereinstimmen, während ρ_{ty} mit zunehmenden Werten von W immer weiter abnimmt, bis sie schließlich im Bereich

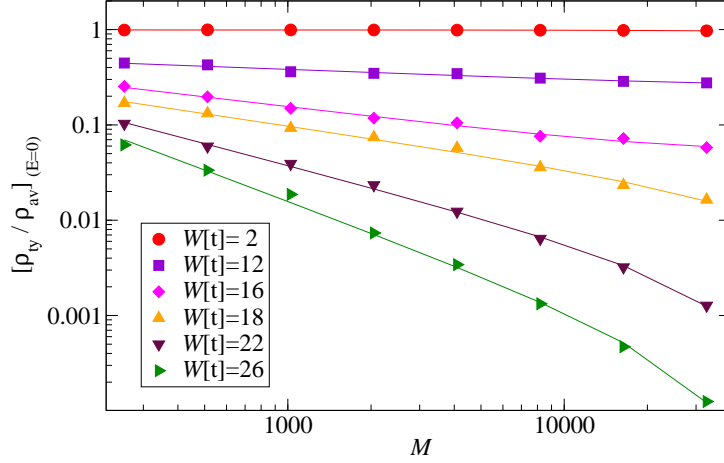


Abbildung 3.12: Abhängigkeit der auf die mittlere Zustandsdichte ρ_{av} normierten typischen Zustandsdichte ρ_{ty} im Bandzentrum ($E=0$) in Abhängigkeit der Anzahl der zur Berechnung verwendeten Chebyshev-Momente M für verschiedene Unordnungen. Die durchgezogenen Kurven ergeben sich durch Anpassung der freien Parameter in der Skalenfunktion (3.7).

der kritischen Unordnung $W_c \approx 16.5t$ verschwindet. Da allerdings auch die mittlere Zustandsdichte bei zunehmender Unordnung abnimmt, ist der direkte Vergleich der Werte von ρ_{ty} für verschiedene Werte von W nicht aussagekräftig. Vielmehr bietet es sich an, die typische auf die mittlere Zustandsdichte zu normieren und den Quotienten $\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}}$ als Indikator für Lokalisierung zu verwenden. Im lokalisierten Bereich sollte dieser verschwinden, während er für ausgedehnte Zustände ungefähr gleich eins ist. Da die Form der Verteilungsdichte, wie in Abbildung 3.10 bereits angedeutet, von der Anzahl der verwendeten Chebyshev-Momente abhängt, erwartet man für den Quotienten $\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}}$ auch eine derartige Abhängigkeit. Um diese systematisch zu untersuchen bietet sich die Beschränkung auf eine feste Energie an, um dort für verschiedene Unordnungen W und Momentenzahlen M das Verhältnis von typischer und mittlerer Zustandsdichte zu berechnen. In Abbildung 3.12 ist dieser Quotient als Funktion der verwendeten Chebyshev-Momente für verschiedene Werte von W dargestellt. Während im delokalisierten Bereich keine Abhängigkeit von der Momentenzahl vorliegt, ergibt sich für größere Werte von W die erwartete Abnahme von $\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}}$ mit zunehmender Momentenzahl. Für nicht allzu große Werte von W genügt diese Abhängigkeit einem Potenzgesetz, wohingegen der Abfall für Unordnungsstärken etwa ab $W = 22t$ zunehmend steiler wird. Eine Beschreibung der Lage der Datenpunkte für die verschiedenen Werte von W ist durch Anpassung der freien Parameter a_0, \dots, a_2 in der Skalierungsfunktion

$$\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}} = (a_0 + a_1 M) M^{a_2} \quad (3.7)$$

möglich. Der zusätzliche a_1 -Term spielt erst im Bereich großer Unordnung eine Rolle. Eine mögliche Erklärung für die verstärkte Abnahme der typischen Zustandsdichte für Unordnungen über $W = 22t$ und mehr als 16384 Momenten liegt darin, daß bei

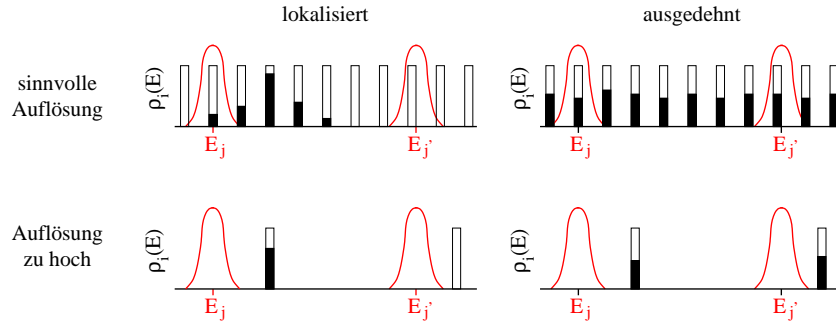


Abbildung 3.13: Schematische Darstellung der Auswirkung einer zu großen Momentenzahl. Für Breiten des Jackson-Kerns, die wesentlich kleiner als der mittlere Niveauabstand sind, nimmt die typische Zustandsdichte auch im delokalisierten Fall ab.

der betrachteten Systemgröße von 50^3 hier die Breite des Jackson-Kerns erstmalig in der Größenordnung des mittleren Abstands der Energieniveaus liegt. Daher sollte diese Änderung des Abfallverhaltens auch für kleinere Werte der Unordnung, wie $W = 18t$ auftreten, allerdings erst bei höheren Momentenzahlen. In diesem Zusammenhang sei vor einer Verwendung von zu vielen Momenten für kleine Systeme gewarnt: Falls die Auflösung des Jackson-Kerns wesentlich schärfer als der mittlere Niveauabstand ist, tritt auch im delokalisierten Fall eine Abnahme der typischen Zustandsdichte auf (vgl. Abb. 3.13). Die Auswertung der lokalen Zustandsdichte geschieht im Rahmen der KPM an den Energiewerten E_j , die Nullstellen des Chebyshev-Polynoms entsprechender Ordnung sind. Eine Abnahme der typischen Zustandsdichte bei einem bestimmten Energiewert E_j kann aus zwei Gründen erfolgen: Innerhalb einer Halbwertsbreite des Jackson-Kerns um den Energiewert E_j liegt zwar ein Energieniveau, allerdings ist dessen lokale Amplitude klein oder verschwindet gänzlich (lokalisierter Fall, großes System). Ebenso ist eine Abnahme zu verzeichnen, falls innerhalb dieses Bereichs überhaupt kein Eigenwert liegt (lokalisierter oder delocalisierter Fall; Auflösung für betrachtetes System zu groß). Betrachtet man jedoch das System mit angemessener Auflösung, so liegt für jede Realisierung im entsprechenden Bereich um die Nullstellen jeweils mindestens ein Energieniveau, und für ausgedehnte Zustände ist die Amplitude auch überall endlich. Daher ist die Anzahl der verwendeten Momente immer mit Rücksicht auf die Systemgröße und den daraus resultierenden mittleren Niveauabstand zu wählen.

Für die betrachteten Systeme der Dimension 50^3 ist eine Verwendung von 32768 Momenten ohne Probleme möglich, wenngleich man für $W > 24t$ mit der Auflösung des Jackson-Kerns die Größenordnung des mittleren Niveauabstandes erreicht. In Abbildung 3.14 ist für verschiedene Momentenzahlen die Abhängigkeit von $\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}}$ von der Unordnung W gezeigt. Hierbei zeigt sich der Unterschied zwischen ausgedehnten Zuständen im Bereich kleiner Unordnung und den lokalisierten Wellenfunktionen für große W durch große Unterschiede der Werte der auf die mittlere Zustandsdichte normierten ρ_{ty} . Ähnlich wie bei den anderen bisher verwendeten Methoden ist es aufgrund der stetigen Abnahme nicht möglich, einen genauen Wert für W_c festzulegen, bei dem die Trennlinie zwischen den beiden Regimes liegt. Der Bereich, in dem der Anderson-Übergang stattfindet, stimmt

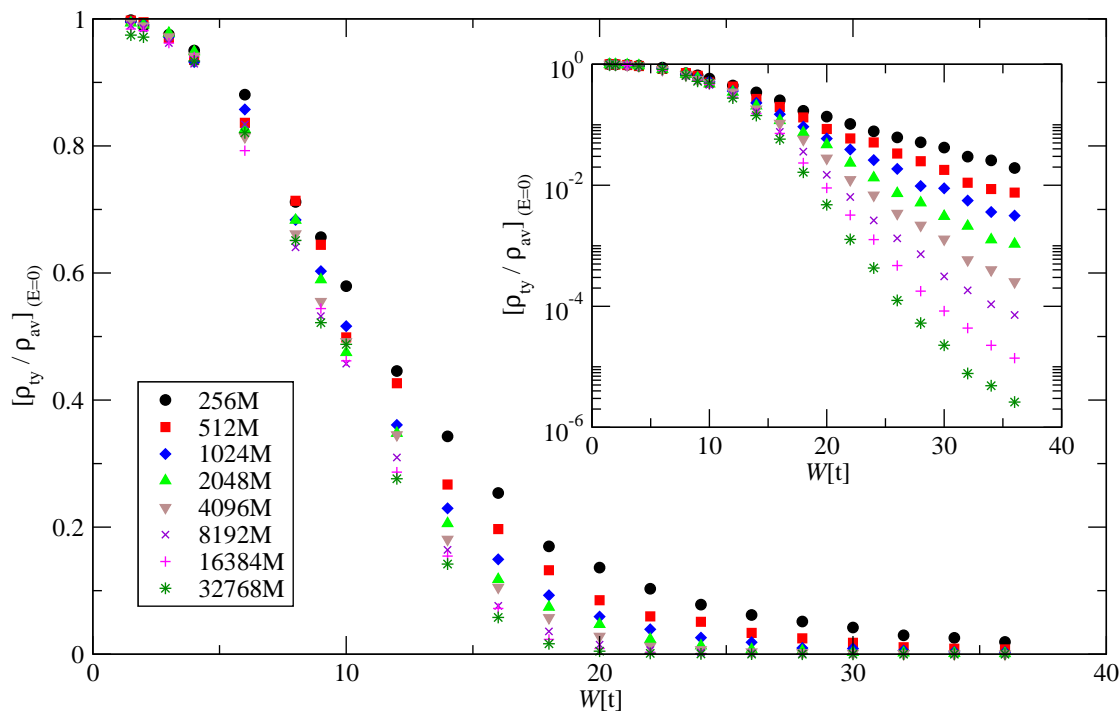


Abbildung 3.14: Abhängigkeit der auf die mittlere Zustandsdichte ρ_{av} normierten typischen Zustandsdichte ρ_{ty} im Bandzentrum ($E=0$) von der Unordnungsstärke W für verschiedene Anzahlen verwendeter Chebyshev-Momente M auf einem 50^3 Gitter. Die statistischen Fehlerbalken der einzelnen Punkte, die sich aus der Mittelung über $32 * 32$ Realisierungen ergeben sind in der Größenordnung der verwendeten Symbole.

mit den Ergebnissen der andere Methoden in etwa überein (vgl. Abb. 3.16). Der Wert von W , oberhalb dessen die typische Zustandsdichte verschwindet, liefert eine obere Schranke für noch ausgedehnte Zustände, deren Lage sich mit zunehmender Momentenzahl zu kleineren Werten verschiebt. Diese obere Schranke wird einerseits durch die betrachtete Systemgröße und andererseits durch die Anzahl der verwendeten Momente bestimmt.

Basierend auf diesen Erkenntnissen ist es ebenfalls möglich, für das gesamte Band den Verlauf der Mobilitätskante zu bestimmen. Berechnet man die normierte typische Zustandsdichte und trägt ihren Wert in der Energie-Unordnungsebene auf, so ergibt sich der in Abbildung 3.15 dargestellte Verlauf. Als mögliche Kandidaten für den Verlauf der Mobilitätskante (vgl. Abb. 3.15 rechts) kommen die Äquipotentiallinien verschiedener konstanter Werte von $\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}}$ in Frage. Unklar ist jedoch, welcher endliche Wert der normierten typischen Zustandsdichte am besten die Trennlinie zwischen ausgedehnten und lokalisierten Zuständen verkörpert. Setzt man den in der Literatur [23, 31] als gesichert geltenden Wert der kritischen Unordnung $W_c \approx 16.5t$ als Referenzpunkt voraus, so entspricht dies einer bei einem Wert von etwa 0.05 verlaufenden Höhenlinie. Es sei jedoch ausdrücklich darauf hingewiesen, daß sich dieser Wert rein aufgrund numerischer Parameter ergibt, und ihm keinerlei physikalische Bedeutung zukommt.

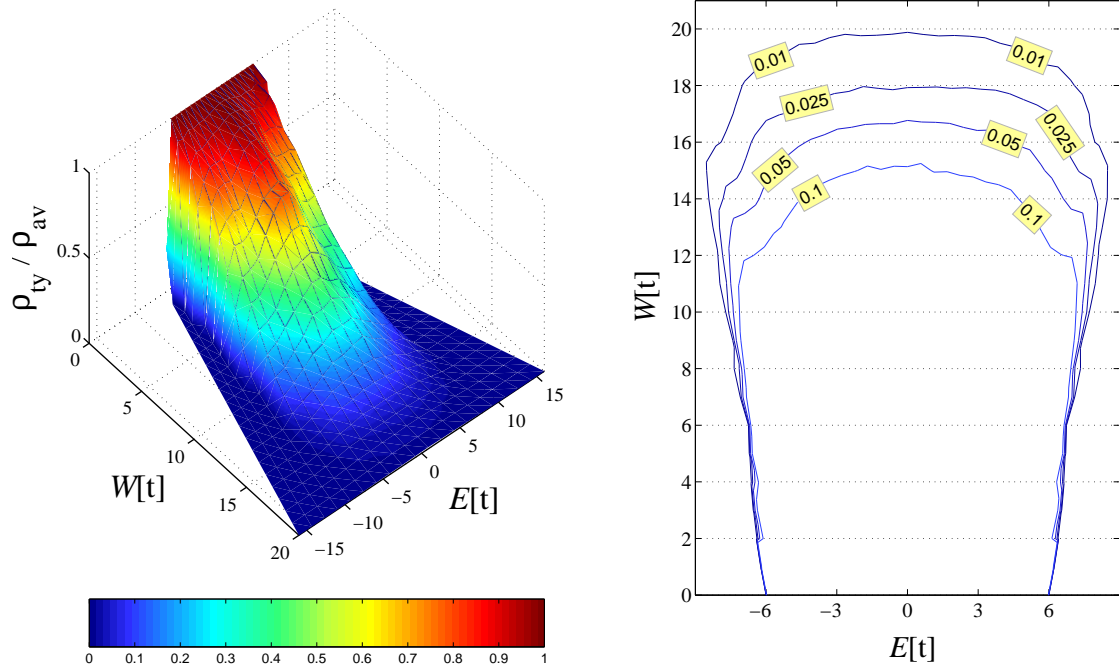


Abbildung 3.15: Verlauf der auf die mittlere Zustandsdichte ρ_{av} normierten typischen Zustandsdichte ρ_{ty} für das dreidimensionale Anderson-Modell auf einem 50^3 -Gitter unter Verwendung von 16384 Chebyshev-Momenten und $32 * 32$ Mittelungen pro Unordnung W . Im linken Bild entsprechen hierbei die dunkelblauen Bereiche lokalisierten Zuständen. Das rechte Bild zeigt ein Höhenlinienprofil dieser Daten, wobei man den Verlauf einer geeignet gewählten Höhe als Mobilitätskante deuten kann. Der mit den Werten aus der Literatur [23, 31] am besten übereinstimmende Verlauf ergibt sich für $\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}} \approx 0.05$.

3.6 Zusammenfassung der Ergebnisse für das dreidimensionale Anderson-Modell

In Abbildung 3.16 sind die wesentlichen Resultate der bisherigen Kapitel zusammengefaßt, indem die für das jeweilige Lokalisierungskriterium charakteristischen Größen – Lokalisierungslänge, inverse Partizipationszahl und typische Zustandsdichte – als Funktion der Unordnung aufgetragen sind. Die Lokalisierungslängen λ , die einerseits durch direkte Betrachtung des Abfallverhaltens der Wellenfunktion und andererseits durch Anwendung einer Finite-size-Skalierung des Gleichstromleitwertes berechnet wurden, stimmen im Rahmen der statistischen Fluktuationen sehr gut überein. Der Wert der kritischen Unordnung, bei dem die Lokalisierungslänge divergiert, deckt sich ungefähr mit dem Wert, wo sich auch das Verhalten der inversen Partizipationszahl charakteristisch ändert. Diese Ergebnisse bestätigen den in der Literatur angegebene Wert der kritischen Unordnung $W_c \approx 16.5t$. Die erreichte Genauigkeit von $\pm 0.5t$ ist mit der vieler Veröffentlichungen, z. B. [30, 31] vergleichbar. Lediglich das, von anderen Gruppen noch unbestätigte, Kon-

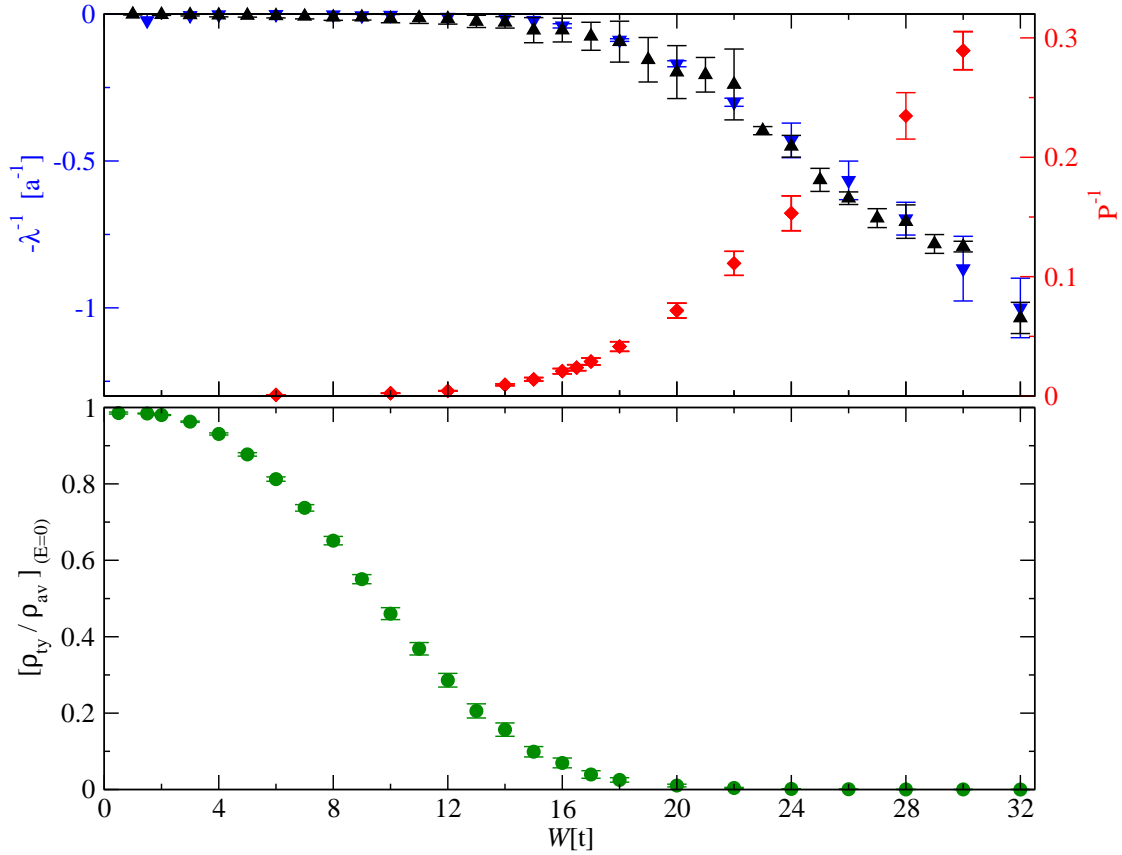


Abbildung 3.16: Vergleich der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Kriterien zur Bestimmung der kritischen Unordnung W_c :

(▲) Aus dem Abfallverhaltens der Wellenfunktion in Systemen der Größe 20^3 und 30^3 berechnete Lokalisierungslänge λ gemäß Kapitel 3.1.

(▼) Lokalisierungslänge, die sich durch Anwendung eines Finite-size-Skalierung des Gleichstromleitwertes G_{dc} für Gittergrößen von 6^3 bis 20^3 wie in Kapitel 3.3 beschrieben ergibt.

(◆) Aus arithmetischer Mittelung über 100 Realisierungen von 16^3 -Gittern berechnete inverse Partizipationszahl P^{-1} aus Kapitel 3.2.

(●) Auf die mittlere Zustandsdichte ρ_{av} normierte typische Zustandsdichte ρ_{ty} in der Bandmitte analog zu Kapitel 3.5 . Die Berechnung der lokalen Zustandsdichte erfolgte an je 32 zufälligen Plätzen von 32 Realisierungen eines 50^3 Gitters unter Verwendung von 16384 Chebyshev-Momenten. Für die mit 256 Momenten berechnete mittlere Zustandsdichte wurden hingegen $32 * 32$ zufällige delokalisierte Startvektoren verwendet. Um statistische Fluktuationen zu vermeiden wurde ρ_{ty} zusätzlich über ein Energieintervall der Breite $0.2t$ gemittelt.

Die mittels der vier Methoden erhaltenen Ergebnisse liefern übereinstimmend in etwa die gleiche kritische Unordnung $W_c \approx 16.5t$.

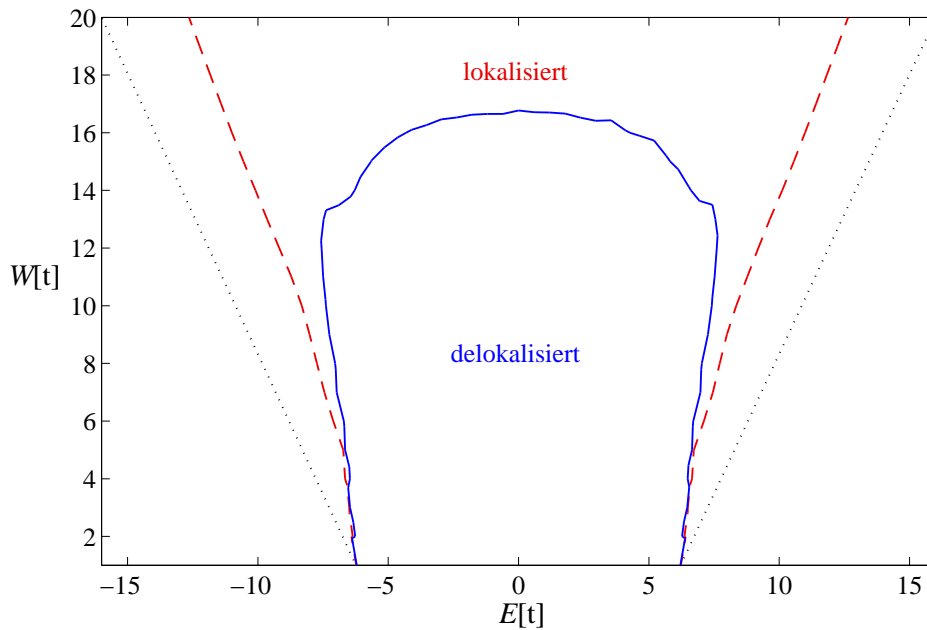


Abbildung 3.17: Verlauf der Mobilitätskante(—), numerischen Bandkante(---) und Lifshitz-Grenzen(.....) in der Unordnungs-Energie-Ebene für ein Systeme der Größe 50^3 nach Mittelung über $32 * 32$ Realisierungen der Unordnung. Der Verlauf der Bandkante wurde durch die Bedingung festgelegt, daß die mittlere Zustandsdichte ρ_{av} innerhalb des Bandes größer ist als 10^{-4} . Die Mobilitätskante entspricht der in Abbildung 3.15 gezeigten Kurve für $\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}} = 0.05$.

fidenzintervall von Slevin et al. [56], ist um mehr als eine Größenordnung kleiner. Die entscheidende Frage ist nun, wie sich das neue Kriterium der typischen Zustandsdichte in dieses Bild fügt. Es zeigt sich, daß der Wert von W_c , unterhalb dessen erstmals ein nicht-verschwindende Wert von $\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}}$ auftritt, mit dem der anderen Kriterien übereinstimmt, und die Unsicherheit der Abschätzung auch nicht größer ist als bei diesen. Daher stellt das Verschwinden der typischen Zustandsdichte ein Lokalisierungskriterium dar, dessen Qualität vergleichbar mit dem der Lokalisierungslänge oder der inversen Partizipationszahl ist. Ein weiterer Vorteil liegt in der möglichen Anwendbarkeit des Kriteriums der typischen Zustandsdichte auch auf wechselwirkende Systeme.

Die mittels des Kriteriums der typischen Zustandsdichte erhaltenen, in Abbildung 3.17 dargestellten Ergebnisse für den Verlauf der Mobilitätskante sind ebenfalls in Übereinstimmung mit den in der Literatur publizierten Kurven [23, 31]. Anhand dieser Abbildung wird noch ein weiterer Effekt deutlich, der sich durch die Betrachtung endlicher Systeme ergibt. Im thermodynamischen Limes fällt die Bandkante mit der Lifshitz-Grenze zusammen, obwohl die Zustandsdichte dort exponentiell klein wird. Da die Anzahl der Zustände für ein endliches System jedoch beschränkt ist, kann man davon ausgehen, daß in einem Bereich, wo ρ_{av} kleiner ist als das Inverse der Systemgröße keine Zustände mehr vorliegen. Aus diesem Grund liegen die Bandkanten des betrachteten, endlichen Systems deutlich innerhalb der Lifshitz-Grenzen.

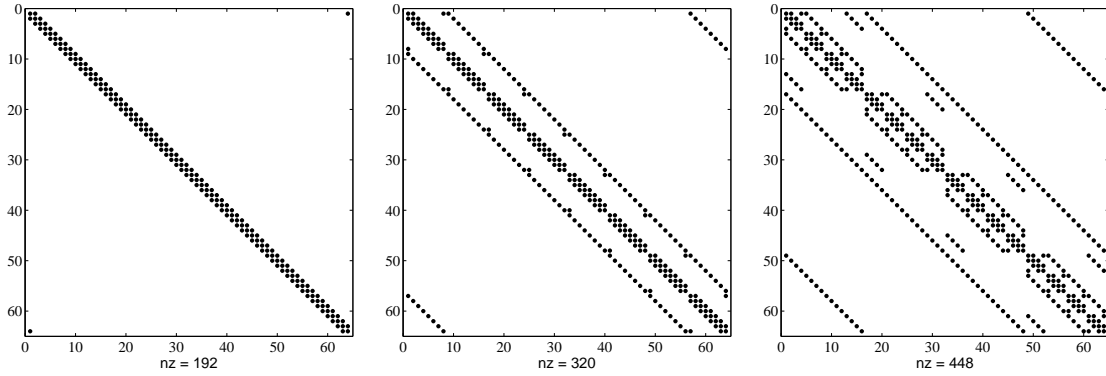


Abbildung 3.18: Strukturen der besetzten Plätze in Anderson-Matrizen der Dimension $N \times N$ die aus Betrachtung von Kristallen mit linearer Dimension L in verschiedenen Raumdimensionen d hervorgehen. In allen drei Bildern ist $L^d = N = 64$ konstant. Links: 1d-Fall mit 64 Plätzen, Mitte: 2d-Fall mit 8^2 Plätzen, rechts: 3d-Fall mit 4^3 Plätzen.

3.7 Vergleich mit dem ein- und zweidimensionalen Anderson-Modell

Einen weiteren Test für die Qualität der typischen Zustandsdichte als Lokalisierungskriterium bietet das Anderson-Modell im ein- und zweidimensionalen Fall. Während es für den eindimensionalen Fall analytisch bewiesen ist, daß selbst beliebig schwache Unordnung zu vollständiger Lokalisierung [6, 40] führt, ist man im zweidimensionalen Fall zwar auch von der Richtigkeit dieser Aussage überzeugt, allerdings existiert hierfür kein analytischer Beweis. Vielmehr ist man auf numerische Belege zur Bestätigung der Vorhersagen der Ein-Parameter-Skalentheorie von Abrahams et al. [1] angewiesen, welche die vollständige Lokalisierung in $2d$ fordert. Vom rein formalen Standpunkt aus betrachtet schlägt sich die Frage der Raumdimension lediglich in der Anzahl der Nebendiagonalen des Hamiltonoperators nieder (vgl. Abb. 3.18). Dieser Unterschied hat jedoch sowohl auf die Levelstatistik, wie auch auf sonstige Eigenschaften des Spektrums und nicht zuletzt die Lokalisierungseigenschaften der Wellenfunktionen einen großen Einfluß. Das Ziel dieses Kapitels soll es nun sein, mit Hilfe des Kriteriums der typischen Zustandsdichte diese vollständige Lokalisierung in einer und zwei Dimensionen nachzuweisen. In analoger Vorgehensweise zum dreidimensionalen Fall wurden zwei Systeme untersucht, deren darstellende Hamiltonoperatoren in etwa die gleiche Dimension haben wie das 50^3 -System in Kapitel 3.5. Die erhaltenen Ergebnisse sind in Abbildung 3.19 gegenübergestellt. Hierbei zeigt sich für den eindimensionalen Fall Lokalisierung auch für sehr kleine Werte von W , was das erwartete Verhalten reproduziert. Da die Lokalisierungslänge in $1d$ durch

$$\lambda_{1d} \approx \frac{12a}{W}(4t - E) \quad (3.8)$$

abgeschätzt werden kann [62], ist klar, daß bei der betrachteten Systemgröße von 125000 Plätzen bis zu sehr kleinen Werten von W eine eindeutige Lokalisierung erkennbar ist.

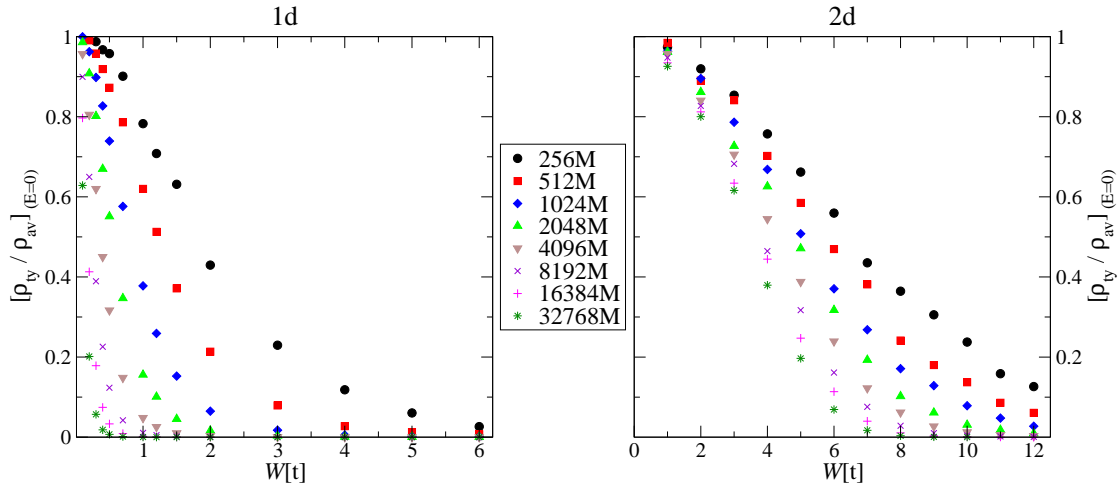


Abbildung 3.19: Abhängigkeit der auf die mittlere Zustandsdichte ρ_{av} normierten typischen Zustandsdichte ρ_{ty} in der Bandmitte von der Unordnungsstärke W für verschiedene Anzahlen von Chebyshev-Momenten M in einer und zwei Dimensionen. Links: eindimensionale Kette mit 125000 Plätzen; rechts: zweidimensionales Gitter mit 350^2 Plätzen. Die Berechnung der lokalen Zustandsdichte erfolgte jeweils an 32 zufälligen Plätzen von 32 Realisierungen der Unordnung, während zur Berechnung der mittleren Zustandsdichte die gleiche Anzahl delokalierter Startvektoren und 256 Momente verwendet wurden.

Im Gegensatz dazu scheint die Lokalisierung im zweidimensionalen Fall nur für Werte von $W \gtrsim 6t$ einwandfrei nachgewiesen, während für schwächere Unordnung zwar ebenfalls eine Abnahme vorliegt, diese aber nicht stark genug ist, um als Indiz für Lokalisierung zu gelten. Die Tatsache, daß es auch im Rahmen dieser Methode nicht möglich ist, die Lokalisierung aller Zustände für beliebig schwache Unordnung im zweidimensionalen Fall nachzuweisen, liegt an der hier auftretenden sehr großen Lokalisierungslänge λ für kleine Werte von W . Dies führte dazu, daß es lange Zeit nicht als sicher galt, ob es hier nicht auch einen Anderson-Übergang wie in 3d gibt [36]. Bis Anfang der 80er Jahre deuteten die erhaltenen numerischen Ergebnisse [32, 36, 61] auf die Existenz einer kritischen Unordnung bei $W \approx 6t$ hin. Erst durch die Ein-Parameter-Skalentheorie [1], die bis heute als korrekte Beschreibung des Lokalisierungsproblems gilt, etablierte sich die Vorstellung vollständiger Lokalisierung in $2d$. So belegen neuere Ergebnisse [63] eine Lokalisierungslänge von 100 im Bereich von $W \approx 5t$. Als Illustration dieser großen Lokalisierungslänge zeigt Abbildung 3.20 einen mittels exakter Diagonalisierung berechneten Eigenzustand zu $E = 0$ auf einem 200^2 -Gitter für $W = 5t$.

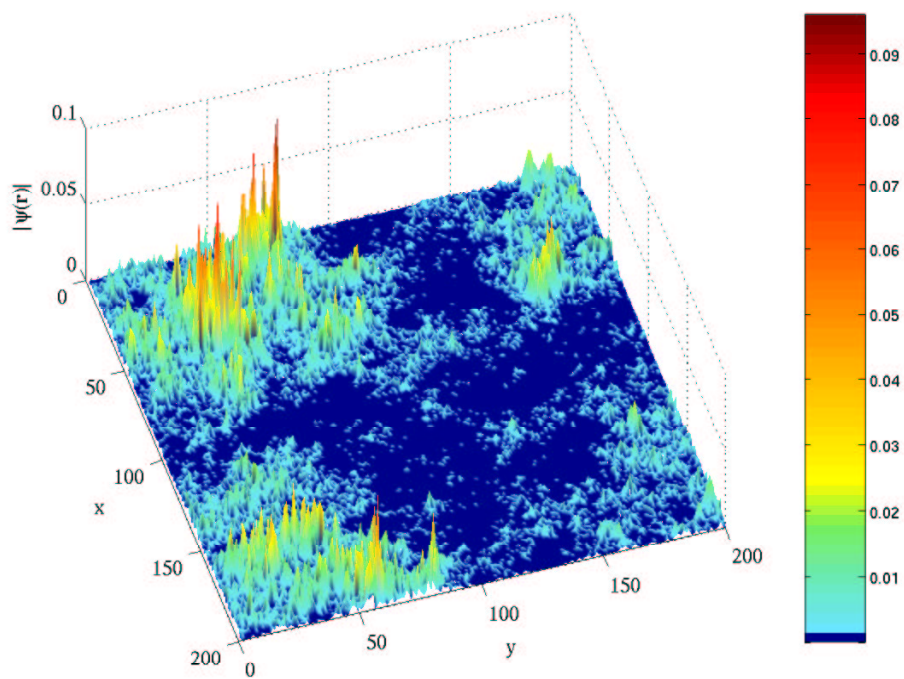


Abbildung 3.20: Amplitudenbetrag $|\psi(\mathbf{r})|$ einer Wellenfunktion bei Energie $E = 0$ für das Anderson-Modell auf einem 200^2 Gitter mit periodischen Randbedingungen und Unordnung $W = 5t$.

4 Perkolationsmodell

Ausgehend vom Anderson-Modell aus Kapitel 3, das man als Grenzfall einer Legierung mit unendlich vielen Komponenten auffassen kann, ergibt sich für den Spezialfall nur zweier verschiedener lokaler Potentiale w_A und w_B ein Modell, das die Eigenschaften einer binären Mischung $A_X B_{1-X}$ beschreibt. Wählt man die Plätze, die von A -Atomen besetzt sind nicht nach einem regelmäßigen Muster, sondern zufällig aus, so stellt sich auch hier die Frage, welchen Einfluß die dadurch entstehende Unordnung auf die elektronischen Zustände des Kristalls hat. Falls der Unterschied zwischen w_A und w_B relativ klein ist, ergibt sich ein qualitativ ähnliches Verhalten wie in Kapitel 3. Anhand des Theorems von Gerschgorin [21, 50] wird jedoch klar, daß das Spektrum für $|w_A - w_B| > 4td$ in zwei Subbänder aufspaltet. Durch Festlegung des Energienullpunktes kann man $w_A = 0$ setzen. Im Limes $w_B \rightarrow \infty$ zeigt sich, daß die Amplituden auf allen B -Plätzen identisch verschwinden [29]. In diesem Fall bilden die B -Atome unüberwindbare Barrieren und man kann die Betrachtung ausschließlich auf die A -Plätze beschränken.

Das so reformulierte Problem ist eng mit dem klassischen Problem der Perkolation [38] verwandt, das zur Beschreibung von Transportvorgängen in porösen Medien (z. B. Bildung von Erdöllagerstätten), sowie zur Simulation zufälliger Verbreitungsprozesse (Waldbrände, Seuchen) und vieler weiterer Phänomene herangezogen wird. Die grundlegende Frage dieses klassisch rein geometrischen Problems liegt darin, wieviele Plätze oder Bindungen aus einem regelmäßigen Gitter entfernt werden können, so daß weiterhin eine durchgängige Verbindung von einer Seite des Gitter zur anderen besteht, die eine Ausbreitung der betrachteten Größe ermöglicht. Die Konzentration der vorhandenen Plätze (bzw. Bindungen) bezeichnet man als Besetzungswahrscheinlichkeit p . In Abhängigkeit davon, welche Art von Ausdünnung man betrachtet, spricht man von Platz- oder Bindungsperkolation (vgl. Abb. 4.1). Für Werte von p , die kleiner als die Perkolationsschwelle p_c sind, liegen in der Regel nur kleine zusammenhängende Cluster vor, während für $p > p_c$ mit Wahrscheinlichkeit eins ein unendlich ausgedehnter Cluster auftritt, der das betrachtete (endliche) Gitter vollständig durchsetzt. Der Wert von p_c hängt außer von geometrischen Faktoren wie Dimension oder Koordinationszahl des Gitters auch von der Art der betrachteten Perkolation ab. Es zeigt sich, daß der kritische Wert für den Fall der Platzperkolation stets größer oder gleich dem entsprechenden Wert der Bindungsperkolation ist [69]. Da sich für die meisten physikalischen Probleme die Platzperkolation auf eine natürlichere Weise ergibt, beschränkt sich die Betrachtung im Folgenden auf diese. Hierfür ergibt sich der Wert der Perkolationsschwelle auf einem Quadratgitter zu $p_c^{2d} = 0.59$, sowie der auf einem einfach kubischen Gitter zu $p_c^{3d} = 0.31$. Beim Übergang von klassischen zu quantenmechanischen Phänomenen stellt sich die Frage, ob die unendliche Ausdehnung eines Clusters alleine schon die Existenz ausgedehnter Elektronenzustände garantiert, oder ob diese in endlichen Bereichen lokalisiert

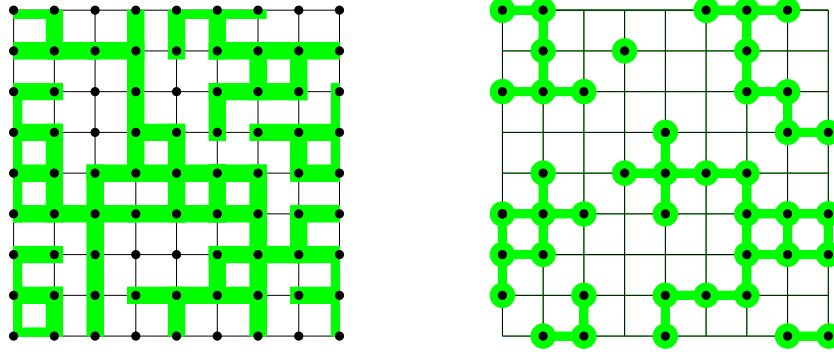


Abbildung 4.1: Vergleich von Bindungsperkolation (links) und Platzperkolation (rechts). In beiden Fällen beträgt die Besetzungswahrscheinlichkeit $p \approx 0.52$, was über der Perkolationschwelle für die Bindungsperkolation aber unter der für die Platzperkolation liegt. Daher tritt nur im ersten Fall ein das gesamte Gitter durchspannender Cluster auf.

sind. Dies führt zur Definition der in Kapitel 4.3 diskutierten sogenannten Quantenperkolationschwelle p_q , oberhalb derer erstmals ausgedehnte Zustände auftreten. Aufgrund der vollständigen Barrierewirkung der B -Atome sind für die Untersuchung des Lokalisierungsverhaltens der Wellenfunktion die kleinen A -Cluster, die keine Verbindung zum größten, unendlich ausgedehnten Cluster A_∞ haben, nicht von Bedeutung. Daher kann man die Betrachtung auf A_∞ beschränken. Für die Zustandsdichte ρ ergibt sich allerdings ein Unterschied, ob man nur den größten Cluster oder, wie meist in der Literatur [29, 44, 57, 58], alle A -Plätze berücksichtigt. So tragen Zustände, die auf einem isoliert liegenden A -Atom lokalisiert sind, im zweiten Fall zu $\rho(E = 0)$ bei, während sie bei Beschränkung auf A_∞ nicht berücksichtigt werden.

Zum Auffinden von A_∞ besetzt man zunächst das gesamte Gitter zufällig mit Atomen, wobei jeder Platz mit der Wahrscheinlichkeit p besetzt wird. Mittels des Algorithmus von Hoshen und Kopelman [26] werden danach zusammenhängende Cluster identifiziert und der größte unter ihnen ausgewählt. Reicht dieser nicht von einer Seite des Kristalls zur anderen, wird die Auswahl verworfen und eine neue Zufallsbelegung der Plätze ermittelt. Andernfalls wird die Matrix des Hamiltonoperators aufgestellt, mit der dann analog wie in Kapitel 3 verfahren wird. Die lokalen Potentiale aller zu A_∞ gehörenden Plätze wird in diesem Fall gleich null gewählt. Weiterhin ist zu bemerken, daß die regelmäßige Bandstruktur der Andersonmatrix durch die ungleichmäßige Berandung des Clusters zerstört wird. Zur Aufstellung der Matrix bieten sich je nach Rechnerarchitektur zwei Vorgehensweisen an. Während es auf cache-optimierten Rechnern, wie PCs sinnvoll ist, die Matrix von \hat{H} zu komprimieren, indem man die Zeilen und Spalten der nicht besetzten Plätze komplett herausstreicht, ist dies für Vektorrechner unter Umständen die schlechtere Alternative. Die Reduktion der Matrixdimension erkaufte man sich mit einer komplizierteren Struktur, bei der zusätzlich zu den $2d$ besetzten Nebendiagonalen an anderen Positionen Einträge ungleich null auftreten. Die dadurch nötig werdende indirekte Adressierung hebt auf Vektorrechnern den Vorteil der infolge der Kompression reduzierten Dimension der Matrix wieder auf.

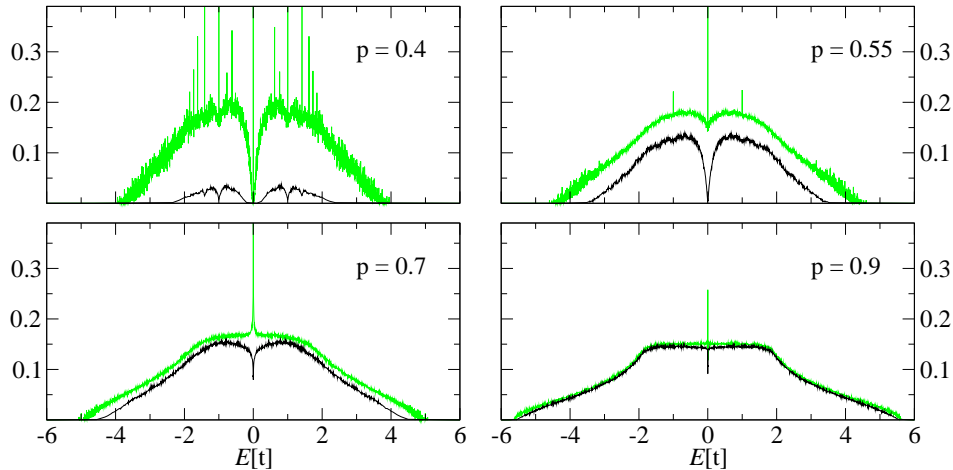


Abbildung 4.2: Mittlere Zustandsdichte ρ_{av} (—) und typische Zustandsdichte ρ_{ty} (—) für das dreidimensionale Perkolationsmodell auf einem 50^3 -Gitter mit Besetzungswahrscheinlichkeiten $p = 0.4, 0.55, 0.7, 0.9$. Berechnung mit 16384 Chebyshev-Momenten und Mittelung über $32 * 32$ Realisierungen.

4.1 Fragmentierung des Spektrums

Das zur Beschreibung des Anderson-Modells gut geeignete Konzept der Mobilitätskanten, die ausgedehnte von lokalisierten Zuständen trennen, kann auf das Perkolationsmodell nicht ohne Weiteres übertragen werden. Ähnlich wie im Anderson-Modell, wo der Bereich ausgedehnter Zustände mit zunehmender Unordnung W immer kleiner wird, zeigt sich dieses Verhalten hier mit abnehmendem p . Darüber hinaus treten jedoch noch weitere Effekte auf. So zeigt die mittlere Zustandsdichte bei vielen Energien scharfe Peaks mit unterschiedlichem spektralen Gewicht. Der am stärksten ausgeprägte Peak dieser Art findet sich genau im Bandzentrum (vgl. Abb. 4.2). Berechnet man $\rho_{av}(E)$ mit hoher Auflösung (etwa durch Verwendung von 16384 Chebyshev-Momenten), so lassen sich Peaks dieser Art auch bei einer ganzen Reihe weiterer Energien innerhalb des gesamten Bandes finden. Diese Energien variieren nicht zufällig von einem Ensemble zum nächsten, sondern treten reproduzierbar immer wieder an den gleichen Stellen auf. Eine Erklärung der Energien dieser Peaks findet sich in Kapitel 4.2. Für $p = 0.4$ tragen die drei ausgeprägtesten Peaks bei $E[t] = 0, 1, \sqrt{2}$ zur integrierten Zustandsdichte je etwa 10.9%, 0.7% und 0.1% bei, während das Gewicht der anderen unter 0.1% liegt. Eine Erhöhung der Besetzungswahrscheinlichkeit führt zu einer Abnahme der jeweiligen Gewichte, die darauf hindeutet, daß für diese Zustände Randeﬀekte von besonderer Bedeutung sind, deren Einfluß sich mit zunehmendem p verringert. Am deutlichsten sieht man die Abnahme des spektralen Gewichts am Peak im Bandzentrum. Dessen Gewicht nimmt von knapp 12% bei der klassischen Perkolationschwelle stetig auf $\frac{1}{N}$ für $p = 1$ ab. Der Grund, wieso diese speziellen Energien auch für die Diskussion der Lokalisierung der Wellenfunktion von Bedeutung sind, wird klar wenn man $\rho_{ty}(E)$ bei diesen Energien betrachtet. Das prinzipiell bei allen Peaks von $\rho_{av}(E)$ auftretende Verschwinden der

typischen Zustandsdichte kann aus numerischen Gründen nur für die Peaks mit hohem Gewicht aufgelöst werden (vgl. Abb. 4.2 links oben). Da eine Erhöhung von p zu einer Abnahme des Gewichts der Zustände im Bandzentrum führt, genügt die Auflösung ab einer gewissen Konzentration nicht mehr um das Verschwinden von ρ_{ty} sichtbar zu machen. Das Verschwinden der typischen Zustandsdichte legt in Analogie zum Anderson-Modell die Folgerung nahe, daß diese Zustände nicht ausgedehnt, sondern, wie bereits von Kirkpatrick und Eggarter [29] vermutet, in einem gewissen Sinne lokalisiert sind. Anhand des Peaks bei $E = 0$ zeigt sich, daß in unmittelbarer Nähe dieser speziellen Energie keine Zustände existieren und die mittlere Zustandsdichte hier auf null geht. In den bisherigen Veröffentlichungen wurde die Zustandsdichte mit einer relativ schlechten Energieauflösung berechnet, und die betrachteten Systeme waren meist klein. Daher wurde die Idee nicht weiter verfolgt, ob das bei $E = 0$ beobachtete Verhalten von ρ_{ty} auch bei anderen Energien vorliegt. Die Ergebnisse dieser Arbeit (vgl. Abb. 4.3) belegen diese Vermutung und es scheint so, als ob das Spektrum in zwei Arten von Zuständen fragmentiert: Lokalisierte, von Energielücken umgebene Zustände bei gewissen Energien einerseits und ausgedehnte Zustände dazwischen andererseits. Die Energielücken sind hierbei jedoch nur darauf zurückzuführen, daß die Zustandsdichte in diesem Bereich so klein ist, daß innerhalb des betrachteten Kristalls keine Zustände existieren.

4.2 Diskussion der speziellen Energien

Will man speziell die Energien und Zustände der stark gewichteten Peaks untersuchen, so ist es günstig, dies in der Nähe der klassischen Perkolationschwelle p_c durchzuführen, da ihr Gewicht dort maximal ist. In Abbildung 4.3 zeigen sich durch die Annäherung an p_c sowie die Verwendung einer enormen Anzahl von Mittelungen und Chebyshev-Momenten weitere Peaks von weniger großem Gewicht, die bisher in Abbildung 4.2 nicht zu identifizieren waren. Eine weitere Erhöhung der Auflösung und der Zahl der Realisierungen würde eine noch größere Anzahl solcher Strukturen sichtbar machen. Ansatzweise zeigt sich diese Tendenz bereits an den kleinen Zacken in der Kurve, die bei der hohen Anzahl von Mittelungen sonst nicht auftreten dürften. Es zeigt sich, daß diese speziellen Energien zu bestimmten geometrischen Konfigurationen zusammenhängender Gitterplätze gehören, die eine Wellenfunktion mit einer bestimmten charakteristischen Energie erlauben. Je kleiner p ist, desto vielfältiger sind die Möglichkeiten zum Cluster gehörende freie Enden einer gewissen Form zu finden. Bei großen Werten von p spielen diese Randeffekte kaum eine Rolle, da der Großteil der Gitterplätze im Inneren des Clusters eine regelmäßige Umgebung aus nächsten Nachbarn besitzt.

4.2.1 Zustände im Bandzentrum

Vergleicht man die aus exakter Diagonalisierung erhaltenen Wellenfunktionen für verschiedene Energien miteinander, so bestätigen sich die Vermutungen über die Besonderheit der Zustände bei den Energien der ausgeprägten Peaks (vgl. Abb. 4.4). Während die Wellenfunktion für eine beliebige, zufällig aus dem Spektrum ausgewählte Energie (hier $E = 0.4919t$) ausgedehnt ist und im Wesentlichen auf ganz A_∞ nichtver-

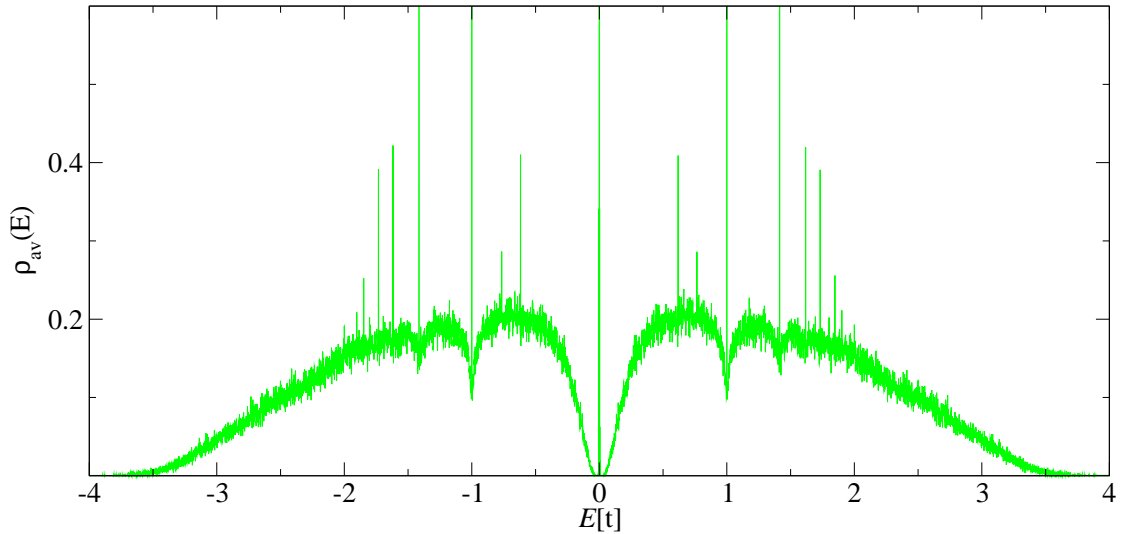


Abbildung 4.3: Hochaufgelöste Darstellung der mittleren Zustandsdichte ρ_{av} für das Perkolationsmodell auf einem 100^3 -Gitter bei einer Besetzungswahrscheinlichkeit $p = 0.33$, die knapp über der klassischen Perkolationschwelle liegt. Verwendung von 32768 Chebyshev-Momenten und Mittelung über je 100 zufällige delokalisierte Startvektoren bei 100 Clusterrealisierungen. Die Peaks mit höchstem Gewicht liegen (in absteigender Reihenfolge) bei $E[t] = 0, 1, \sqrt{2}, \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}), -\frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}), \sqrt{3}, \sqrt{2 - \sqrt{2}}, \sqrt{2 + \sqrt{2}}$ und dazu symmetrisch für $E < 0$.

schwindende Amplituden besitzt, ergibt sich für $E = 0$ ein völlig anderes Bild. Hier kommt es zur Ausbildung einer Art Schachbrettmusters, in dem sich Plätze mit verschwindender und endlicher Amplitude mit großer Regelmäßigkeit abwechseln. Diese Struktur wurde bereits von Kirkpatrick und Eggarter [29] zum größten Teil aufgeklärt.

Betrachtet man einen völlig von B -Atomen umgebenes A -Atom, so ist klar, daß ein an diesem Platz lokalisierter Zustand die Energie $E = 0$ besitzt. Da aufgrund der Beschränkung auf A_∞ solche Konfigurationen jedoch nicht in Betracht gezogen werden, stellt sich die Frage, ob man auch auf dem unendlich ausgedehnten Cluster auf einfache Weise Zustände konstruieren kann, deren Energie exakt gleich null ist. Tatsächlich läßt sich ein solcher Zustand für bestimmte Anordnungen von A - und B -Plätzen leicht konstruieren. Die in Abbildung 4.5 dargestellte Wellenfunktion verschwindet überall auf A_∞ außer auf den beiden mit $\pm \frac{1}{\sqrt{2}}$ gekennzeichneten Plätzen. Weiterhin wird ihr Eigenwert $E = 0$ nicht durch die sonstige Struktur von A_∞ beeinflußt. Die Lokalisierung auf nur zwei Gitterplätze ist hierbei die Konsequenz aus räumlicher Beschränkung durch B -Atome einerseits und destruktive Interferenz andererseits. Dadurch heben sich die Hüpfsterme der beiden zentralen Plätzen gerade auf und eine weitere Ausbreitung der Wellenfunktion wird verhindert. Durch die hohe Entartung für $E = 0$ kann man mittels Linearkombinati-

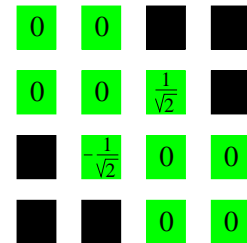


Abbildung 4.5: Beispiel eines Zustandes zu $E = 0$. Hierbei gehören die Plätze (■) zu A_∞ und (■) nicht.

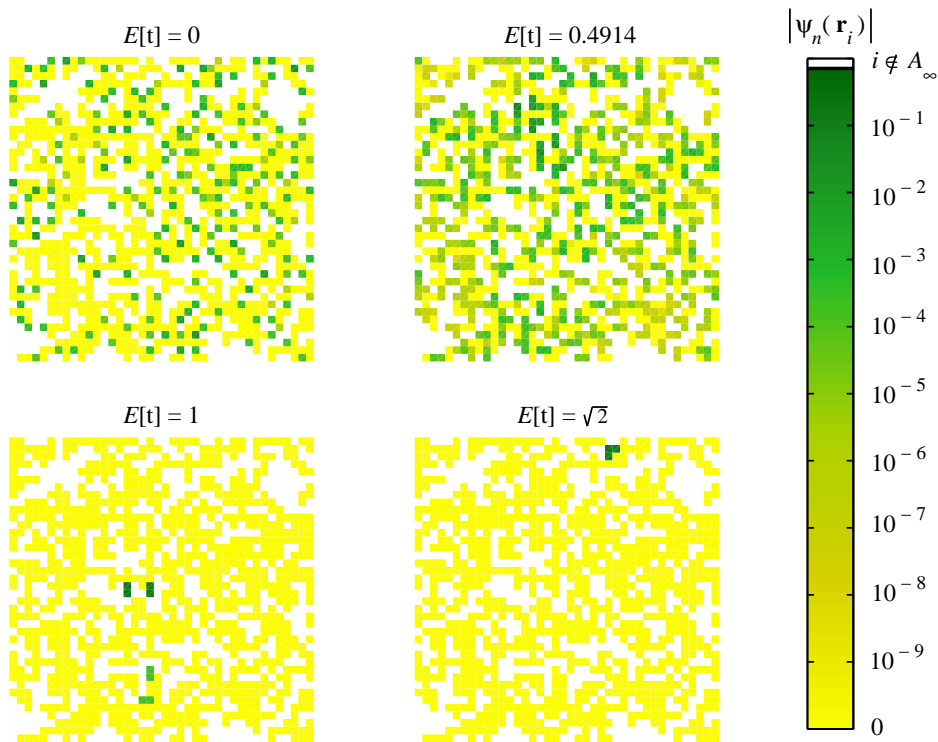


Abbildung 4.4: Darstellung des Amplitudenbetrags $|\psi_n(\mathbf{r}_i)|$ für vier charakteristische Zustände des Perkolationsmodells auf einem 41^2 -Gitter für die Energien $E[t] = 0, 0.4914, 1, \sqrt{2}$. Mit weiß sind diejenigen Plätze \mathbf{r}_i gekennzeichnet, die nicht zum betrachteten, das System durchspannenden Cluster A_∞ gehören. Die Codierung der Amplituden erfolgte mittels logarithmischer Farbskala, wobei alle Werte kleiner als 10^{-10} auf null abgebildet wurden.

on vieler solcher Zustände ein Muster konstruieren, das den gesamten Cluster wie ein Schachbrett überspannt. Eine interessante Frage, die sich in diesem Zusammenhang stellt ist, welche Auswirkungen geometrische Einschränkungen, z. B. ungerade Kantenlängen bei periodischen Randbedingungen, auf die Ausbildung des Schachbrettmusters haben. Ergebnisse numerischer Simulationen ergeben für diesen Fall, daß sich dann ein oder zwei große, voneinander unabhängige Schachbretter ausbilden, die an den Stellen, wo sie in Berührung kommen durch einige Plätze mit verschwindender Amplitude getrennt sind. Ein weiteres Phänomen besteht darin, daß neben den ausgedehnten Schachbrettstrukturen gleichzeitig an einigen Rändern des Clusters manchmal Bereiche existieren, deren Amplitudenverteilung deutlich von dem sonst vorherrschenden Muster abweicht. Diese von Chayes et al. [8] als molekulare Zustände bezeichneten Konfigurationen ähneln in gewisser Weise denen in Abbildung 4.5, nur daß hier die nichtverschwindenden Amplituden nicht nur auf zwei Plätze beschränkt sind. Vielmehr liegen hier zwei zueinander symmetrische Gebiete vor, die lediglich in einem gemeinsamen Punkt eine Verbindung mit A_∞ besitzen. In Analogie zum Fall nur zweier Plätze ergibt sich eine Auslöschung der Wellenfunktion außerhalb dieser Region. Die Symmetrie der Teilcluster ist jedoch

keine zwingende Voraussetzung und in Tabelle 4.1 finden sich einige Beispiele für andere Cluster, auf denen ebenfalls lokalisierte Wellenfunktionen zu $E = 0$ möglich sind.

4.2.2 Betrachtung von Teilclustern

Führt man den Gedanken der molekularen Zustände weiter, so kann man durch geschickte Wahl bestimmter Konfigurationen von A -Atomen auch lokalisierte Zustände zu anderen Eigenwerten konstruieren. Hierzu wählt man einen kleinen Teilcluster von A_∞ aus und fordert, daß alle umgebenden Plätze entweder von B -Atomen besetzt sind, oder falls sie zu A_∞ gehören verschwindende Amplitude haben (vgl. Abb. 4.4). Das so entstehende Teilsystem der \tilde{N} Plätze endlicher Amplitude wird durch eine $\tilde{N} \times \tilde{N}$ Matrix beschrieben, deren Einträge die Verbindungen innerhalb des Teilclusters wieder spiegeln. Diagonalisiert man diese Matrix, so erhält man in Form ihrer Eigenwerte die Energien, die den ausgeprägten Peaks in Abbildung 4.3 entsprechen. Eine Zusammenfassung der wahrscheinlichsten Konfigurationen samt zugehöriger Eigenwerte liefert Tabelle 4.1. Die unterschiedlichen Gewichte der Peaks sind aus dieser Überlegung heraus auch verständlich. Da das Auftreten einfacher Konfigurationen wesentlich häufiger ist als das komplizierterer geometrischer Objekte, dominieren die Eigenwerte 1 und $\sqrt{2}$, die den wahrscheinlichsten Teilclustern entsprechen. Das kombinatorische Problem der Bestimmung der Wahrscheinlichkeiten der verschiedenen Konfigurationen ist für den Fall vollständig isolierter Cluster in der Literatur behandelt [13, 29]. Im Fall einer Zugehörigkeit des betrachteten Teilclusters zu A_∞ ergeben sich durch die Art und Position der Verbindung Abweichungen von diesen Werten.

Da die Isolation eines Teilclusters von A_∞ durch Plätze mit verschwindender Amplitude umso leichter möglich ist, je mehr umgebende Plätze nicht zum Cluster gehören, nimmt das Gewicht der Peaks mit abnehmendem p bis p_c immer mehr zu. Der Peak bei $E = 0$ ist von einem Anwachsen von p am wenigsten betroffen, da das Schachbrett auch im Inneren des Clusters eine relativ wahrscheinliche Konfiguration ist. Die Wahrscheinlichkeit im Inneren des räumlich isotropen Clusters eine spezielle Konfiguration zu finden, die zu einer gewissen Energie gehört, ist jedoch für keine der Energien signifikant höher als für die anderen, was zu einem Verschwinden der Peaks und einem glatten Verlauf der Zustandsdichte bei größeren Werten von p führt. Durch diese Vorstellung wird klar, daß die kleinen, sich in Abbildung 4.3 kaum aus dem Verlauf von ρ abhebenden Peaks ebenfalls einer bestimmten geometrischen Anordnung entsprechen, die allerdings so selten ist, daß daraus nur ein verhältnismäßig geringes Gewicht resultiert. Bei ausgedehnten Zuständen fehlt die Abgrenzung eines endlichen Clusters durch Plätze verschwindender Amplitude, und ganz A_∞ ist aktiv. Durch die große Anzahl beteiligter Plätze ergeben sich für den genauen Wert der Energie wesentlich mehr Möglichkeiten als für Zustände, die nur auf beispielsweise drei Plätze beschränkt sind, was nur die Eigenwerte $E[t] = 0, \pm\sqrt{2}$ zuläßt. Insgesamt besteht die Zustandsdichte für das Perkulationsmodell aus einem Kontinuum von Energien zu delokalisierten Zuständen, zwischen denen bei speziellen Werten von E , die endlichen Teilclustern entsprechen, lokalisierte Zustände liegen. Berücksichtigt man auch immer größere und unwahrscheinlichere, allerdings trotzdem noch endliche Teilcluster, so wird klar, daß die zu lokalisierten Zuständen gehörenden Energien eine dichte


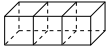

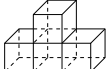
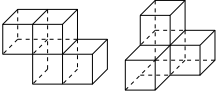
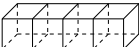
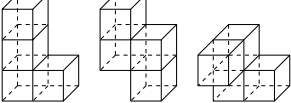

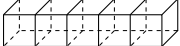
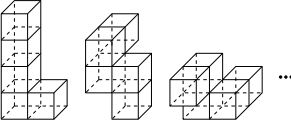
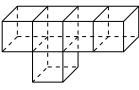
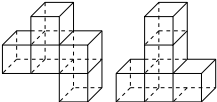
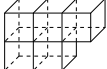

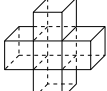

Cluster	äquivalente Cluster	darstellende Matrix	Eigenwerte
		$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	± 1
		$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$0, \pm\sqrt{2}$
		$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$0, 0, \pm\sqrt{3}$
		$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\frac{1}{2}(\pm 1 \pm \sqrt{5})$
		$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$0, 0, \pm 2$
		$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$0, \pm 1, \pm\sqrt{3}$
		$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$0, \pm\sqrt{2 \pm \sqrt{2}}$
		$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$0, \pm\frac{1}{2}\sqrt{10 \pm 2\sqrt{17}}$
		$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$0, 0, 0, \pm 2$

Tabelle 4.1: Mögliche Konfigurationen offener Enden des Clusters und damit verbundene mögliche Eigenwerte. Die Verbindung zum Hauptteil des zusammenhängenden Clusters A_∞ erfolgt an beliebiger Stelle durch einen oder mehrere Plätze von A_∞ mit verschwindender Amplitude.

Teilmenge bilden. Dieser Widerspruch gegen das Konzept der Mobilitätskante ist hier aufgrund der Symmetrie des Problems möglich. Beim Anderson-Modell ist eine Koexistenz lokalisierter und ausgedehnter Zustände bei der gleichen Energie nicht möglich, da diese sonst mischen und ausgedehnte Zustände ergeben [9]. Für das Perkolationsmodell kann man aufgrund der speziellen Struktur des Clusters nicht lokalisierte Zustände konstruieren, die nicht mit den lokalisierten mischen. So lassen sich im Fall der Schachbrett-Zustände die Plätze nichtverschwindender Amplitude nicht auf einen endlichen Teilbereich des Clusters einschränken, wodurch die Bezeichnung ausgedehnt gerechtfertigt ist. Aus Orthogonalitätsgründen mischen diese nicht mit lokalisierten Zuständen [52].

4.3 Quantenperkolationsschwelle

Im Fall der klassischen Perkolation ist die Existenz eines unendlich ausgedehnten Clusters hinreichend und notwendig für einen möglichen Transport. Geht man zum quantenmechanischen Fall über, so ergeben sich zwei weitere Aspekte, die bei Transportvorgängen zu berücksichtigen sind: Einerseits kann durch Tunnelprozesse auch ein klassisch nicht perkolierender Cluster stromtragende Zustände ermöglichen, wodurch die Quantenperkolationsschwelle p_q unterhalb der klassischen liegen würde. Andererseits treten bei einem unendlich ausgedehnten Cluster durch Streuung an den Clusterrändern Interferenzeffekte auf, die zu einer Lokalisierung der Wellenfunktion führen können. Welcher der beiden Effekte dominiert war in Verbindung mit der Frage nach Existenz und Lage der Quantenperkolationsschwelle lange Zeit eine offene Frage. Durch Betrachtung der typischen Zustandsdichte ist es möglich, diese Frage zu klären und die Quantenperkolationsschwelle p_q zu bestimmen. Es zeigt sich, daß Tunneleffekte hierbei keine Rolle spielen und daß unterhalb der klassischen Perkolationsschwelle keinerlei Transport auftritt. Im Gegensatz dazu ist der Einfluß der Interferenzeffekte deutlich bemerkbar, da der das System durchspannende Cluster A_∞ zwar schon für $p > p_c$ mit Wahrscheinlichkeit eins existiert, allerdings endliche Werte von ρ_{ty} erst für $p > p_q > p_c$ auftreten. Die Besetzungswahrscheinlichkeit, die für das Auftreten ausgedehnter Zustände nötig ist, hängt von E ab, wobei in den Bereichen um $E \approx 0.5t$ und $E \approx 1.5t$ die kleinsten Werte von p auftreten (vgl. Abb 4.6). Der dort erhaltene Wert stimmt in etwa mit den in der Literatur [34, 58] angegebenen Werten für die Quantenperkolationsschwelle $p_q \approx 0.44$ überein. Wie bei den anderen Modellen ist aufgrund des stetigen Verlaufs der typischen Zustandsdichte keine genaue Festlegung auf einen bestimmten Wert möglich. Allerdings bestätigt das Ergebnis die Vermutung, daß im Bandzentrum erst für $p = 1$ ausgedehnte Zustände vorliegen und für kleinere Werte von p Lokalisierung vorliegt. Die Existenz lokalisierter Zustände für $p > p_q$ liegt auch bei $E = t$ vor. Dies wirft die Frage auf, ob sich hier der Bereich lokalisierter Zustände bei Verwendung höherer Auflösung und größerer Systeme bis $p = 1$ erstreckt, wie im Fall $E = 0$. Weiterhin sollte dieser Effekt dann, wenngleich schwächer, auch für die anderen speziellen Energien auftreten.

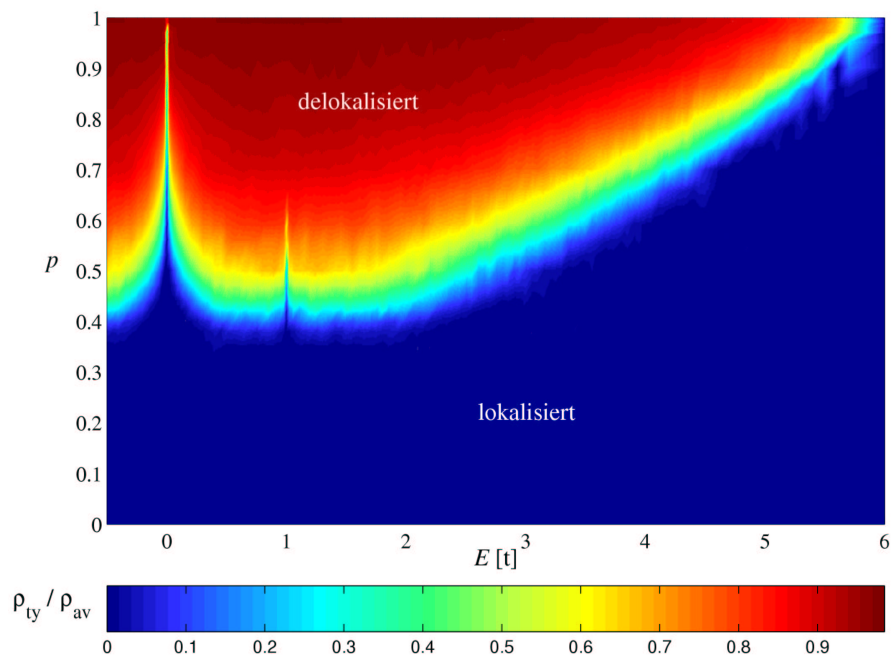


Abbildung 4.6: Farbcodierte Darstellung der auf die mittlere Zustandsdichte ρ_{av} normierten typischen Zustandsdichte ρ_{ty} in der Konzentrations-Energie-Ebene für das Quantenperkolationsmodell. Die Berechnung der lokalen Zustandsdichte erfolgte unter Verwendung von 16384 Chebyshev-Momenten und Mittelung über $32 * 32$ Realisierungen auf einem 100^3 -Gitter für Konzentrationen $p \leq 0.5$ bzw. auf einem 50^3 -Gitter darüber.

5 Korrelierte Unordnung

Als letzten im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Test für die typischen Zustandsdichte als Lokalisierungskriterium soll im Folgenden ein weiterer Spezialfall des Anderson-Modells betrachtet werden, nämlich der, in dem zwischen den Platzenergien eine gewisse Korrelation vorliegt. Während es für die bisher betrachtete unkorrelierte Unordnung im eindimensionalen Fall strikt bewiesen ist, daß selbst infinitesimal kleine Unordnung zu vollständiger Lokalisierung aller Zustände führt, kann dieser Beweis nicht auf den Fall korrelierter Unordnung erweitert werden. Für letzteren wurden in der Literatur mehrere Beispiele angeführt, wo im thermodynamischen Limes ausgedehnte Zustände vorliegen. Die einfachste Möglichkeit ausgedehnte Zustände zu konstruieren besteht darin – ähnlich wie in Kapitel 4 – eine binäre Verteilung zweier Platzenergien anzunehmen, wobei die eine davon jedoch jeweils Einheiten von je zwei Plätzen (Dimeren) zugeordnet wird [16, 51]. Die hier auftretenden ausgedehnten Zustände liegen jedoch nur bei speziellen, über das Spektrum verteilt liegenden Energien vor, die sich aufgrund von Resonanzmoden ergeben, die durch die Dimerstruktur keiner Rückstreuung unterworfen sind. Da diese Energien nur auf einer diskreten Menge auftreten, liegt für dieses Modell im thermodynamischen Limes eine Abfolge lokalisierter und ausgedehnter Zustände vor. Sucht man nach einem System mit einem zusammenhängenden Bereich ausgedehnter Zustände ähnlich dem Fall im dreidimensionalen Anderson-Modell, so ist es nötig, für die Platzenergien eine Verteilung mit langreichweitigen Korrelationen zu konstruieren [14]. Viele in der Natur vorkommenden Zufallsfolgen mit solchen Korrelationen zeichnen sich dadurch aus, daß die innerhalb der Folge auftretenden Fluktuationen keine charakteristische Längenskala besitzen. Für die Fourier-Transformierte $S(k)$ der Zweipunktkorrelationsfunktion $\langle w_n w_m \rangle$ der Platzenergien gilt daher in etwa die algebraische Abhängigkeit $S(k) \sim k^{-\alpha}$, wobei die Fourier-Variable k als das Inverse der Wellenlänge typischer in den Platzenergien auftretenden Modulationen aufgefaßt werden kann. Der Korrelationsparameter α kontrolliert, wieviel zusätzliche „Information“ in der Sequenz der Platzenergien vorliegt. Während sich im Fall $\alpha = 0$ das Anderson-Modell mit gewöhnlicher, unkorrelierter Unordnung als Grenzfall ergibt, entspricht die Abfolge der w_j für $\alpha = 2$ der Bewegung eines Brownschen Teilchens. Die Konstruktion der Platzenergien w_j erfolgt gemäß

$$w_j = \sum_{k=1}^{N/2} \sqrt{k^{-\alpha} \left(\frac{2\pi}{N}\right)^{1-\alpha}} \cos\left(\frac{2\pi j k}{N} + \phi_k\right) \quad , \quad (5.1)$$

wobei N die Anzahl der Plätze des eindimensionalen Systems ist. Die $\frac{N}{2}$ Zufallsphasen ϕ_k sind gleichmäßig über das Intervall $[0, 2\pi]$ verteilt. Die sich daraus ergebende Folge der w_j wird zur besseren Vergleichbarkeit verschiedener Realisierungen auf $\langle w_n \rangle = 0$ und $\Delta w_n = \sqrt{\langle w_n^2 \rangle - \langle w_n \rangle^2} = 1$ normiert. Charakteristische Sequenzen von Platzenergien w_j

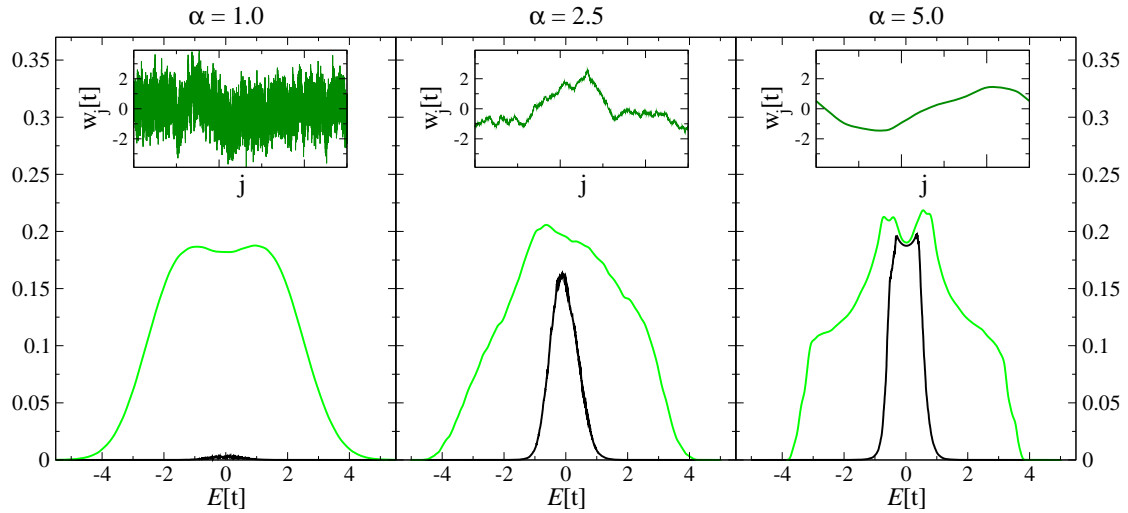


Abbildung 5.1: Hauptbilder: Mittlere (—) und typische (—) Zustandsdichte für das Anderson-Modell mit korrelierter Unordnung auf einer linearen Kette mit 125000 Plätzen für verschiedene Werte des Korrelationsparameter α . Hierbei wurde die lokale Zustandsdichte an je 32 Plätzen für 32 Realisierungen der Unordnung mit 8192 Chebyshev-Momenten sowie die mittlere Zustandsdichte mit 256 Momenten unter Verwendung von 32×32 delokalisierten Startvektoren berechnet. In den Einschüben sind für den jeweiligen Wert von α charakteristische Verteilungen der Platzenergien w_j dargestellt.

für verschiedene Korrelationsparameter α sind in den Einschüben von Abbildung 5.1 gezeigt. Die durch (5.1) generierten Verteilungen haben im Gegensatz zu in der Natur vorkommenden Sequenzen ein wohldefiniertes algebraisches Fourier-Spektrum, wohingegen bei letzteren noch ein zusätzlicher Rauschanteil vorhanden ist. Es zeigt sich jedoch, daß das Herausfiltern des Rauschens keinen Einfluß auf die wesentlichen Effekte der Korrelation hat [14]. Nach Generierung und Normierung der Platzenergien kann wie in den Kapiteln 3 und 4 vorgegangen werden um die typische und mittlere Zustandsdichte zu berechnen und somit Aussagen über die Lokalisierung treffen zu können. In Abbildung 5.1 sind die mittlere und typische Zustandsdichte für verschiedene Werte des Korrelationsparameters α dargestellt. Bis zu Werten von $\alpha \approx 1$ wirkt sich der Effekt der Korrelation noch nicht deutlich aus, was zu einer fast weißen Verteilung der w_j und einem Verschwinden der typischen Zustandsdichte ρ_{ty} führt. Mit zunehmendem α wird die Folge der w_j immer glatter und um das Bandzentrum entsteht ein Bereich, in dem ρ_{ty} auf einem endlichen Wert bleibt. Dieses Auftreten eines geschlossenen Bereiches mit nichtverschwindender typischer Zustandsdichte deutet auf die Existenz eines Regimes ausgedehnter Zustände hin. Diese Zustände sind nicht wie im oben angeführten Modell auf die diskreten Resonanzenergien der Dimere beschränkt, sondern decken ein zusammenhängendes Energieintervall ab. Insofern verursachen die langreichweitigen Korrelationen die Aufspaltung der Zustände in zwei Klassen, die auch hier analog zum Fall des dreidimensionalen Anderson-Modells durch Mobilitätskanten voneinander getrennt sind. In Abbildung 5.2 ist diese Trennung durch eine Auftragung der auf die

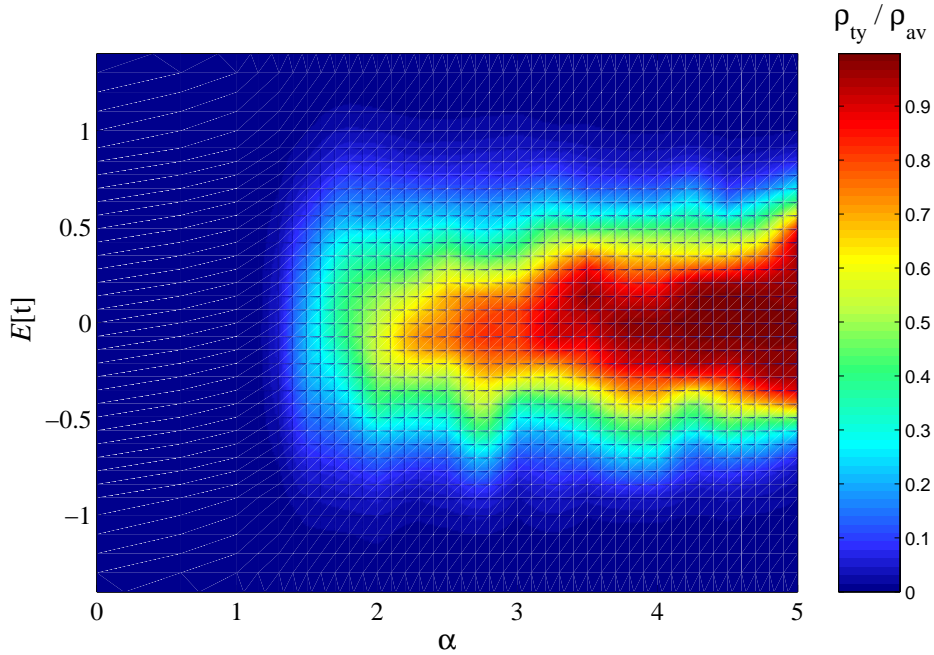


Abbildung 5.2: Auf die mittlere Zustandsdichte ρ_{av} normierte typische Zustandsdichte ρ_{ty} in Abhängigkeit von der Energie und dem Korrelationsparameter α für eine lineares System mit 125000 Plätzen. Die Berechnung der lokalen Zustandsdichte an je 32 Plätzen für 32 Realisierungen der Unordnung erfolgte unter Verwendung von 32768 Chebyshev-Momenten, wohingegen für die mittlere Zustandsdichte lediglich 256 Momente und $32 \cdot 32$ delokalisierte Startvektoren verwendet wurden.

mittlere Zustandsdichte normierten typischen Zustandsdichte in der E - α -Ebene dargestellt. Auch hier stehen die dunkelblauen Bereiche verschwindender ρ_{ty} für lokalisierte Zustände, während die Zustände für große Werte von $\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}}$ delokalisiert sind. Wie bereits in den beiden vorherigen Kapiteln ist es im Rahmen dieser Methode schwierig, den genauen Wert der normierten typischen Zustandsdichte festzulegen, der die Lage der Mobilitätskante bestimmt. Auch ein Vergleich mit den bisher in der Literatur [14] vorhandenen, durch Transfermatrixmethoden erhaltenen Werten bietet hier keinen Aufschluß, da sich die dort angegebenen Werte nicht auf ein Ensemble von Platzenergien sondern auf eine Realisierung beziehen. So ist die dort erhaltene Asymmetrie des Phasendiagramms auf die zufällige Wahl der w_j zurückzuführen. Die Tatsache, daß auch in Abbildung 5.2 eine gewisse Asymmetrie vorliegt (z. B. bei $\alpha = 2.75$), beruht darauf, daß für die hier betrachtete korrelierte Unordnung offenbar wesentlich mehr Mittelungen nötig sind als für die unkorrelierte Unordnung des Anderson-Modells. Ein anschaulicher Grund dafür liegt im Fehlen der hochfrequenten Komponenten des Rauschens der Platzenergien, und den dadurch bedingten glatteren, nur von langwelligen Oszillationen überlagerten Verlauf der w_j . Versucht man trotzdem einen Vergleich zwischen den aus einem Konfigurationsmittel gewonnenen Werten hier und dem Phasendiagramm einer speziellen Realisierung in [14], so stimmen diese am besten im Auftreten delokaliser-

ter Zustände für $\alpha \gtrsim 2$ überein. Nimmt man dies als Maßstab, so ergibt sich für den die Mobilitätskante festlegenden Wert $\frac{\rho_{ty}}{\rho_{av}} \approx 0.5$. Dieser stimmt in etwa mit dem Wert überein, den man für das Perkolationsmodell erhalten hat, liegt aber wesentlich höher als der beim Anderson-Modell ohne Unordnung. Als mögliche Erklärung hierfür kommt die schon erwähnte Abhängigkeit des Wertes der typischen Zustandsdichte von der Anzahl der Chebyshev-Momente einerseits sowie der Gittergröße andererseits in Betracht. Aufgrund der unterschiedlichen betrachteten Systeme ist daher nicht von einer Übereinstimmung auszugehen. Das mögliche Auftreten ausgedehnter Zustände in $1d$ kann sowohl für technische Anwendungen genutzt werden, als auch zur Erklärung biologischer Phänomene beitragen. So sind für Polymerketten, in denen diese Art der Unordnung vorliegt ungewöhnliche Transporteigenschaften zu erwarten, was von technologischen Interesse sein kann. Ein in DNA-Molekülen auftretendes Phänomen, daß je nach Art der betrachteten Sequenz isolierendes oder in gewissen Grenzen leitendes Verhalten auftritt, kann auch durch Korrelationseffekte der Unordnung erklärt werden [7]. Es wurde darauf hingewiesen [7], daß die in der Natur auftretenden Korrelationsstärken nicht ausreichen, um zu einer makroskopischen Leitfähigkeit zu führen, allerdings treten gegenüber unkorrelierten Zufallssequenzen Steigerungen der Lokalisierungslänge um ein bis zwei Größenordnungen auf. Auf diese Weise ist es für Elektronen möglich, sich über Entfernungen von etwa 300 Nukleotiden (in einigen Fällen sogar mehr als 1000) zu bewegen, was Ladungstransport auf kurze Entfernungen ($\lesssim 1\mu\text{m}$) ermöglicht, der als ein möglicher Reparaturmechanismus von Mutationen innerhalb der DNA angeführt wird [7].

Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war es, in der Literatur diskutierte Lokalisierungskriterien für die elektronische Wellenfunktion in ungeordneten Systemen mit den Resultaten eines neuen, auf der Berechnung der typischen Zustandsdichte basierenden Kriteriums zu vergleichen. Die Charakterisierung lokalisierter Zustände über das Verschwinden der typischen Zustandsdichte hat sich hierbei als im selben Maße zuverlässig erwiesen wie mittels endlicher Lokalisierungslänge, verschwindender dc-Leitfähigkeit oder selbst im thermodynamischen Limes endlicher inverser Partizipationszahl. Im Prinzip ermöglichen alle diese Kriterien eine scharfe Unterscheidung zwischen ausgedehnten und lokalisierten Zuständen. Allerdings ergeben sich bei der numerischen Umsetzung der Lokalisierungskriterien Probleme, die es unmöglich machen, die Grenzlinie zwischen lokalisierten und ausgedehnten Zuständen exakt zu bestimmen. Im Rahmen der auf exakter Diagonalisierung und Verwendung Greenscher Funktionen basierenden Methoden kann die kritische Unordnung infolge der endlichen Größe der betrachteten Systeme nicht genauer als auf $\pm 0.5t$ bestimmt werden. Es ist gelungen, eine ähnliche Genauigkeit zu erreichen, indem man die mittels der Polynomkern-Methode berechnete typische Zustandsdichte untersucht. Dabei hängt die Genauigkeit der Abschätzung sowohl von der Systemgröße als auch von der verwendeten Momentenzahl ab. Der große Vorteil einer verschwindenden typischen Zustandsdichte als Lokalisierungskriterium besteht in der Anwendbarkeit auf ungeordnete Systeme mit Wechselwirkung.

Durch Auswertung der verschiedenen Lokalisierungskriterien im Rahmen der oben erwähnten Methoden wurden für das Anderson-Modell die in der Literatur als gesichert geltenden Resultate – Lokalisierung für beliebig schwache Unordnung in $1d$ und $2d$, bzw. Anderson-Übergang zwischen lokalisierter und delokalierter Phase bei $W_c \approx 16.5t$ in $3d$ – reproduziert. Dabei hat sich jedoch gezeigt, daß das verwendete Momentenverfahren numerisch relativ aufwendig ist: So sind für die Berechnung der typischen Zustandsdichte mehrere tausend Chebyshev-Momente nötig. Durch die Möglichkeit, diese ausschließlich durch Sparse-Matrix-Vektor-Multiplikationen zu gewinnen, ist es im Rahmen dieser Methode trotzdem möglich, selbst auf einem PC, Systeme mit Größen bis zu 100^3 Plätzen oder mehr zu untersuchen.

Nach Kalibrierung der Polynomkern-Methode zur Berechnung der typischen Zustandsdichte am Anderson-Modell, wurde die Anwendbarkeit des Verschwindens der typischen Zustandsdichte als Lokalisierungskriterium für weitere Modelle getestet. Für das Quantenperkolationsmodell als Modell einer zweikomponentigen Legierung bestätigen die Ergebnisse die vermutete Existenz der Quantenperkolationsschwelle oberhalb der klassischen Perkolationschwelle. Es hat sich gezeigt, daß es im Quantenperkolationsmodell anders als beim Anderson-Modell keine Mobilitätskanten gibt, die einen Bereich delocalisierter Zustände im Bandzentrum energetisch von den lokalisierten Zuständen an den

Bandkanten trennen. Vielmehr fragmentiert das Spektrum hier in diese beiden Klassen von Zuständen. Die zu speziellen Energiewerten gehörigen lokalisierten Zustände wurden untersucht und klassifiziert. Neben den über das gesamte Band verteilten Zuständen, bei denen sich die nichtverschwindenden Amplituden der Wellenfunktion auf einen kleinen Teilcluster beschränken, ergab sich für die Zustände im Bandzentrum eine „Schachbrettstruktur“ aus Plätzen mit endlicher und verschwindender Amplitude der Wellenfunktion.

In der Biophysik werden für Transportvorgänge, z. B. in DNA-Ketten, Modelle mit korrelierter Unordnung diskutiert. Auch für diese Modelle kann das Verschwinden der typischen Zustandsdichte als Lokalisierungskriterium verwendet werden. Im Gegensatz zum unkorrelierten Anderson-Modell zeigt sich bei Anwesenheit langreichweitiger Korrelationen zwischen den Werten der lokalen Potentiale, daß auch in $1d$ ab einer gewissen Korrelationsstärke ein Bereich delokalisierte Zustände im Bandzentrum vorliegt. Zusammenfassend kann eingeschätzt werden, daß das Verschwinden der typischen Zustandsdichte gut zur Beschreibung des unordnungsinduzierten Metall-Isolator-Übergangs in wechselwirkungsfreien Systemen geeignet ist. Hierbei stellt die Polynomkern-Methode eine effektive Berechnungsmethode für die typische Zustandsdichte dar. Die Bedeutung des Verschwindens der typischen Zustandsdichte als Lokalisierungskriterium ergibt sich daraus, daß dieses Kriterium auch auf wechselwirkende Systeme anwendbar ist. Erste Ansätze hierfür existieren bereits im Rahmen der statistischen dynamischen Molekularfeldnäherung für das Anderson-Holstein-Modell.

A Herleitung der Formel für die optische Leitfähigkeit

Um im Kubo-Formalismus eine Formel für die optische Leitfähigkeit herzuleiten, geht man vom Prinzip der linearen Antworttheorie aus. Hierbei ist die Reaktion des Festkörpers auf eine Störung in Form eines von außen angelegten elektromagnetischen Feldes \mathbf{E} zu bestimmen, wobei es bei Beschränkung auf kleine Felder genügt, Terme zu berücksichtigen, die von 1. Ordnung in der Störung sind. Der Effekt dieses äußeren Feldes auf den Hamiltonoperator eines Elektrons mit der Ladung $q = -e$ wird durch das Prinzip minimaler Kopplung

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{A.1})$$

mit dem Vektorpotential \mathbf{A} und einem zusätzlichen Term $e\Phi$ für das skalare Potential beschrieben. Es ist nunmehr

$$\hat{H}^{tot} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 - e\Phi + V(\mathbf{r}) \quad , \quad (\text{A.2})$$

wobei man durch Ausnutzen der Eichfreiheit noch $\Phi \equiv 0$ wählen kann. Im Formalismus der 2. Quantisierung ergeben sich die Hüpfmatrixelemente t_{kl} des neuen Hamiltonoperators (A.2) in einer Orthonormalbasis aus Wannierfunktionen $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m)$ als

$$t_{kl} = \int d^3r [w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k)]^* \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \right] w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) \quad , \quad (\text{A.3})$$

wobei der Stern * für komplexe Konjugation steht, und m der Gitterplatz ist, an dem die Wannierfunktion $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m)$ zentriert ist. Für beliebige komplexe Funktionen $\lambda(\mathbf{r})$ mit Dimension einer Ladung ist diese Darstellung äquivalent zu

$$t_{kl} = \int d^3r \left[w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) e^{i\frac{e}{\hbar c}\lambda} \right]^* \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}(\mathbf{A} - \nabla\lambda) \right)^2 + V(\mathbf{r}) \right] e^{i\frac{e}{\hbar c}\lambda} w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) \quad . \quad (\text{A.4})$$

Durch die sogenannte Peierls-Substitution [25], einer geschickten Redefinition der Wannierfunktionen $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m)$ verbunden mit geeigneter Wahl der freien Funktion $\lambda(\mathbf{r})$ als

$$\tilde{w}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) := e^{i\frac{e}{\hbar c}\lambda(\mathbf{r})} w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) \quad , \quad (\text{A.5})$$

$$\lambda(\mathbf{r}) := \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \langle \mathbf{A}(\mathbf{r}'), d\mathbf{r}' \rangle \quad , \quad (\text{A.6})$$

zeigt sich, daß die Darstellung der Hüpfmatrixelemente die gleiche Form annimmt wie in Abwesenheit eines äußeren Feldes:

$$t_{kl} = \int d^3r [\tilde{w}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k)]^* \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \tilde{w}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) \quad . \quad (\text{A.7})$$

Diese Eichtransformation ermöglicht es, den Effekt des Vektorpotentials durch die Einführung der Peierls-Phase $\frac{e}{\hbar c}\lambda$ in den neuen Wannierfunktionen formal zu eliminieren. Im Rahmen der in dieser Arbeit verwendeten Tight-binding-Näherung ist aufgrund der starken Lokalisierung der Wannierfunktion $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m)$ am Gitterplatz m die Näherung

$$\tilde{w}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) \approx e^{i\frac{e}{\hbar c}\lambda(\mathbf{r}_m)} w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_m) \quad (\text{A.8})$$

gerechtfertigt. Die von \mathbf{r} unabhängigen Peierls-Phasen können aus dem Integral herausgezogen werden, wodurch der Integrand dann identisch zu dem des feldfreien Falles wird. Bezeichnet man in Analogie dazu den Wert des verbleibenden Integrals für nächste Nachbarplätze mit t_0 und das lokale Potential mit w_j , so ergibt sich für den Hamiltonoperator (A.2) in zweiter Quantisierung:

$$\hat{H}^{tot} = \sum_{j=1}^N w_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j + t_0 \sum_{\langle kl \rangle} e^{-i\frac{e}{\hbar c}(\lambda(\mathbf{r}_k) - \lambda(\mathbf{r}_l))} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_l \quad . \quad (\text{A.9})$$

Aufgrund der gewählten Eichung $\Phi \equiv 0$ gilt zwischen dem elektrischen Feld \mathbf{E} und dem Vektorpotential \mathbf{A} der Zusammenhang

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \partial_t \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad . \quad (\text{A.10})$$

Betrachtet man im weiteren ein räumlich homogenes elektrisches Feld in x -Richtung, so wird dieses durch ein Vektorpotential von der Form $\mathbf{A} = A(t)\mathbf{e}_x$ beschrieben. Damit folgt aus (A.6), daß alle die Peierls-Phasen verschwinden, für welche die Gitterplätze k und l die gleiche x -Komponente besitzen. Da wegen der Tight-binding-Näherung k und l nächste Nachbarn sein müssen, ergibt sich dann für die beiden von null verschiedenen Terme

$$\frac{e}{\hbar c}(\lambda(\mathbf{r}_k) - \lambda(\mathbf{r}_l)) = \frac{e}{\hbar c} \int_{\mathbf{r}_l}^{\mathbf{r}_k} A dx = \pm \frac{e}{\hbar c} Aa \quad , \quad (\text{A.11})$$

wobei mit a die Gitterkonstante bezeichnet ist, und das Gitter am Rand periodisch fortgesetzt wird. Damit läßt sich der Hamiltonoperator für diese Feldkonfiguration darstellen als

$$\hat{H}^{tot} = \sum_{j=1}^N w_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j + t_0 \sum_{\langle kl \rangle^{y,z}} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_l + t_0 \sum_{j=1}^N \left(e^{\frac{iea}{\hbar c} A} \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1(x)} + e^{-\frac{iea}{\hbar c} A} \hat{c}_{j+1(x)}^\dagger \hat{c}_j \right) \quad , \quad (\text{A.12})$$

wobei sich die Summation $\langle kl \rangle^{y,z}$ über nächste Nachbarn in y - und z -Richtung erstreckt, und die Plätze \mathbf{r}_j und $\mathbf{r}_{j+1(x)}$ nächste Nachbarn in x -Richtung bezeichnen. Um die

Leitfähigkeit σ des Systems bestimmen zu können, ist es zunächst nötig, einen Ausdruck für den Operator der Stromdichte $\hat{\mathbf{j}}^{tot}$ zu bestimmen, um dann aus der Beziehung zwischen dessen Erwartungswert $\langle \psi | \hat{\mathbf{j}}^{tot} | \psi \rangle$ und der Feldstärke \mathbf{E} die Leitfähigkeit gemäß

$$\langle \hat{\mathbf{j}}^{tot} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \underset{\approx}{\sigma}(t-t') \mathbf{E}(t') dt' \quad (\text{A.13})$$

zu berechnen. Zur Berechnung von $\hat{\mathbf{j}}^{tot}$ geht man davon aus, daß an jedem Gitterplatz m lokal die Kontinuitätsgleichung $-e\dot{\hat{n}}_m + \nabla \cdot \hat{\mathbf{j}}_m^{tot} = 0$ gilt. Weiterhin stimmt in Kristallen mit kubischer Symmetrie die Richtung des elektrischen Feldes mit der Richtung des Stromes überein, weswegen (A.13) auch für die skalaren Größen \hat{j}^{tot} , E und σ gilt. Aufgrund der Wahl der Feldrichtung in x -Richtung gilt daher $\hat{\mathbf{j}}^{tot} = \hat{j}^{tot} \mathbf{e}_x$, wodurch die Kontinuitätsgleichung auf dem diskreten Gitter die Form der finiten Differenzengleichung

$$-e\dot{\hat{n}}_m + \frac{\hat{j}_m^{tot} - \hat{j}_{m-1(x)}^{tot}}{a} = 0 \quad (\text{A.14})$$

annimmt. Hier ist $-e\dot{\hat{n}}_m = -\frac{e}{a^3} \partial_t (\hat{c}_m^\dagger \hat{c}_m)$ die Änderung der Ladungsdichte am Gitterplatz m , deren Zeitentwicklung durch die Heisenbergsche Bewegungsgleichung

$$-e\dot{\hat{n}}_m = -\frac{ie}{\hbar} [\hat{H}^{tot}, \hat{n}_m] = -\frac{ie}{\hbar a^3} [\hat{H}^{tot}, \hat{c}_m^\dagger \hat{c}_m] \quad (\text{A.15})$$

bestimmt wird. Durch Berechnung des Kommutators und entsprechender Zuordnung der Terme im Ergebnis zu m und $m-1$ ergibt sich für den Operator der Stromdichte:

$$\hat{j}_m^{tot} = -\frac{ie}{\hbar a^2} t_0 \left(e^{\frac{iea}{\hbar c} A} \hat{c}_m^\dagger \hat{c}_{m+1(x)} - e^{-\frac{iea}{\hbar c} A} \hat{c}_{m+1(x)}^\dagger \hat{c}_m \right) \quad (\text{A.16})$$

Wegen der statistischen Natur der Unordnung bietet es sich weiter an, den Mittelwert $\hat{j}^{tot} := \frac{1}{N} \sum \hat{j}_m^{tot}$ über alle N Plätze des Kristalls zu bilden. Beschränkt man sich im weiteren auf kleine elektrische Felder, so wird auch der Wert von A klein, und es ist möglich, die Exponentialfunktion in (A.16) zu entwickeln und nur Terme bis zur linearen Ordnung zu berücksichtigen. Mit den Bezeichnungen \hat{H} für den vollen Hamiltonoperator ohne äußeres Feld und \hat{H}_0^x für dessen Hüpf-Anteil in x -Richtung ergeben sich dann für \hat{j}^{tot} und den Hamiltonoperator \hat{H} aus (A.12) die Ausdrücke

$$\begin{aligned} \hat{j}^{tot} &= -\frac{iet_0}{\hbar N a^2} \underbrace{\sum_{m=1}^N \left(\hat{c}_m^\dagger \hat{c}_{m+1(x)} - \hat{c}_{m+1(x)}^\dagger \hat{c}_m \right)}_{=: \hat{j}} + \frac{e^2 A(t)}{\hbar^2 a c N} t_0 \underbrace{\sum_{m=1}^N \left(\hat{c}_m^\dagger \hat{c}_{m+1(x)} + \hat{c}_{m+1(x)}^\dagger \hat{c}_m \right)}_{=: \hat{H}_0^x} = \\ &= \hat{j} + \frac{e^2}{\hbar^2 c N a} A(t) \hat{H}_0^x \quad , \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{tot} &= \underbrace{\sum_{j=1}^N w_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j + t_0 \sum_{\langle kl \rangle} \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_l}_{=\hat{H}} + \underbrace{\frac{ieaA(t)}{\hbar c} t_0 \sum_{m=1}^N \left(\hat{c}_m^\dagger \hat{c}_{m+1(x)} - \hat{c}_{m+1(x)}^\dagger \hat{c}_m \right)}_{=-\frac{Na^3}{c} A(t) \hat{j}} = \\
&= \hat{H} - \frac{Na^3}{c} A(t) \hat{j} \quad . \quad (A.18)
\end{aligned}$$

Auf diese Weise ist es möglich, von den zeitabhängigen Operatoren \hat{H}^{tot} und \hat{j}^{tot} die zeitunabhängigen Anteile \hat{H} bzw. \hat{j} abzuspalten und damit die Zeitabhängigkeit auf die zur Störung $A(t)$ proportionalen Anteile zu beschränken. Im Rahmen der zeitabhängigen Störungsrechnung erster Ordnung konstruiert man zur Berechnung des Erwartungswertes von $\hat{j}^{tot} = \hat{j}^{tot}(t)$ einen Zustand $|\psi(t)\rangle$, der sich aus dem Grundzustand $|\psi_0\rangle$ von \hat{H} unter Einfluß der kleinen Störung $A(t)$ entwickelt. Geht man nun zur Wechselwirkungsdarstellung über und definiert mittels des Zeitentwicklungsoperators

$$\hat{U}(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right\} \quad (A.19)$$

des ungestörten Hamiltonoperators \hat{H} die Operatoren und Zustände im Wechselwirkungsbild durch

$$|\psi^{I(t)}\rangle := \hat{U}^{-1}(t) |\psi\rangle \quad , \quad (A.20)$$

$$\hat{O}^{I(t)} := \hat{U}^{-1}(t) \hat{O} \hat{U}(t) \quad , \quad (A.21)$$

so läßt diese unitäre Transformation das Skalarprodukt $\langle \psi(t), \hat{j}^{tot}(t) \psi(t) \rangle$ invariant. Die Zeitentwicklung der Zustände im Wechselwirkungsbild wird durch die zeitabhängige Störung $\hat{V}(t) = -\frac{a^3 N}{c} A(t) \hat{j}$ beschrieben:

$$i\hbar \partial_t |\psi^{I(t)}(t)\rangle = \hat{V}^{I(t)} |\psi^{I(t)}(t)\rangle \quad . \quad (A.22)$$

Fordert man, daß sich bei adiabatischem Einschalten der Störung

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} A(t) = 0 \quad (A.23)$$

der Zustand $|\psi(t)\rangle$ aus dem Grundzustand $|\psi_0\rangle$ des ungestörten \hat{H} heraus entwickelt, also daß $|\psi(t \rightarrow -\infty)\rangle = |\psi_0\rangle$ ist, so liefert die formale Integration von (A.22) unter dieser Randbedingung und unter Berücksichtigung von $|\psi_0^{I(t)}\rangle = |\psi_0\rangle$

$$|\psi^{I(t)}(t)\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \frac{a^3 N}{c} A(t') \hat{j}^{I(t')} |\psi^{I(t')}(t')\rangle \quad . \quad (A.24)$$

Begnügt man sich bei der iterativen Lösung dieser Integralgleichung damit, nur Terme bis zur linearen Ordnung in $A(t)$ zu berücksichtigen, so liefert diese sogenannte erste Bornsche Näherung

$$|\psi^{I(t)}(t)\rangle = |\psi_0\rangle + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \frac{a^3 N}{c} A(t') \hat{j}^{I(t')} |\psi_0\rangle + \mathcal{O}(A^2) \quad . \quad (A.25)$$

Damit ergibt sich unter Berücksichtigung von (A.17) der Erwartungswert von $\hat{j}(t)$ im Zustand $|\psi(t)\rangle$ als

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \hat{j}(t) | \psi(t) \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{j}^{I(t)} | \psi_0 \rangle + \frac{e^2 A(t)}{\hbar^2 a c N} \langle \psi_0 | [\hat{H}_0^x]^{I(t)} | \psi_0 \rangle + \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \frac{a^3 N}{c} A(t') \langle \psi_0 | [\hat{j}^{I(t')}, \hat{j}^{I(t)}] | \psi_0 \rangle + \mathcal{O}(A^2) \quad . \quad (\text{A.26}) \end{aligned}$$

Nutzt man nun die explizite Form des Zeitentwicklungsoperators \hat{U} und dessen Wirkung auf den Grundzustand $|\psi_0\rangle$, so zeigt sich daß $\langle \psi_0 | \hat{j}^{I(t)} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_0 \rangle$, was analog auch für $[\hat{H}_0^x]^{I(t)}$ gilt. Um den noch verbleibenden Kommutator $[\hat{j}^{I(t')}, \hat{j}^{I(t)}]$ zu berechnen, ist es nötig eine Identität, ausgedrückt durch ein vollständiges Orthonormalsystem aus Eigenfunktionen des ungestörten Hamiltonoperators \hat{H} einzufügen. Es ist

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \hat{j}^{I(t')} \hat{j}^{I(t)} | \psi_0 \rangle &= \sum_n \langle \psi_0 | \hat{U}^{-1}(t') \hat{j} \hat{U}(t') | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \hat{U}^{-1}(t) \hat{j} \hat{U}(t) | \psi_0 \rangle = \\ &= \sum_n e^{\frac{i}{\hbar} E_0 t'} \langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t'} e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle \psi_n | \hat{j} | \psi_0 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} = \\ &= \sum_n e^{\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0)(t - t')} |\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle|^2 \quad . \quad (\text{A.27}) \end{aligned}$$

Mit der Abkürzung $\omega_n := \frac{1}{\hbar}(E_n - E_0)$ ergibt sich unter Verwendung von $e^{i\alpha} - e^{-i\alpha} = 2i \sin(\alpha)$ für den Erwartungswert des Kommutators

$$\langle \psi_0 | [\hat{j}^{I(t')}, \hat{j}^{I(t)}] | \psi_0 \rangle = 2i \sum_{n>0} \sin(\omega_n(t - t')) |\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle|^2 \quad . \quad (\text{A.28})$$

Die Beschränkung des Summationsbereichs auf Werte $n > 0$ ist keine echte Einschränkung, da der Term für $n = 0$ aufgrund des Sinus sowieso verschwindet. Geht man weiterhin davon aus, daß im Grundzustand des ungestörten Systems $|\psi_0\rangle$ kein statischer Strom fließt, also

$$\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_0 \rangle = 0 \quad (\text{A.29})$$

ist, erhält man unter Verwendung von (A.28) aus (A.26) nach partieller Integration des letzten Terms, wobei der Randterm an der unteren Grenze aufgrund (A.23) verschwindet, den Erwartungswert der Stromdichte als

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \hat{j}(t) | \psi(t) \rangle &= \frac{e^2}{\hbar^2 a c N} A(t) \langle \psi_0 | \hat{H}_0^x | \psi_0 \rangle + \frac{2Na^3}{\hbar c} A(t) \sum_{n>0} \frac{|\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle|^2}{\omega_n} + \\ &\quad - \frac{2Na^3}{\hbar c} \int_{-\infty}^t dt' \sum_{n>0} \frac{|\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle|^2}{\omega_n} \cos(\omega_n(t - t')) \partial_{t'} A(t') \quad . \quad (\text{A.30}) \end{aligned}$$

Nutzt man weiter aus, daß man $A(t)$ wegen (A.23) als $\partial_{t'} A(t')$ mit unter das Integral ziehen kann, so liefert der Vergleich mit (A.10) und (A.13) die Leitfähigkeit

$$\begin{aligned} \sigma(t-t') = \theta(t-t') \left[-\frac{e^2}{\hbar^2 a N} \langle \psi_0 | \hat{H}_0^x | \psi_0 \rangle - \frac{2Na^3}{\hbar} \sum_{n>0} \frac{|\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle|^2}{\omega_n} + \right. \\ \left. + \frac{2Na^3}{\hbar} \sum_{n>0} \frac{|\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle|^2}{\omega_n} \cos(\omega_n(t-t')) \right] , \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

wobei mit $\theta(t-t')$ die Heavysidesche Sprungfunktion bezeichnet wird, die für $t < t'$ verschwindet und für $t > t'$ gleich eins ist. Um nun zur optischen Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ zu gelangen, muß man dieses Ergebnis noch fouriertransformieren. Mit $\tilde{t} := (t-t')$ und $\sigma(\omega) = \int \sigma(\tilde{t}) e^{i\omega\tilde{t}} d\tilde{t}$ erhält man bei analytischer Fortsetzung von $\sigma(\omega)$ in der oberen komplexen Halbebene, wobei der kleine Imaginärteil ε im Argument die Konvergenz der auftretenden Integrale sicherstellt:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega + i\varepsilon) = \left(-\frac{e^2}{\hbar^2 a N} \langle \psi_0 | \hat{H}_0^x | \psi_0 \rangle - \frac{2Na^3}{\hbar} \sum_{n>0} \frac{|\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle|^2}{\omega_n} \right) \frac{i}{\omega + i\varepsilon} + \\ + \frac{Na^3}{\hbar} \sum_{n>0} \frac{|\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle|^2}{\omega_n} \left(\frac{i}{\omega + \omega_n + i\varepsilon} + \frac{i}{\omega - \omega_n + i\varepsilon} \right) . \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Mit der als Folge von Integralkernen zu verstehenden symbolischen Darstellung der Plemelj-Dirac-Formel (vgl. beispielsweise den Anhang von [20])

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x + i\varepsilon} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) - i\pi\delta(x) \quad (\text{A.33})$$

und der Ersetzung der Operatoren \hat{j} und \hat{H}_0^x durch die entsprechenden dimensionslosen Größen $\hat{j} = \frac{\hbar Na^2}{et_0} \hat{j}$, bzw. $\hat{H}_0^x = \frac{1}{t_0} \hat{H}_0^x$ ergibt sich als Ergebnis für den Realteil der optischen Leitfähigkeit

$$\begin{aligned} \mathcal{Re}\{\sigma(\omega)\} = \frac{\pi t_0 e^2}{\hbar^2 Na} \left[\left(-\langle \psi_0 | \hat{H}_0^x | \psi_0 \rangle - 2t_0 \sum_{n>0} \frac{|\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle|^2}{\hbar\omega_n} \right) \delta(\omega) + \right. \\ \left. + t_0 \sum_{n>0} \frac{|\langle \psi_0 | \hat{j} | \psi_n \rangle|^2}{\hbar\omega_n} (\delta(\omega + \omega_n) + \delta(\omega - \omega_n)) \right] . \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

B Motivation der Polynomkern-Approximation

Eine erfolgreiche Methode zur Analyse beliebiger Funktionen $f(x)$ besteht in der Entwicklung nach einem orthogonalen Funktionensystem $\{\tilde{\varphi}_m\}_{m \in \mathbb{Z}}$ gemäß

$$f(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \langle f(x) | \tilde{\varphi}_m(x) \rangle_{\tilde{\varphi}} \tilde{\varphi}_m(x) \quad , \quad (\text{B.1})$$

wobei das Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle_{\tilde{\varphi}}$ geschickt an das System der $\{\tilde{\varphi}_m\}$ angepaßt zu wählen ist. So ist beispielsweise je nach Wahl der $\{\tilde{\varphi}_m\}$ eine geeignete Wahl des Integrationsbereiches I_x nötig. Erweitert man die Definition der Orthogonalität und des Skalarprodukts, indem man innerhalb des Skalarprodukts eine Gewichtungsfunktion $w(x)$ einführt

$$\langle f | g \rangle_{\tilde{\varphi}} := \int_{I_x} f(x)g(x)w(x) dx \quad ,$$

so ermöglicht dies, auf eine wesentlich größere Klasse von Funktionen als Basis der Entwicklung zurückzugreifen.

Chebyshev-Entwicklung: Eine aus numerischen Gründen besonders geeignete Wahl des Funktionensystems besteht in der Verwendung der Chebyshev-Polynome 1. Art $\{T_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$. Ihr besonderer numerischer Vorteil liegt in der Eigenschaft, daß bei einer Entwicklung nach dieser Basis alle Koeffizienten in etwa die gleiche Größenordnung ($10^{-1} \dots 10^{-4}$) haben und nicht wie etwa bei einer Potenzreihenentwicklung mit zunehmender Ordnung exponentiell kleiner werden. Die Definition der T_n erfolgt rekursiv mittels [2]:

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \quad , \\ T_1(x) &= x \quad , \\ T_{m+1}(x) &= 2xT_m(x) - T_{m-1}(x) \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Außerdem läßt sich eine explizite Darstellung angeben, aus der man auch direkt den Definitions- und Wertebereich $[-1, 1]$ ablesen kann:

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)) \quad . \quad (\text{B.3})$$

Es handelt sich bei den T_n trotz dieser offensichtlichen Ähnlichkeit zu den Winkelfunktionen um Polynome, was anhand der Rekursionsbeziehung (B.2) deutlich wird. Die Chebyshev-Polynome sind orthogonal bezüglich des Skalarprodukts $\langle \cdot | \cdot \rangle_C$, das die Gewichtungsfunktion $w(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$ enthält, d. h.

$$\langle T_m(x) | T_n(x) \rangle_C = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_m(x) T_n(x) dx = \begin{cases} \frac{\pi}{2} \delta_{m,n} & m, n \geq 1 \\ \pi & m = n = 0 \end{cases} \quad . \quad (\text{B.4})$$

Aufgrund der Symmetrie des Kosinus sieht man, daß man die Chebyshev-Polynome formal auch für negative n definieren kann, wobei $T_n(x) \equiv T_{-n}(x)$. Um jedoch weiterhin die lineare Unabhängigkeit der Basis zu gewährleisten, beschränkt man sich bei der Entwicklung (B.1) auf $m \in \mathbb{N}_0$, wobei die Terme für negative m durch einen Faktor 2 bei den T_m , $m > 0$ berücksichtigt werden. Formal erfolgt die Entwicklung der gesuchten Funktionen aus praktischen Gründen jedoch nicht direkt nach den Chebyshev-Polynomen, sondern nach

$$\{\varphi_m(x)\}_{m \in \mathbb{N}_0} = \left\{ \frac{T_m(x)}{\pi \sqrt{1-x^2}} \right\}_{m \in \mathbb{N}_0} \quad (\text{B.5})$$

mit dem Skalarprodukt

$$\langle f|g \rangle_\varphi := \int_{-1}^1 \pi \sqrt{1-x^2} f(x)g(x) dx \quad . \quad (\text{B.6})$$

Aus der Orthogonalität der Chebyshev-Polynome bezüglich $\langle \cdot | \cdot \rangle_C$ (B.4) folgt unmittelbar die Orthogonalität der $\{\varphi_m\}$ bezüglich $\langle \cdot | \cdot \rangle_\varphi$:

$$\langle \varphi_m(x) | \varphi_n(x) \rangle_\varphi = \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} \varphi_m(x) \varphi_n(x) dx = \begin{cases} \frac{1}{2} \delta_{m,n} & m, n \geq 1 \\ 1 & m = n = 0 \end{cases} \quad . \quad (\text{B.7})$$

Berücksichtigt man noch den Faktor 2 von der Beschränkung der Basisfunktionen auf $m \geq 0$, so erhält man aus (B.1) mit $\tilde{\varphi}_m = \varphi_m$:

$$\begin{aligned} f(x) &= \langle f(x) | \varphi_0(x) \rangle_\varphi \varphi_0(x) + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \langle f(x) | \varphi_m(x) \rangle_\varphi \varphi_m(x) = \\ &= \int_{-1}^1 f(y) dy \frac{T_0(x)}{\pi \sqrt{1-x^2}} + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \int_{-1}^1 f(y) T_m(y) dy \frac{T_m(x)}{\pi \sqrt{1-x^2}} = \\ &= \frac{1}{\pi \sqrt{1-x^2}} \left(\mu_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \mu_m T_m(x) \right) \quad , \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

wobei sich alle Koeffizienten μ_n , $n \in \mathbb{N}_0$ unter Berücksichtigung von $T_0 = 1$ gemäß

$$\mu_n := \langle f | \varphi_n \rangle_\varphi = \int_{-1}^1 f(y) T_n(y) dy \quad (\text{B.9})$$

berechnen lassen. Der Grund für die Entwicklung nach $\{\varphi_n\}$ und nicht direkt nach $\{T_n\}$ liegt in der Möglichkeit, diese Entwicklung durch die Variablensubstitution

$$\gamma : \phi \mapsto x = \cos(\phi) \quad (\text{B.10})$$

in eine Fourier-Reihe umzuwandeln. Ausgehend von der Flächenerhaltung bei der Umparametrisierung des Integrals

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x) dx = \int_{\gamma^{-1}(x_1)}^{\gamma^{-1}(x_2)} f(\gamma(\phi)) \det\{J_\gamma\} d\phi = \int_{\arccos(x_2)}^{\arccos(x_1)} f(\cos(\phi)) \sin(\phi) d\phi \quad (\text{B.11})$$

erscheint es geeignet, eine neue von ϕ abhängige Funktion

$$\tilde{f}(\phi) := f(\cos(\phi)) \sin(\phi) \quad (\text{B.12})$$

zu definieren. Mittels (B.8) und (B.3) ergibt sich dann

$$\tilde{f}(\phi) = \frac{1}{\pi} \left(\mu_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \mu_m \cos(m\phi) \right) ,$$

wobei sich die Koeffizienten μ_n , $n \in \mathbb{N}_0$ alternativ zu (B.9) auch durch $\tilde{f}(\phi)$ und Integration über ϕ ausdrücken lassen:

$$\mu_n = \int_0^\pi \tilde{f}(\phi) \cos(n\phi) d\phi \quad . \quad (\text{B.13})$$

Durch die Äquivalenz der beiden Darstellungen lassen sich die Vorteile der beiden Funktionensysteme – numerische Stabilität seitens der Chebyshev-Polynome einerseits und praktischer Nutzen der hocheffizienten FFT¹-Algorithmen andererseits – kombinieren, was zu einem schnellen, numerisch leistungsfähigen Verfahren führt.

Polynomkern-Methode: Um eine numerisch zugängliche Approximation von f zu finden, ist es jedoch nötig die eigentlich unendliche Reihe bei einer gewissen Ordnung M abubrechen. Durch diesen abrupten Abbruch entstehen die aus der Theorie der Fourier-Reihen bekannten Gibbs-Oszillationen, die an den Unstetigkeitsstellen der zu approximierenden Funktion zu einem großen Fehler in der Entwicklung führen. Um die unerwünschten Oszillationen zu unterdrücken, können Dämpfungsfaktoren, die sogenannten Gibbs-Faktoren g_m eingeführt werden. Der Effekt der g_m besteht in einer systematischen Verkleinerung der höchsten berücksichtigten Entwicklungsterme. Man erhält daher als Approximation \mathfrak{f} an die Funktion f aus (B.8)

$$\mathfrak{f}(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \left(g_0\mu_0 + 2 \sum_{m=1}^M g_m\mu_m T_m(x) \right) , \quad (\text{B.14})$$

was sich auch in Form einer Fourier-Reihe in der Variablen ϕ darstellen läßt:

$$\tilde{\mathfrak{f}}(\phi) = \frac{1}{\pi} \left(g_0\mu_0 + 2 \sum_{m=1}^M g_m\mu_m \cos(m\phi) \right) . \quad (\text{B.15})$$

¹fast-fourier-transform

Will man ermitteln, welchen ungewollten Effekt die Dämpfungsfaktoren außer der beabsichtigten Abschwächung der Gibbs-Oszillationen auf die Approximante noch haben, so bietet es sich an zu einer anderen Darstellung von f überzugehen. Durch Definition einer Funktion

$$K(x, x_0) := \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \left(g_0 + 2 \sum_{m=1}^M g_m T_m(x) T_m(x_0) \right) , \quad (\text{B.16})$$

dem sogenannten Polynomkern, läßt sich f mittels der linearen Abbildung

$$f(x) = \int_{-1}^1 K(x, x_0) f(x_0) dx_0 \quad (\text{B.17})$$

beschreiben. Die Äquivalenz dieser beiden Darstellungen von f läßt sich unter Berücksichtigung der Orthogonalität der Chebyshev-Polynome durch Einsetzen von (B.16) und (B.8) in (B.17) leicht zeigen. Wendet man auch hierauf die Variablensubstitution (B.10) an und definiert $\tilde{f}(\phi)$ analog zu (B.12), so ergibt sich

$$\tilde{f}(\phi) = \frac{1}{\pi} g_0 \int_0^\pi \tilde{f}(\phi_0) d\phi_0 + \frac{2}{\pi} \sum_{m=1}^M g_m \cos(m\phi) \int_0^\pi \cos(m\phi_0) \tilde{f}(\phi_0) d\phi_0 . \quad (\text{B.18})$$

Aufgrund der Symmetrie des Kosinus bezüglich π ist es unter Berücksichtigung eines Faktors $\frac{1}{2}$ möglich, die obere Integrationsgrenze in beiden Integralen von π auf 2π abzuändern, falls man $\tilde{f}(\phi)$ π -antiperiodisch, d. h. $\tilde{f}(2\pi - \phi_0) = -\tilde{f}(\phi_0)$, fortsetzt. Bei dieser Wahl der Fortsetzung von \tilde{f} verschwindet wegen der Antisymmetrie des Sinus bezüglich π das Integral

$$\int_0^{2\pi} \sin(m\phi_0) \tilde{f}(\phi_0) d\phi_0 = 0 .$$

So kann man (B.18) nach Addition des verschwindenden Terms

$$\frac{1}{\pi} \sum_{m=1}^M g_m \sin(m\phi) \int_0^{2\pi} \sin(m\phi_0) \tilde{f}(\phi_0) d\phi_0 \quad (\text{B.19})$$

auf der rechten Seite unter Berücksichtigung des Additionstheorems für den Kosinus der Differenz zweier Winkel $\cos(\alpha - \beta) = \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta$ in Form des Faltungsintegrals

$$\tilde{f}(\phi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(g_0 + 2 \sum_{m=1}^M g_m \cos(m(\phi - \phi_0)) \right) \tilde{f}(\phi_0) d\phi_0 \quad (\text{B.20})$$

darstellen, was auf (2.41) und (2.42) führt.

C Reduktion der Bandbreite der Andersonmatrix

Während es bei iterativen Teilraumverfahren wie dem Jacobi-Davidson-Verfahren möglich ist, direkten Nutzen aus der dünnen Besetzungsstruktur einer Matrix zu ziehen, ist dies für die gewöhnlichen *LAPACK*-Routinen in der Regel nicht der Fall. Da für erstere lediglich Matrix-Vektor-Multiplikationen benötigt werden um die gesuchten (wenigen) Eigenwerte zu berechnen, kann man sich darauf beschränken, nur nichtverschwindende Matrixelemente abzuspeichern. Will man im Gegensatz dazu das komplette Spektrum berechnen, so sind weiterhin die auf Householder-Transformation oder Givens-Rotation [48] basierenden *LAPACK*-Routinen die beste Wahl. Hierbei erweist sich die eigentlich für vollbesetzte Matrizen konzipierte Routine *DSYEV* für welche die gesamte Matrix benötigt wird als nicht wesentlich langsamer, als die Bandmatrixroutine *DSBEV*, für die lediglich eine Abspeicherung des Bandes bis zur äußersten besetzten Nebendiagonalen nötig ist. Da im Fall der Andersonmatrix eines L^3 -Systems diese Nebendiagonale von der Diagonale aus gezählt an Position $L^3 - L^2$ liegt (vgl. Abb C.1 links), bietet die Bandstruktur der Matrix bezüglich Laufzeit oder Speicherbedarf hier keinen Vorteil. Sinnvoll ist die Verwendung der Bandmatrixroutine nur, wenn es gelingt die Bandbreite wesentlich zu verkleinern und die Anzahl der unnötig abgespeicherten unbesetzten Nebendiagonalen zu verringern. Es zeigt sich, daß dies tatsächlich durch Anwendung der Transformationsmatrix $\mathbf{T} = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{P} \otimes \mathbf{1}_{L^2 \times L^2}$ möglich ist, wobei die $L \times L$ - Matrix \mathbf{P} für ungerade Kantenlängen L durch

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & \dots\dots\dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & \dots\dots\dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 & \dots\dots & 0 \\ \dots\dots\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots\dots\dots & \dots\dots & 0 & -1 & 1 \\ 0 & \dots\dots\dots & \dots\dots & 0 & 1 & 1 \\ \dots\dots\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 1 & 0 & \dots\dots & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \dots\dots\dots & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.1})$$

gegeben ist, während für gerade L die erste Zeile und Spalte entfallen. Der Übergang vom ursprünglichen Hamiltonoperator \hat{H} (Abb. C.1 links) zum reduzierten \hat{H}_{red} (Abb. C.1 rechts) geschieht nun vermöge

$$\hat{H}_{\text{red}} = T^T \hat{H} T \quad , \quad (\text{C.2})$$

wobei diese Ähnlichkeitstransformation die Eigenwerte unverändert läßt. \mathbf{T} ist so konstruiert, daß eine explizite Berechnung der Matrix-Multiplikationen nicht nötig ist, sondern die Wirkung der Transformation unmittelbar angegeben werden kann. Zerlegt man

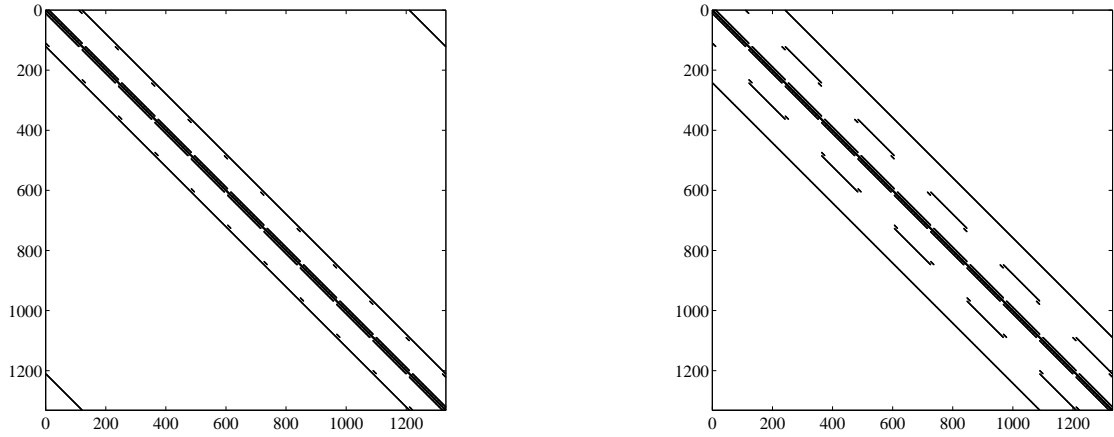


Abbildung C.1: Reduktion der Bandbreite einer Andersonmatrix durch Anwendung der Transformation (C.2) am Beispiel eines 11^3 -Systems. Anstatt der 1210 Nebendiagonalen, die für die ursprünglichen Andersonmatrix (links) abgespeichert werden müssen, genügen nach der Reduktion (rechts) lediglich 242.

die Diagonale in L Blöcke der Länge L^2 und bezeichnet diese mit $d(1), \dots, d(L)$, so bieten sich im Fall ungerader Kantenlänge für $j = 1, \dots, \frac{L-1}{2}$ die Definitionen

$$\begin{aligned} a(j) &= \frac{1}{2}(d(L+1-j) + d(j+1)) \quad , \\ b(j) &= \frac{1}{2}(d(L+1-j) - d(j+1)) \end{aligned} \quad (C.3)$$

an. Damit ergibt sich für die neue Diagonale

$$\boxed{d(1) \mid a(1) \mid a(1) \mid a(2) \mid a(2) \mid \dots \mid a(\frac{L-3}{2}) \mid a(\frac{L-3}{2}) \mid a(\frac{L-1}{2})-1 \mid a(\frac{L-1}{2})+1} \quad ,$$

sowie für die fünfte Nebendiagonale

$$\boxed{0 \mid b(1) \mid 0 \mid b(2) \mid \dots \mid 0 \mid b(\frac{L-1}{2})} \quad .$$

In der sechsten Nebendiagonale wird der erste Block der Länge L^2 zu $\sqrt{2}$, während alle sonstigen Einträge gleich eins sind. Die anderen Nebendiagonalen sind von der Transformation nicht betroffen. Für gerade Kantenlängen L sowie den zweidimensionalen Fall gelten ähnliche Beziehungen, die sich leicht aus Überlegungen zur Struktur von \mathbf{P} herleiten lassen. Braucht man die Eigenvektoren des Systems, so kann man diese anhand der exakten Eigenwerte leicht mit iterativen Algorithmen, z. B. der Methode des konjugierten Residuums [50] berechnen. Der Vorteil der Bandbreitenreduktion liegt im wesentlichen nicht in einer Verringerung der Rechenzeit, als vielmehr in einer Speicherersparnis, da von \hat{H} nunmehr nicht mehr L^6 sondern nur noch $2L^5$ Elemente abgespeichert werden müssen. Dies ermöglicht eine exakte Diagonalisierung von Systemen bis 30^3 auf PCs mit 512 MB Hauptspeicher.

Literaturverzeichnis

- [1] ABRAHAMAS, E.; ANDERSON, P. W.; LICCIARDELLO, D. C.; RAMAKRISHNAN, T. V.: Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979)
- [2] ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A.: *Pocketbook of Mathematical Functions*, Frankfurt/Main: Verlag Harri Deutsch, 1984
- [3] ANDERSON, P. W.: Absence of Diffusion on Certain Random Lattices, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958)
- [4] ANDERSON, P. W.: Local moments and localized states, *Rev. Mod. Phys.* **50**, 191 (1978)
- [5] BÄUML, B.: *Numerische Berechnung spektraler Größen in stark korrelierten Elektron-Phonon-Systemen*, Diplomarbeit, Universität Bayreuth (1997)
- [6] BORLAND, R. E.: The nature of the electronic states in disordered one-dimensional systems, *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A* **274**, 529 (1963)
- [7] CARPENA, P.; BERNAOLA-GALVÁN, P.; IVANOV, P. C.; STANLEY, H. E.: Metal-insulator transition in chains with correlated disorder, *Nature* **418**, 955 (2002)
- [8] CHAYES, J. T.; CHAYES, L.; FRANZ, J. R.; SETHNA, J. P.; TRUGMAN, S. A.: On the density of states for the quantum percolation problem, *J. Phys. A* **19**, L1173 (1986)
- [9] COHEN, M. H.: Basic Concepts in the Theory of Amorphous Semiconductors, in: KELLER, S. P.; HENSEL, J. C.; STERN, F. (Hrsg.): *Proceedings of the Tenth International Conference on the Physics of Semiconductors*, Springfield, Virginia: National Technical Information Service, 1970
- [10] CULLUM, J. K.; WILLOUGHBY, R. A.: *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations*, Bd. I & II, Boston: Birkhäuser, 1985
- [11] CZYCHOLL, G.: *Theoretische Festkörperphysik*, Braunschweig/Wiesbaden: Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, 2000
- [12] DATTA, S.: *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge: Cambridge University Press, 1995

- [13] DE GENNES, P. G.; LAFORE, P.; MILLOT, J. P.: Amas accidentels dans les solutions solides désordonnées, *J. Phys. Chem. Solids* **11**, 105 (1959)
- [14] DE MOURA, F. A. B. F.; LYRA, M. L.: Delocalization in the 1D Anderson Model with Long-Range Correlated Disorder, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3735 (1998)
- [15] DOBROSAVLJEVIĆ, V.; PASTOR, A. A.; NIKOLIĆ, B. K.: Typical medium theory of Anderson localization: A local order parameter approach to strong-disorder effects, *Europhys. Lett.* **62**, 76 (2003)
- [16] DUNLAP, D. H.; WU, H.-L.; PHILLIPS, P. W.: Absence of Localization in a Random-Dimer Model, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 88 (1990)
- [17] ELLIOT, R. J.; KRUMHANSL, J. A.; LEATH, P. L.: The theory and properties of randomly disordered crystals and related physical systems, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 465 (1974)
- [18] EVERS, F.; MIRLIN, A. D.: Fluctuations of the Inverse Participation Ratio at the Anderson Transition, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3690 (2000)
- [19] FISCHER, D. S.; LEE, P. A.: Relation between conductivity and transmission matrix, *Phys. Rev. B* **23**, 6851 (1981)
- [20] GASSER, W.; HEINER, E.; ELK, K.: *Greensche Funktionen in Festkörper und Vielteilchenphysik*, Berlin: WILEY-VCH Verlag, 2001
- [21] GERSCHGORIN, S. A.: Über die Abgrenzung der Eigenwerte einer Matrix, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. fiz. mat* **6**, 749 (1931)
- [22] GREENWOOD, D. A.: The Boltzmann Equation in the Theory of Electrical Conduction in Metals, *Proc. Phys. Soc. London* **71**, 585 (1958)
- [23] GRUSSBACH, H.; SCHREIBER, M.: Determination of the mobility edge in the Anderson model of localization in three dimensions by multifractal analysis, *Phys. Rev. B* **51**, 663 (1995)
- [24] GU, Y.; YU, K. W.; YANG, Z. R.: Fluctuations and scaling of the inverse participation ratios in random binary resonant composites, *Phys. Rev. B* **66**, 012202 (2002)
- [25] HOFSTADTER, D. R.: Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields, *Phys. Rev. B* **14**, 2239 (1976)
- [26] HOSHEN, J.; KOPELMAN, R.: Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm, *Phys. Rev. B* **14**, 3438 (1976)
- [27] JANSSEN, M.: Statistics and scaling in disordered mesoscopic electron systems, *Physics Reports* **295**, 1 (1998)

- [28] KANTELHARDT, J. W.: *Elektronen und Fraktone in ungeordneten Festkörpern*, Diplomarbeit, Justus Liebig Universität Gießen (1996)
- [29] KIRKPATRICK, S.; EGGARTER, T. P.: Localized States of a Binary Alloy, *Phys. Rev. B* **6**, 3598 (1972)
- [30] KRAMER, B.; BRODERIX, K.; MAC KINNON, A.; SCHREIBER, M.: The Anderson transition: New numerical results for the critical exponents, *Physica A* **167**, 163 (1990)
- [31] KRAMER, B.; MAC KINNON, A.: Localization: theory and experiment, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993)
- [32] KRAMER, B.; MAC KINNON, A.; WEAIRE, D.: Numerical study of conductivity for the Anderson model in two and three dimensions, *Phys. Rev. B* **23**, 6357 (1981)
- [33] KUBO, R.: Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957)
- [34] KUSY, A.; STADLER, A. W.; HALDÁŠ, G.; SIKORA, R.: Quantum percolation in electronic transport of metal-insulator systems: numerical studies of conductance, *Physica A* **241**, 403 (1997)
- [35] LAST, B. J.; THOULESS, D. J.: Evidence for power law localization in disordered systems, *J. Phys. C* **7**, 699 (1974)
- [36] LEE, P. A.: Real-Space Scaling Studies of Localization, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1492 (1979)
- [37] MAC KINNON, A.; KRAMER, B.: The Scaling Theory of Electrons in Disordered Solids: Additional Numerical Results, *Z. Phys. B* **53**, 1 (1983)
- [38] MOOKERJEE, A.; DASGUPTA, I.; SAHA, T.: Quantum Percolation, *Int. J. Mod. Phys.* **9**, 2989 (1995)
- [39] MOTT, N. F.: Electrons in Disordered Structures, *Adv. Physics* **16**, 49 (1967)
- [40] MOTT, N. F.; TWOSE, W. D.: The Theory of Impurity Conduction, *Adv. Physics* **10**, 107 (1961)
- [41] NIKOLIĆ, B. K.: Statistical properties of eigenstates in three-dimensional mesoscopic systems with off-diagonal or diagonal disorder, *Phys. Rev. B* **64**, 014203 (2001)
- [42] NIKOLIĆ, B. K.: Which Kubo formula gives the exact conductance of a mesoscopic disordered system?, *cond-mat/0103150* (2001)
- [43] NIKOLIĆ, B. K.; ALLEN, P. B.: Quantum transport in ballistic conductors: evolution from conductance to resonant tunneling, *J. Phys. Condens. Matter* **12**, 9629 (2000)

- [44] ODAGAKI, T.; OGITA, N.; MATSUDA, H.: Quantal percolation problems, *J. Phys. C* **13**, 189 (1980)
- [45] OSELEDEC, V. I.: A multiplicative ergodic theorem. Lyapunov characteristic numbers for dynamical systems, *Trans. Moscow Math. Soc.* **19**, 197 (1968)
- [46] PATRICK A. LEE, T. V. R.: Disordered electronic systems, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985)
- [47] PICHARD, J. L.; SARMA, G.: Finite size scaling approach to Anderson localization, *J. Phys. C* **14**, L127 (1981)
- [48] PRESS, W. H.; FLANNERY, B. P.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.: *Numerical Recipes*, Cambridge: Cambridge University Press, 1986
- [49] R. ABOU-CHACRA, P. W. A.; THOULESS, D. J.: A selfconsistent theory of localization, *J. Phys. C* **6**, 1734 (1973)
- [50] SAAD, Y.: *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*, Manchester: University Press, 1992
- [51] SEDRAKYAN, T.: Localization-delocalization transition in a presence of correlated disorder: The Random Dimer Model, *cond-mat/0302161* (2003)
- [52] SHAPIR, Y.; AHARONY, A.; HARRIS, A. B.: Localization and Quantum Percolation, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 486 (1982)
- [53] SILVER, R. N.; RÖDER, H.: Calculation of densities of states and spectral functions by Chebyshev recursion and maximum entropy, *Phys. Rev. E* **56**, 4822 (1997)
- [54] SILVER, R. N.; RÖDER, H.; VOTER, A. F.; KRESS, J. D.: Kernel Polynomial Approximations for Densities of States and Spectral Functions, *J. of Comp. Phys.* **124**, 115 (1996)
- [55] SLEVIN, K.; OHTSUKI, T.: Corrections to Scaling at the Anderson Transition, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 382 (1999)
- [56] SLEVIN, K.; OHTSUKI, T.; KAWARABAYASHI, T.: Topology Dependent Quantities at the Anderson Transition, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3915 (2000)
- [57] SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N.; GREEST, G. S.: Localization in quantum percolation: Transfer-matrix calculations in three dimensions, *Phys. Rev. B* **36**, 8649 (1987)
- [58] SOUKOULIS, C. M.; LI, Q.; GREEST, G. S.: Quantum percolation in three-dimensional systems, *Phys. Rev. B* **45**, 7724 (1992)
- [59] THOULESS, D. J.: Anderson's theory of localized states, *J. Phys. C* **3**, 1559 (1970)

- [60] THOULESS, D. J.: The Anderson model, *J. Noncryst. Solids* **8-10**, 461 (1972)
- [61] THOULESS, D. J.: Electrons in disordered systems and the theory of localization, *Physics Reports* **13**, 93 (1974)
- [62] THOULESS, D. J.; KIRKPATRICK, S.: Conductivity of the disordered linear chain, *J. Phys. C* **14**, 235 (1981)
- [63] VERGÉS, J. A.: Localization length in a random magnetic field, *Phys. Rev. B* **57**, 870 (1998)
- [64] VERGÉS, J. A.: Computational implementation of the Kubo formula for the static conductance: application to two dimensional quantum dots, *Comp. Phys. Comm.* **118**, 71 (1999)
- [65] WEGNER, F.: Inverse Participation Ratio in $2 + \epsilon$ Dimensions, *Z. Phys. B* **36**, 209 (1980)
- [66] WEGNER, F. J.: Electrons in Disordered Systems. Scaling Near the Mobility Edge, *Z. Phys. B* **25**, 327 (1976)
- [67] XIONG, S.-J.; EVANGELOU, S. N.: Power-law localization in two and three dimensions with off-diagonal disorder, *Phys. Rev. B* **64**, 113107 (2001)
- [68] YOSHINO, S.; OKAZAKI, M.: Numerical Study of Electron Localization in Anderson Model for Disordered Systems: Spatial Extension of Wavefunction, *J. Phys. Soc. Jpn.* **43**, 415 (1977)
- [69] ZIMAN, J. M.: *Models of disorder*, Cambridge: Cambridge University Press, 1979

Danksagung

Ein abschließendes Wort des Dankes sei all denjenigen gewidmet, die in der einen oder anderen Weise zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Dies betrifft zunächst Prof. H. Fehske für die Betreuung dieser Arbeit, die ich als gelungene Mischung aus Vorschlägen und Aufträgen einerseits und Freiräumen für eigene Ideen andererseits empfand. Ebenfalls hat mich die Tatsache gefreut, daß trotz der Entfernung Bayreuth - Greifswald über das gesamte Jahr hinweg ein enger Kontakt bestand. In diesem Zusammenhang ein herzlicher Dank an Dr. A. Weiße, der als Ansprechpartner vor Ort jederzeit ein offenes Ohr für meine Fragen und Probleme hatte. An die gesamte Arbeitsgruppe ein Dank für das gute, freundschaftliche Arbeitsklima sowie zahlreiche Diskussionen über physikalische Themen und darüber hinaus. Meiner Freundin ein Dankeschön für den Verzicht auf viele gemeinsame Wochenenden, die der Arbeit zum Opfer gefallen sind, und an denen wir uns nicht sehen konnten. Außerdem möchte ich meinen Eltern für die Unterstützung die ich im Lauf der Jahre in vielerlei Hinsicht erhalten habe danken. Durch Euch ist mir vieles ermöglicht worden, das ich sonst nicht erreicht hätte.

Erklärung

Ich erkläre hiermit, diese Arbeit selbst und nur unter Benutzung der angegebenen Hilfsmittel und Quellen verfaßt zu haben.

Bayreuth, den 25. April 2003, _____