

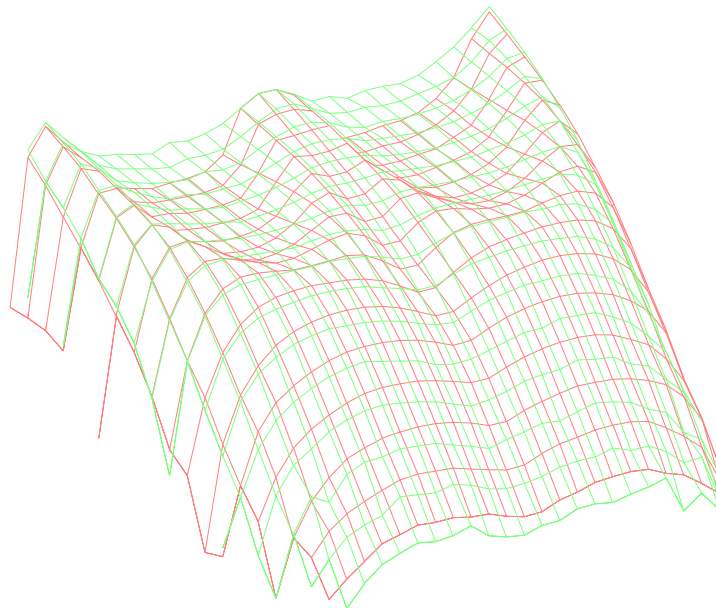
Diplomarbeit

Energieniveaustatistik weniger wechselwirkender Teilchen in ungeordneten Systemen

André Wobst

Lehrstuhl für Theoretische Physik I
Universität Augsburg

16. Oktober 1998



Die Abbildung zeigt Verteilungen von Krümmungen von Energieniveaus zweier Teilchen in einem ungeordneten Potential mit Wechselwirkung (grün) gegenüber dem Fall ohne Wechselwirkung (rot) mit den selben Parametern wie in Abbildung 24, nur wurden durch Mittelung der Daten weniger Punkte dargestellt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Unordnung: das Anderson-Modell	3
2.2	Wechselwirkung: das Hubbard-Modell	7
2.3	Unordnung und Wechselwirkung: das TIP-Problem	8
3	Ein Teilchen im Ring	13
3.1	Hamiltonoperator für das kontinuierliche Problem	13
3.2	Diskretisierung	14
3.3	Unterschiede zwischen dem kontinuierlichen und dem diskreten Modell	16
3.4	Magnetischer Fluß als Randbedingung	17
3.5	Einteilchenenergieniveaus als Funktion des magnetischen Flusses	17
3.6	Einteilchenzustandsdichte	19
3.7	Einteilchenkrümmungen	21
3.8	Symmetrie im Spektrum	26
4	Zwei Teilchen ohne Wechselwirkung	29
4.1	Eigenzustände und Eigenenergien ohne Wechselwirkung	29
4.2	Symmetrisierung	29
4.3	Zustandsdichte ohne Wechselwirkung	31
4.4	Krümmungen ohne Wechselwirkung	31
5	Zwei Teilchen mit Wechselwirkung	35
5.1	Einführung einer Wechselwirkung	35
5.2	Symmetrisierung des vollen Zweiteilchenproblems	35
5.3	Krümmungen	37
5.4	Vorzeichen der Wechselwirkung	38
5.5	Ein-Parameter-Abhängigkeit der Krümmungen mit fester Wechselwirkung	39
5.6	Grenzfall betragsmäßig unendlicher Wechselwirkung	42
5.7	Dualität zwischen schwacher und starker Wechselwirkung	44
5.8	Ein-Parameter-Abhängigkeit der Krümmungen bei Variation der Wechselwirkung	45
5.9	Langreichweitige Wechselwirkungen	48
6	Verteilung der Krümmungen	51
6.1	Motivation	51
6.2	Verhalten in der Bandmitte	53
6.3	Verhalten außerhalb der Bandmitte	54
7	Zusammenfassung	57

Anhang	59
A Bestimmung von Krümmungen mittels Störungstheorie	59
B Bedingung für das Verschwinden der ersten Ableitung	61
C Verfahren zur numerischen Berechnung von Krümmungen	65
Literatur	69
Danksagung	73
Erklärung	75

1 Einleitung

Die Erarbeitung von Modellen zur Beschreibung und Erklärung der Phänomene der Festkörperphysik ist seit vielen Jahrzehnten einer der Schwerpunkte der Theoretischen Physik. Erstaunlich viele Eigenschaften lassen sich dabei bereits mit Wechselwirkung zwischen den Teilchen vernachlässigenden Einteilchenbildern verstehen oder können doch zumindest im Rahmen effektiver Einteilchenmodelle behandelt werden. Durch Besetzung der Zustände gemäß einer thermodynamischen Verteilungsfunktion, für Elektronen beispielsweise ist das die Fermi-Funktion, lassen sich auf die Weise nichtwechselwirkende Vielteilchenprobleme behandeln. Ein großer und überaus erfolgreicher Bereich ist die Beschreibung von Transporteigenschaften in Festkörpern unter Einbeziehung von Unordnung in Form von Zufallspotentialen.

Es gibt aber auch Experimente, die mit den bisherigen Einteilchenmodellen nicht erklärt werden können und auch nicht mit reinen Wechselwirkungsmodellen, wie im einfachsten Fall dem Hubbard-Modell, beschrieben werden. Das sehr komplizierte Vielteilchenproblem, welches sowohl Unordnung als auch Wechselwirkung enthält, ist jedoch analytisch wie numerisch extrem schwer zugänglich.

Seit wenigen Jahren ist deshalb das Modell zweier Teilchen in einem ungeordneten, zunächst meist eindimensionalen Gitter mit einer Hubbard-Wechselwirkung zwischen den beiden Teilchen zu einem Forschungsschwerpunkt geworden. Anhand dieses sehr einfachen Systems, dessen Verhalten bereits äußerst facettenreich ist und dessen Behandlung schon sehr viele Schwierigkeiten birgt, kann man den expliziten Einfluß einer Wechselwirkung in einem ungeordneten System untersuchen. Mit verschiedenen analytischen und auch massiv numerischen Methoden sind hierbei bereits Erkenntnisse gesammelt worden, die belegen, daß durch die Kombination starker Unordnung und starker Wechselwirkung für ein System aus zwar zunächst nur zwei Teilchen qualitativ überraschende Einflüsse der Wechselwirkung auftreten. Seither werden auf dieses Problem geeignete Methoden übertragen und erprobt beziehungsweise zum Teil auch entwickelt und getestet. Diese Diplomarbeit versteht sich als Beitrag zu dieser Entwicklung.

In dieser Arbeit soll eine numerisch zugängliche Größe, nämlich die Krümmung von Energieniveaus bei Veränderung eines äußeren magnetischen Feldes, in einem eindimensionalen Gittermodell mit zwei wechselwirkenden Teilchen und einem ungeordneten Potential analysiert werden. Der Einfluß der Wechselwirkung in diesem Problem soll mit den in den letzten Jahren entstandenen ersten Ergebnissen bei der Untersuchung anderer Größen für dieses System verglichen werden.

Zunächst wird in einem Grundlagenteil ein Überblick über frühere verwandte Arbeiten gegeben, die insbesondere zum Verständnis und zur Motivation dieser Arbeit unabdingbar sind. Nachfolgend wird das Modell eingeführt und der nichtwechselwirkende Fall besprochen, um anschließend das volle Problem mit Wechselwirkung mit ihm vergleichen zu können. Zusammen mit der Präsentation der Ergebnisse wird schließlich die Relevanz der gewonnenen Erkenntnisse dargestellt und im Rahmen des Modells im Vergleich und zur Ergänzung früherer Arbeiten diskutiert.



2 Grundlagen

2.1 Unordnung: das Anderson-Modell

Bei der quantenmechanischen Beschreibung von Elektronen in idealen Kristallen erhält man durch die Gitterperiodizität periodische Wellenfunktionen gemäß dem Bloch-Theorem, die man als Blochwellen bezeichnet (siehe z.B. [1]). Sobald die Periodizität des Gitters jedoch gestört ist, sei es durch Gitterfehler wie Fehlstellen, Versetzungen und Fremdatome oder auch gegebenenfalls thermisch angeregte Fluktuationen, brechen die Voraussetzungen für die Gültigkeit des Bloch-Theorems zusammen. Anderson zeigte in der fundamentalen Arbeit [2], daß für nicht-ideale Kristallgitter bei hoher Unordnung beziehungsweise genügend niedriger Zustandsdichte qualitativ neue Phänomene auftreten. Als sogenanntes Anderson-Modell studierte er hierfür die Bewegung eines oder mehrerer untereinander nicht wechselwirkender Teilchen in einem ungeordneten Potential. Statt beliebig ausgedehnter Bloch-ähnlicher Zustände können durch die Unordnung räumlich lokalisierte Zustände entstehen. Diese sogenannte Anderson-Lokalisierung wird charakterisiert durch einen exponentiellen Abfall der Wellenfunktion auf der Skala der dazu eingeführten Lokalisierungslänge L_1 . Das hat für die Transporteigenschaften, die von der Beweglichkeit der Elektronen im Festkörper bestimmt werden, entscheidende Bedeutung, da unter Umständen alle energetisch erreichbaren Zustände lokalisiert sein können.

Die Einsicht des Vorhandenseins lokalisierter Zustände in ungeordneten Festkörpern hat im Laufe der Jahre ausgesprochen vielfältige Anwendungen gefunden, die hier bei weitem nicht alle angesprochen werden können. Einige für das Verständnis der vorliegenden Arbeit wichtige Eigenschaften sollen statt dessen herausgegriffen werden.

Das in [3, 4] vorgestellte berühmte Beispiel des Mott'schen $T^{-1/4}$ -Gesetzes für das Nieder-temperaturverhalten der Gleichstromleitfähigkeit in amorphen Halbleitern ist eine der typischen Anwendungen lokalisierter Zustände. Ein Übergang zwischen diesen Zuständen angeregt durch Gitterschwingungen dient zur Erklärung der experimentell gefundenen Abhängigkeit.

In [5, 6] wurde ein Zusammenhang zwischen der Veränderung der Energieniveaus bei Änderungen von Randbedingungen und dem elektrischen Leitwert formuliert, der als Thouless-Relation bezeichnet wird. Die Änderung von Randbedingungen ist dabei äquivalent zur anschaulicheren Variation eines vom System umschlossenen Magnetfeldes. Eine Störungsrechnung in der Randbedingung, wie sie in Anhang A dieser Arbeit für das hier eingeführte Modell explizit ausgeführt wird, enthält nämlich Matrixelemente des Impulsoperators, wie sie auch in der Kubo-Formel für den elektrischen Leitwert [7, 8] auftreten. Nach der von Edwards und Thouless vorgeschlagenen Abschätzung entsteht dabei im Mittel eine Proportionalität zwischen dem elektrischen Leitwert und den zweiten Ableitungen der Energieniveaus nach dem magnetischen Fluß, die als Krümmungen der Energieniveaus bezeichnet werden, dividiert durch den mittleren Niveauabstand. Diese Abschätzung ist nicht nur auf den von Edwards und Thouless betrachteten Fall unkorrelierter Energieniveaus beschränkt, wie sie – wie im folgenden noch detaillierter dargestellt wird – im Fall lokalisierter Zustände auftreten. In [9] wurde gezeigt, daß die Thouless-Relation zudem für korrelierte Energieniveaus erhalten bleibt, also auch für delokalisierte Zustände gilt. Unter Vernachlässigung der Wechselwirkung zwischen den Teilchen sind dabei die Zustände in der Nähe der Fermi-Kante von Interesse, denn bis dahin werden die Zustände bestetzt, wenn man von kleinen thermischen Anregungen absieht. In der Kubo-

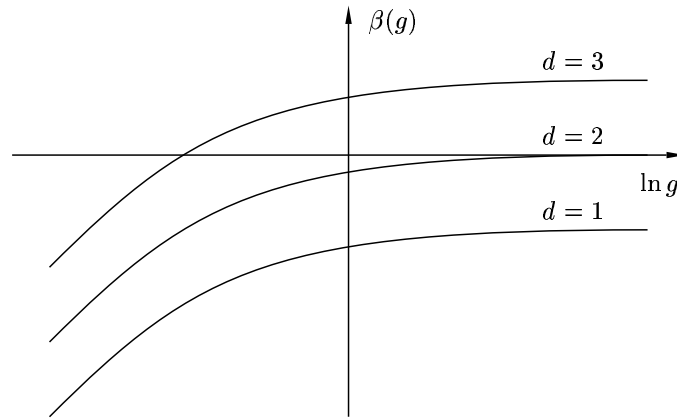


Abbildung 1: Skizze der Skalenfunktion β in unterschiedlichen Dimensionen d gemäß der Ein-Parameter-Skalen-Theorie als Funktion des Leitwertes g ohne thermische Anregung.

Formel treten nun die Matrix-Elemente des Impulsoperators zwischen diesen Zuständen an der Fermi-Kante mit großer Wichtung auf. Der für die Abschätzung der Leitfähigkeit eingehende Energiebereich wächst dabei mit zunehmender Temperatur, weil durch die „Verschmierung“ der Fermi-Funktion, die die Besetzung der Zustände im thermodynamischen Gleichgewicht festlegt, mit steigender Temperatur immer mehr Zustände in die Transporteigenschaften eingehen.

Es ist zumindest qualitativ anschaulich auch klar, daß die Stärke des Einflusses der Randbedingung mit der räumlichen Ausdehnung der Zustände gekoppelt ist. Denn nur Zustände, die über das gesamte System ausgedehnt sind, können Änderungen an der Randbedingung überhaupt wahrnehmen.

Eine wesentliche Methode, den Leitwert einer makroskopischen Probe ohne thermische Anregung durch das Verhalten bei kleinen Systemgrößen zu erhalten, bildet die Untersuchung des Leitwertes g als Funktion der Systemgröße L . Nach zahlreichen Arbeiten auf dem Gebiet wurde in [10] schließlich eine Ein-Parameter-Skalen-Theorie vorgestellt, in der die logarithmische Ableitung

$$\beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (1)$$

als Funktion nur eines Parameters, nämlich dem Leitwert g , auftritt und das in Abbildung 1 skizzierte Verhalten besitzt. Die Skalenfunktion $\beta(g)$ beschreibt eine Renormierung, nämlich wie sich der Leitwert g der Probe bei Veränderung der Systemgröße L verhält. Insbesondere gibt das Vorzeichen der Skalenfunktion $\beta(g)$ an, wie sich die Leitfähigkeit g beim Übergang zu makroskopischen Proben fortsetzt. Während sie für negative $\beta(g)$ immer weiter abnimmt, steigt sie im Fall positiver $\beta(g)$ mit der Systemgröße an. Das Vorzeichen der Skalenfunktion $\beta(g)$ legt demnach fest, ob makroskopisch metallisches oder isolierendes Verhalten vorliegt.

Die hinter der Ein-Parameter-Abhängigkeit stehende Idee ist, daß die Veränderung in der effektiven Unordnung durch eine geringe Vergrößerung des Systems durch die effektive Unordnung selbst festgelegt wird, die wiederum direkt allein durch den Leitwert gegeben ist. Eine solche ursprüngliche Formulierung der Skalen-Theorie konnte später durch weniger suggestive Argumente unterstützt werden, die unter anderem in [11] zusammengestellt wurden. Ohne das nun zu sehr ins Detail zu verfolgen, läßt sich hier eine ganz besonders interessante und wichtige

Eigenschaft im Modell der Anderson-Lokalisierung anschaulich leicht verstehen und soll deshalb vorgeführt werden.

Im Grenzfall hoher Leitfähigkeit kann man makroskopisches Verhalten mit einem spezifischen ohmschen Widerstand für einen Würfel der Kantenlänge L ansetzen. In einer Dimension $d = 1$ sinkt der Leitwert dann indirekt proportional mit der Systemgröße L . Für $d = 2$ ist der Leitwert hingegen konstant, weil neben der Länge der Probe auch deren Breite variiert wird, während sich für $d = 3$ sogar eine Proportionalität zwischen Leitwert und Systemgröße ergibt, denn die zur Leitfähigkeit beitragende Fläche steigt quadratisch mit der Systemgröße, die Länge hingegen nur linear. Damit gilt in Abhängigkeit von der Dimension d der Probe

$$g(L) \propto L^{d-2}. \quad (2)$$

Für die Skalenfunktion $\beta(g)$ ergibt sich also

$$\beta(g) = d - 2. \quad (3)$$

Im Grenzfall stark lokalisierter Zustände, also sehr kleinem Leitwert für Systeme deutlich größer als die Lokalisierungslänge L_1 , kommt hingegen der exponentielle Abfall in der Ortsausdehnung der Zustände zum Tragen. Folglich gilt

$$g(L) \propto \exp(-L/L_1) \quad (4)$$

und somit

$$\beta(g) = \ln g + \text{const.} \quad (5)$$

Unter der Annahme, daß die Skalenfunktion $\beta(g)$ stetig und monoton ist [11], stellt man nun fest, daß sie im dreidimensionalen Fall für große Leitfähigkeiten positiv ist, sonst jedoch negativ wie auch in $d \leq 2$. Aufgrund der bereits diskutierten Bedeutung der Skalenfunktion $\beta(g)$ legt deren Vorzeichen aber genau fest, wie sich der Leitwert beim Übergang zu makroskopischen Proben fortsetzt. Während er für negative β immer weiter abnimmt, steigt er im Fall positiver β mit der Systemgröße. In einer und in zwei Dimensionen entsteht somit stets ein Isolator, während es in drei Dimensionen demnach einen kritischen Wert für den Leitwert gibt, an dem ein Metall-Isolator-Übergang auftritt. Oberhalb dieses kritischen Wertes für der Leitwert ist die Skalenfunktion $\beta(g)$ positiv, unterhalb aber negativ. Solch ein Metall-Isolator-Übergang ist insbesondere in Zusammenspiel mit den in [12] eingeführten Beweglichkeitskanten interessant, die auftreten können, wenn die Lokalisierungseigenschaften der Zustände im Spektrum variieren. Abhängig von der Fermi-Energie werden dann nämlich die verschiedenen Bereiche mit ihren verschiedenen Eigenschaften für den Leitwert relevant. Auch die Einführung von Magnetfeldern kann zusätzliche Effekte verursachen, die in dieser Arbeit aber nicht weiter von Bedeutung sind, da hier nur beliebig kleine zeitunabhängige Störungen durch ein Magnetfeld betrachtet werden, die zu Krümmungen der Energieniveaus als Funktion des Magnetfeldes führen. Die vielseitigen detaillierteren Untersuchungen sowohl analytischer, experimenteller als auch später zunehmend numerischer Natur auf dem Gebiet [13] sollen hier nicht weiter behandelt werden.

Zum Verständnis von Transporteigenschaften können über die Betrachtung des Einflusses der Änderung von Randbedingungen auf der Basis der Thouless-Relation hinaus auch andere

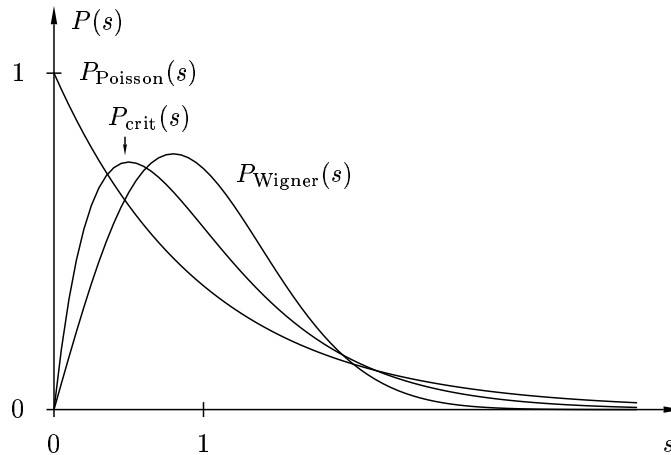


Abbildung 2: Beispiele für Wahrscheinlichkeitsverteilungen $P(s)$ der Abstände s benachbarter Energieniveaus. Die Abstände s werden in Einheiten des mittleren Niveauabstandes Δ angegeben.

Eigenschaften von Energiespektren beitragen. Speziell Korrelationen der Eigenwerte innerhalb des Spektrums enthalten dahingehend ebenfalls Informationen [14]. Anschaulich ist beispielsweise die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(s)$ der Abstände s benachbarter Energieniveaus. Dabei ist der Niveauabstand s dimensionslos gewählt, indem man ihn in Einheiten des mittleren Niveauabstandes Δ angibt. Grenzfälle solcher Verteilungen $P(s)$ sind in Abbildung 2 zu sehen. Für unabhängig voneinander zufällig verteilte Niveaus, also den Fall eines unkorrelierten Spektrums, ergibt sich die Poisson-Statistik

$$P_{\text{Poisson}}(s) = \exp\{-s\}. \quad (6)$$

Das Anderson-Modell ergibt beispielsweise eine solche Verteilung im Fall stark lokalisierter Zustände, wenn diese nämlich aufgrund ihrer räumlichen Separation im Spektrum unabhängig voneinander auftreten. Im entgegengesetzten Fall ausgedehnter Zustände ohne Magnetfeld findet man hingegen Verteilungen der Form

$$P_{\text{Wigner}}(s) = \frac{\pi}{2}s \exp\left\{-\frac{\pi}{4}s^2\right\}. \quad (7)$$

Diese Verteilung ist aus der Zufallsmatrixtheorie [15] unter dem Namen „Wigner surmise“ bekannt. Sie ist eine ausgezeichnete Approximation für die Verteilung der Niveauabstände $P(s)$ für eine bestimmte Klasse von Zufallsmatrizen, dem Gaußschen Orthogonalen Ensemble (GOE). Darüberhinaus sind noch weitere derart universelle Verteilungen aus der Zufallsmatrixtheorie her bekannt, nämlich das Gaußsche Unitäre Ensemble (GUE) und das Gaußsche Symplektische Ensemble (GSE). Definiert werden die Ensembles dadurch, daß man mit einer beliebig gewählten Transformationsmatrix der entsprechenden Symmetrieklasse das Ensemble wieder auf sich selbst abbildet. Nähere Details sind für diese Arbeit jedoch nicht notwendig, weshalb hier disbezüglich auf ein Standardwerk zum Thema verwiesen werden soll [15].

Die angesprochenen Verteilungen erhält man in unterschiedlichen Problemen der Theoretischen Physik wie auch der Experimentalphysik immer wieder in der selben Weise, was sie besonders bedeutsam als Charakterisierungsmerkmal macht. Wenn beispielsweise Niveaustatistiken wie bei Zufallsmatrizen auftreten, sind vielfach spezielle Details des in dem Sinne aus-

reichend komplexen Systems irrelevant und es kommt nur noch auf die Symmetrien an. So findet man bei der quantenmechanischen Untersuchung von Billards, die sich klassisch chaotisch verhalten, typischerweise die Wigner-Verteilung, wohingegen im klassisch integrablen Fall meist Poisson-Statistik auftritt. Darüber hinaus ist seit einiger Zeit eine weitere scheinbar ähnlich problemübergreifende Verteilung im Gespräch, die sogenannte kritische Statistik. Sie steht in vielerlei Hinsicht zwischen den eben angesprochenen Fällen der Poisson- und der Wigner-Verteilung. Eindrucksvoll und auch naheliegenderweise im hier angesprochenen Rahmen sei das Beispiel des Metall-Isolator-Übergangs im dreidimensionalen Anderson-Modell genannt [16]. Während man, wie schon diskutiert, im Fall großer Unordnung beim Übergang zu großen System die Poisson-Statistik erreicht, bei kleiner Unordnung jedoch das Wigner-Verhalten, gibt es dazwischen eine kritische Unordnungsstärke, an dem die Verteilung der Niveauabstände $P(s)$ von der Systemgröße unabhängig ist. Diese wird durch

$$P_{\text{crit}}(s) = 4s \exp\{-2s\} \quad (8)$$

approximiert [17]. Diese Verteilung verläuft für kleine s linear mit s wie auch die Wigner-Verteilung, für große s hingegen ist das Verhalten ähnlich dem der Poisson-Statistik.

Statistische Eigenschaften des Spektrums finden sich auch in anderen Größen als $P(s)$ wieder. Beispielsweise kann man die Varianz der Anzahl der Energieniveaus innerhalb einer festen Energieintervallgröße untersuchen, die als Σ_2 -Statistik bezeichnet wird, und findet entsprechende Universalitätsklassen [15]. Auch die Krümmungen von Energieniveaus durch Änderung von Randbedingungen, wie sie in dieser Arbeit untersucht werden sollen, weisen für verschiedene Systeme die gleichen typischen Verteilungen [18] auf, zumindest in den Fällen von Poisson- und Wigner-Verteilungen von $P(s)$. Es ist nun naheliegend, ähnliches für den Fall kritischer Statistik zu untersuchen, indem man dies für unterschiedliche Systeme, bei denen man aus der Untersuchung einiger Eigenschaften kritisches Verhalten vermutet, vergleicht. So wurde in [19] ein Vorschlag für die Statistik von Krümmungen am Punkt kritischer Niveaustatistik im dreidimensionalen Anderson-Modell gemacht, auf den später in der Arbeit Bezug genommen werden soll.

2.2 Wechselwirkung: das Hubbard-Modell

In den Arbeiten [20, 21] wurde das wohl einfachste denkbare Modell frei beweglicher wechselwirkender Elektronen in einem Kristallgitter eingeführt, das seitdem unter den Namen Hubbard-Modell diskutiert wird. Es besteht aus einem Gitter, wobei Hüpfen mit einer ortsunabhängigen Hüpfamplitude meist nur zwischen benachbarten Gitterplätzen erlaubt wird. Die Wechselwirkung beschreibt Korrelationen zwischen den Teilchen durch eine Wechselwirkungsenergie, die genau in den Fällen auftritt, in denen sich zwei Elektronen auf demselben Platz befinden und damit aufgrund des Pauli-Prinzips notwendigerweise unterschiedlichen Spin besitzen. Eine solche extrem einfache Wechselwirkung, die darauf beschränkt ist, daß eine Wechselwirkungsenergie auftritt, wenn sich zwei Teilchen auf einem Platz in einem Gittermodell befinden, wird als Hubbard-Wechselwirkung bezeichnet.

Trotz der Einfachheit des Modells ist es äußerst schwierig zu behandeln, weil starke Korrelationen zwischen den Teilchen, wie sie hier beschrieben werden können, nicht mit Hilfe eines effektiven Einteilchenmodells formuliert werden können. Andererseits ist das Modell von großem

Interesse, weil es die Untersuchung über derartige Einteilchenmodelle hinaus ermöglicht. Solche Betrachtungen haben sich wiederum als notwendig erwiesen, um eine Vielzahl von Phänomenen zu beschreiben, wie – nur um Beispiele zu nennen – magnetische Ordnungsphänomene oder bestimmte Metall-Isolator-Übergänge wie den Mott-Hubbard-Übergang, bei dem die Wechselwirkung das System zu einem Isolator macht. Allerdings gibt es nur wenige exakte Lösungen und Aussagen, insbesondere in höheren Dimensionen als Eins. Die ganze Fülle von Arbeitsgebieten, die sich in dem Zusammenhang ergeben haben, sollen hier nicht weiter behandelt werden, denn dies würde den Rahmen bei weitem sprengen.

Eine Kombination aus den beiden vorgestellten Modellen, also der gleichzeitigen Erfassung von Wechselwirkung und Unordnung, ist in früheren Arbeiten zunächst durch störungstheoretische Erweiterungen untersucht worden. Auf die Weise kann man eine Wechselwirkung in das Anderson-Modell einbauen [11]. Andererseits kann man aber auch Unordnung im Hubbard-Modell untersuchen, indem man das Problem in das kontinuierliche Modell einer Luttingerflüssigkeit überführt und mit Methoden der Renormierungsgruppentheorie behandelt [22]. Allerdings erreicht man dabei nie gleichzeitig starke Wechselwirkung und eine starke Unordnung. Eine Erhöhung der Beweglichkeit der Teilchen gegenüber dem Fall mit nur Unordnung oder nur Wechselwirkung wurde nicht beobachtet.

2.3 Unordnung und Wechselwirkung: das TIP-Problem

Nachdem Anderson-Lokalisierung wechselwirkungsfreier Teilchen lange Zeit eingehend studiert wurde und dabei die Theorie sowohl in Experimenten wie auch in numerischen Simulationen bestätigt werden konnte, traten bei Experimenten in ungeordneten mesoskopischen Ringen anormal große Dauerströme auf. Solche Dauerströme bilden einen stromtragenden Gleichgewichtszustand und sind in winzigen normaleitenden Ringen experimentell nur mit extrem hohem Aufwand bei sehr tiefen Temperaturen beobachtbar. In [23] wurden im Mittel über 10^7 Kupferringe Dauerströme gefunden, die um eine Größenordnung über dem aus einer wechselwirkungsfreien Theorie erwarteten Wert lagen. Eine Diskrepanz um zwei Größenordnungen wurde in [24] für drei verschiedene einzelne Goldringe gemessen. Die Beschreibung der Beobachtungen durch eine Theorie, die eine Wechselwirkung zwischen den Teilchen beinhaltet, ist seitdem Gegenstand intensiver Forschung [25, 26].

Motiviert durch die neue Idee, den womöglich erheblichen Einfluß einer Wechselwirkung zwischen den Teilchen vor allem auch qualitativer Art auf Transporteigenschaften zu untersuchen, schlug Shepelyansky in [27] vor wenigen Jahren das System zweier wechselwirkender Teilchen vor. Auf Englisch spricht man von „two interacting particles“, dessen Akronym „TIP“ sich in letzter Zeit eingebürgert hat. Dieses Modell soll zunächst vor allem dazu dienen, ganz allgemein und grundlegend Lokalisierungseigenschaften wechselwirkender Teilchen in ungeordneten Systemen zu untersuchen und zu verstehen. Als einfachster Fall einer Wechselwirkung auf einem Gittermodell, die nach dem Vorschlag von Shepelyansky bereits zur qualitativen Beobachtung des Zusammenspiels ausreichen sollte, wurde eine Hubbard-Wechselwirkung zwischen den Teilchen verwendet. Bis auf Ausnahmen konzentrieren sich die bisherigen Arbeiten auch auf eine solche Wechselwirkung und zudem werden bisher meist nur eindimensionale Systeme diskutiert.

Shepelyansky kam in [27] durch Abschätzung des Hamiltonoperators im wechselwirkenden Fall in der Basis der Eigenzustände ohne Wechselwirkung, Transformation auf eine Bandmatrix

und numerische Untersuchung dieser Bandmatrix zu dem überraschenden Ergebnis, daß die eingeführte kurzreichweitige Wechselwirkung zu einer Delokalisierung der Zustände führen kann. Für die Zweiteilchenlokalisierungslänge L_2 , die die Wellenfunktionen der zwei wechselwirkenden Teilchen bei gemeinsamer Propagation charakterisiert, fand er $L_2 \propto L_1^2$. Das steht kraß im Gegensatz zu den zuvor als typisch angesehenen Folgen einer Wechselwirkung zwischen Teilchen, nämlich der damit verbundenen Lokalisierung der Zustände. Zudem war es auch überraschend, daß das Vorzeichen der Wechselwirkung offenbar nicht von Bedeutung für den erwarteten Delokalisierungseffekt ist.

Es soll nicht versäumt werden, den übrigen Grundagenteil dazu zu verwenden, eine ganze Reihe verschiedener Publikationen der letzten Jahre zum Thema kurz anzusprechen, um die Arbeit inhaltlich in die bestehenden Untersuchungen einzugliedern und nicht zuletzt um auch einige zum besseren Verständnis dieser Arbeit erforderlichen Ergebnisse zusammenzutragen.

Schon ein paar Jahre vor Shepelyanskys Arbeit wurde ein Delokalisierungseffekt im Problem zweier wechselwirkender Teilchen von Dorokhov beschrieben [28], der als Wechselwirkung ein attraktives harmonisches Potential verwendet hat. Damit war die Propagation der Teilchen zwar von vornherein auf eine gemeinsame Propagation eingeschränkt, aber der wesentliche Effekt der erhöhten Lokalisierungslänge wurde damals kaum beachtet. Erst nachdem es eine ganze Reihe von Artikeln zum TIP-Problem gegeben hat, ist die Relevanz dieser frühen Publikation bemerkt worden.

Die verblüffende Beobachtung der Erhöhung der Lokalisierungslänge durch eine Wechselwirkung im von Shepelyansky eingeführten TIP-Problem wurde kurz darauf von Imry aufgegriffen [29] und konnte von ihm durch eine andere Überlegung bestätigt werden. Ausgehend von einer Blockzerlegung eines gedachten ungeordneten Systems mit einer der Lokalisierungslänge der Zustände gleich gewählten Blockgröße, betrachtete er den Einfluß des Zusammenfassens solcher Blöcke auf die Eigenzustände des Gesamtsystems und konnte damit abschätzen, daß im Fall einer Wechselwirkung zwischen Teilchen gegenüber dem nichtwechselwirkenden Fall eine Delokalisierung der Zustände, die sich überhaupt nahe genug kommen und die Wechselwirkung spüren, auftritt. Für diese Zustände erwartete er aufgrund der gemeinsamen Propagation der zwei Teilchen für ladungsabhängige Effekte auch ein der zweifachen Ladung entsprechendes Verhalten. Ähnliches kennt man aus Experimenten mit Supraleitern, bei denen das als Nachweis der Existenz von Cooper-Paaren gilt.

Die Erhöhung der Lokalisierungslänge im TIP-Problem konnte in kurzer Zeit durch verschiedene Methoden bestätigt werden. In [30] wurden zwei Möglichkeiten vorgestellt. Einerseits wurden Transfermatrizen betrachtet, bei denen die Schrödingergleichung auf einem Gittermodell in eine Iterationsvorschrift für die Wellenfunktionen uminterpretiert wird. Durch Multiplikation der aneinandergehörigen Transfermatrizen kann man auf die Weise die räumliche Entwicklung von Wellenfunktionen über größere Distanzen berechnen, und auch deren Lokalisierungslänge. Neben einer analytischen Diskussion wurden diese Transfermatrizen auch numerisch untersucht. Außer der neuerlichen Bestätigung des Effektes wurde hierbei auch beobachtet, daß das Vorzeichen der Wechselwirkung nicht generell unerheblich ist, sondern dies nur in der Bandmitte so zutrifft. Auf der anderen Seite wurde die numerische Transfermatrixmethode, die schon Shepelyansky in [27] verwendet hat, eingehender studiert. Dabei entsteht nämlich eine maximale relative Entfernung der beiden Teilchen voneinander, die eine Wechselwirkung darstellt. In [30] wurde nun der Einfluß der Hubbard-Wechselwirkung durch Selektion von Eigenzuständen, die

von Artefakten des Randes nichts spüren, untersucht und herauspräpariert. Gegenüber Shepelyansky wurde für die Zweiteilchenlokalisierungslänge L_2 das Verhalten $L_2 \propto L_1^{1,65}$ approximiert.

Die gemeinsame Propagation zweier Teilchen im TIP-Problem wurde numerisch in [31] demonstriert, indem die Sensitivität auf ein Magnetfeld, die ja von der Größe der Ladung abhängig ist, untersucht wurde, wie das bereits von Imry in [29] vorgeschlagen wurde. Dabei wurden numerisch die durch die Wechselwirkung entstehenden Paarzustände durch ihr ausgezeichnetes Verhalten gegenüber einem im Ring eingeschlossenen Magnetfeld, nämlich einer halbierten Periodizität der typischen Periode aufgrund der doppelten beteiligten Ladung, bestimmt. Bei der Berechnung solcher Zustände wurde wie erwartet eine erhöhte Lokalisierungslänge in Richtung der Schwerpunktskoordinate der beiden Teilchen gefunden.

Die Berechnung der Lokalisierungslänge durch Greensche Funktionen stellt eine weitere Methode dar, den Einfluß der Wechselwirkung im TIP-Problem zu behandeln [32]. Damit wurde die ursprünglich von Shepelyansky in [27] angegebene Abhängigkeit des Delokalisierungseffektes von der Wechselwirkungsstärke $\propto U^2$ eingehender untersucht und ein anderer Zusammenhang angegeben, nämlich $\propto |U|$. Tatsächlich scheint das Verhalten komplizierter, wie die Ergebnisse aus Untersuchungen von Niveaustatistiken [33] nahelegen. Dort wurde eine Energieskala für die Korrelationen im Spektrum aufgrund der Wechselwirkung und deren Abhängigkeit von der Wechselwirkungsstärke identifiziert, die einen Übergang von $\propto |U|$ bei kleinen $|U|$ zu U^2 für größere $|U|$ aufweist.

Mittels vollständiger Diagonalisierung relativ kleiner Systeme wurde in [34] im Mittel ebenfalls eine Delokalisierung durch Wechselwirkung festgestellt, jedoch konnte dabei gezeigt werden, daß dies keineswegs für alle Zustände in gleicher Weise gilt. Als eine generelle Schwierigkeit dieser Vorgehensweise muß jedoch die Beschränkung der Systemgröße aufgrund des extrem wachsenden Aufwandes angesehen werden. Die hohe Unordnung im System, die somit notwendig wird, um die Zustände auf der Skala $L_1 < L$ zu lokalisieren, führt gleichzeitig zu einer extremen Rasterung für die Zustände und zu kleinen Einteilchenlokalisierungslängen L_1 . Da der Effekt der Vergrößerung der Zweiteilchenlokalisierungslänge L_2 laut Shepelyansky proportional zu L_1^2 geht, sind sehr kleine Einteilchenlokalisierungslängen für die Untersuchung ungeeignet. Auch wenn für den Exponent in späteren Arbeiten etwas andere Werte als 2 gefunden wurden, wird die Delokalisierung durch Wechselwirkung dennoch in größeren Systemen viel deutlicher.

Während der ersten Bearbeitungen des TIP-Problems wurden die teilweise durchaus vagen qualitativen Argumentationen keineswegs allgemein akzeptiert. Auch die genannten numerisch erzielten Ergebnisse wurden zumindest in Teilen verschiedentlich kritisiert. So gab es beispielsweise einen Disput darüber, ob daß die gefundenen Effekte nur Folge der endlichen Systemgröße sein könnten [35, 36, 37]. Auch andere Varianten der Diskretisierung führen zu Ergebnissen [38, 39], die dem bisher angesprochenen scheinbar widersprechen, jedoch lassen sich diese auf die einschneidenden Veränderungen am Modell zurückführen. Zwar handelt es sich bei den Veränderungen nur um den Übergang zu Schwerpunkts- und Relativkoordinaten, auf dem Gitter führt das aber zu qualitativ anderem Hüpfverhalten, weil so ein gemeinsames Hüpfen beider Teilchen eingeführt wird. Im Laufe der Zeit stellt sich also immer deutlicher heraus, welche Annahmen und Probleme den zunächst widersprüchlichen Ergebnissen zu Grunde liegen, so daß ein zunehmend konsistentes Bild entsteht, zu dem auch die vorliegende Arbeit beitragen soll.

Diese Arbeit untersucht numerisch die Krümmungen von Energieniveaus im TIP-Problem, um deren Verhalten im Sinne einer Lokalisierungseigenschaft zu interpretieren. Insbesondere ist

dabei von Interesse, inwiefern die in [40] aufgestellten Abschätzungen der Eigenschaften von solchen Krümmungen im numerischen Experiment reproduziert und auch konkretisiert werden können. Dort ist vorausgesagt worden, daß eine Vergrößerung von Zweiteilchenkrümmungen durch Wechselwirkung genau für die Fälle eintritt, in denen die Zustände durch starke Unordnung stark lokalisiert sind. Dem gegenüber wurde im Fall kleiner Unordnung jedoch eine Verringerung der Zweiteilchenkrümmung durch Wechselwirkung vorhergesagt. Besondere Bedeutung hat dies, weil vor der begonnenen Diskussion des TIP-Problems erwartet worden war, daß Wechselwirkungseffekte zwischen Teilchen stets zur Unterdrückung des Transports führen. Die Untersuchungen, die zu dieser Einschätzung führten, konnten jedoch den Bereich starker Wechselwirkung und starker Unordnung nicht erfassen. Die Krümmungen von Energieniveaus scheinen deshalb geeignete Größen zu sein, diese Fälle starker und schwacher Unordnung zwischen den Teilchen zu verbinden.

Die vorliegende Arbeit ist in einer Publikation [41] als abschließender Beitrag einer vierteiligen Publikationsserie zusammengefaßt worden, in der verschiedene neuere Untersuchungen zum TIP-Problem präsentiert werden. Die Vorstellung bisheriger Publikationen abschließend sollen die anderen Teile dieser Serie angesprochen werden, da sie sehr unterschiedliche und zum Großteil bisher am TIP-Problem noch nicht angewandte Methoden verwenden. Obwohl sie dadurch zunächst ganz unterschiedliche Aspekte diskutieren, birgt gerade ihre gegenseitige Ergänzung die Möglichkeit, ein konsistentes Bild zu entwerfen.

Im ersten Teil [42] wird die Schrödingergleichung mit Wechselwirkung in der Basis von Eigenzuständen des wechselwirkungsfreien Falls geschrieben, wodurch sich eine Kopplung der gewählten Basiszustände ergibt. Für lokalisierte Zustände wird diese Kopplung multifraktal, was eine Korrektur des von Shepelyansky angegebenen Zusammenhangs $L_2 \propto L_1^2$ im Exponenten nach sich zieht und damit eine Erklärung für die Diskrepanzen mit verschiedenen numerischen Untersuchungen liefert. Zudem ist die Multifraktalität insbesondere in Zusammenhang mit dem zweiten Teil der Serie [43] von Interesse. Dort werden Parameterbereiche der Wechselwirkung und Unordnung diskutiert, in denen in der Statistik der Energieniveaus ein kritisches Verhalten auftritt, wie es beispielsweise am Metall-Isolator-Übergang im dreidimensionalen Anderson-Modell ebenfalls gefunden wird. Die Unordnungsstärke muß dazu so gewählt werden, daß die Systemgröße und die Lokalisierungslänge gleich werden und außerdem die Wechselwirkungsstärke so, daß sie in einem Bereich nahe dem maximalen Einfluß der Wechselwirkung liegt. Das typische schwach-chaotische Verhalten der Zustände am möglicherweise universellen Übergang von integrierbaren zu chaotischen Modellen wird mit den multifraktalen Eigenschaften der Kopplung der nichtwechselwirkenden Zustände durch die Wechselwirkung aus [42] in Zusammenhang gebracht. Interessanterweise wird hier aber ein kritisches Verhalten in der Verteilung $P(s)$ und der Σ_2 -Statistik beobachtet, obwohl die Grenzfälle ohne und mit unendlich starker Wechselwirkung beide Poisson-Statistik in $P(s)$ zeigen.

Der dritte Teil [44] betrachtet das Problem zweier wechselwirkender Teilchen durch numerische Simulation der Zeitentwicklung von Zuständen ausgehend von nah beieinanderliegenden Teilchen. Zunächst propagieren die Teilchen innerhalb der Einteilchenlokalisierungslänge ballistisch. Dieser Vorgang wird durch die Wechselwirkung sogar behindert, sodaß die Zeit bis zum Erreichen der Einteilchenlokalisierungslänge anwächst. Danach führt die Wechselwirkung zwischen den Teilchen jedoch zu einer weiteren Delokalisierung bis die Zweiteilchenlokalisierungslänge erreicht ist, wobei die Schwerpunktsbewegung durch ein logarithmisches Zeitgesetz

approximiert wird. Eine direkte Verbindung zur vorliegenden Arbeit entsteht, wenn man die Zeitentwicklung vor Erreichen der Einteilchenlokalisierungslänge mit metallischem, also delokalisiertem Verhalten identifiziert, das nachfolgende Verhalten jedoch mit dem lokalisierten Regime.

Es ist wichtig anzumerken, daß bei den angesprochenen Arbeiten die Effekte in der Mitte des Spektrums oder zumindest bei anderen hoch angeregten Zuständen diskutiert wurden. Das beginnt schon mit den beiden zu Beginn stehenden Publikationen von Shepelyansky [27] und Imry [29], die zunächst ganz allgemein für Zweiteilchenzustände argumentierten, die typischerweise weit vom Grundzustand entfernt sind. Insbesondere muß man dabei nun anmerken, daß eine ähnlich direkte Relevanz von Zuständen in der Bandmitte wie im nichtwechselwirkenden Fall durch Füllung der Zustände bis zur Fermikante hier nicht gegeben ist. Es gibt jedoch gleich mehrere Zielrichtungen, in denen direkte praktische Relevanz des TIP-Problems zu erwarten ist.

Einerseits sind in Halbleitern hochangeregte Elektronen-Loch Paarzustände Beispiele für das TIP-Problem. Ein Experiment mit Halbleiterheterostrukturen, das eine Variation der Wechselwirkung durch Veränderung der Abschirmung der Coulombwechselwirkung zwischen Elektron und Loch mittels freier Ladungsträger in der Umgebung vorsieht, wird zur Zeit diskutiert und vorbereitet [45]. Zwar ist die effektive Teilchenmasse nicht gleich, liegt aber bei entsprechender Materialwahl in der gleichen Größenordnung. Auch das Unordnungspotential, welches die Teilchen spüren, ist nicht identisch, was aber keine wesentliche Rolle zu spielen scheint.

Andererseits sind vor einigen Jahren Experimente gemacht worden, deren Ergebnisse durch die bisherige Theorie der Anderson-Lokalisierung nicht erklärt werden. Es zeichnet sich ab, daß die Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern im Festkörper eine Schlüsselposition für die Deutung haben könnte. Schon Shepelyansky hat in [27] die Einführung des TIP-Problems mit Experimenten zu Dauerströmen in mesoskopischen Ringen begründet, um zunächst von seinem vergleichsweise einfachen Modell ausgehend bereits wesentliche Effekte beobachten zu können. Ob der kompliziertere Fall mehrerer wechselwirkender Teilchen tatsächlich bereits durch das TIP-Problem beschrieben werden kann, ist indes noch nicht geklärt, aber es wurden bereits Untersuchungen mit mehr als zwei Teilchen und denselben Methoden, wie sie jetzt am TIP-Problem erarbeitet werden, begonnen [46]. Neben der Motivation aus den Dauerstromexperimenten wird auch bereits an eine mögliche Erklärung der Experimente [47, 48, 49] gedacht, die metallische Zustände und einen Metall-Isolator-Übergang in zweidimensionalen Silizium-Halbleiterstrukturen finden, welche nach der Theorie der Anderson-Lokalisierung nicht existieren dürften, die aber mittlerweile experimentell in einer ganzen Reihe von Arbeiten auch für andere Systeme nachgewiesen wurden [50, 51, 52, 53]. In [54] wird bei der Diskussion des TIP-Problems in zwei Dimensionen das Entstehen ausgedehnter Zustände beobachtet. Eine Verallgemeinerung des Effekts auf den Leitwert in Vielteilchensystemen ist jedoch offen. Für mögliche Näherungen, wie die Einführung eines Fermisees, in dem die Wechselwirkung zwischen den Teilchen vernachlässigt wird, werden erste Ansätze diskutiert [55, 56].

3 Ein Teilchen im Ring

Zunächst ist es notwendig, den Fall eines Teilchens im Ring genauer zu untersuchen, denn damit läßt sich der Fall mehrerer nichtwechselwirkender Teilchen beschreiben. Dabei stehen hier nur die Aspekte im Mittelpunkt, die für das Verständnis von Zweiteilchenspektren in den Grenzfällen ohne und mit unendlich starker Wechselwirkung notwendig und nützlich sind, damit diese anschließend mit dem um Wechselwirkung ergänzten Problem verglichen werden können.

3.1 Hamiltonoperator für das kontinuierliche Problem

Die Geometrie, die im folgenden stets zu Grunde gelegt wird, ist in Abbildung 3 dargestellt. Es handelt sich um ein eindimensionales System, das zu einem Ring mit dem Radius R geschlossen ist. Die Unordnung wird durch ein Potential V beschrieben und als zusätzlicher äußerer Parameter wird ein zum Ring senkrechtes Magnetfeld B eingeführt. Die Homogenität des Magnetfeldes und auch dessen Wahl senkrecht zum Ring, die bei der folgenden Aufstellung des Hamiltonoperators für das Problem der Verständlichkeit halber verwendet werden, sind nicht wesentlich, denn den tatsächlichen Parameter im Problem bildet der im Ring eingeschlossene magnetische Fluß. Dies wird sich natürlich insbesondere in diesem Spezialfall ergeben, nur läßt die Einschränkung hier eine besonders einfache Schreibweise zu.

In Ortsdarstellung lautet der Hamiltonoperator für diese Problem

$$H_1 = \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right]^2 + V(\vec{r}). \quad (9)$$

Dabei bezeichnet m die Teilchenmasse und \vec{A} das Vektorpotential aufgrund des Magnetfeldes, das in den kanonischen Impuls eingeht. Für die Ladung des Teilchens wird die vorzeichenlose Elementarladung e eines Elektrons angesetzt. Der Betrag der Teilchenladung ist aber nicht weiter von Bedeutung, sondern hat nur auf die verwendete Skala des Magnetfeldes Einfluß, wie sich in Abschnitt 3.2 herausstellen wird. Als ähnlich unerheblich wird sich dort auch die Wahl des Vorzeichens der Ladung zeigen.

Beim Wechsel zu einer dem Problem angepaßten Koordinate, nämlich dem in Abbildung 3 angedeuteten Winkel γ , geht der Impulsoperator in den Drehimpulsoperator senkrecht zur Ringebene über und es entsteht

$$\vec{\nabla} \rightarrow \frac{\vec{e}_\gamma}{R} \frac{\partial}{\partial \gamma}. \quad (10)$$

Das Vektorpotential \vec{A} kann in der Winkelkoordinate γ beispielsweise unter Verwendung der Coulomb-Eichung geschrieben werden. Es folgt

$$\vec{A} \rightarrow \frac{1}{2} RB \vec{e}_\gamma. \quad (11)$$

Statt des Winkels γ kann man auch die Position auf dem Ring $x = \gamma R$ angeben. Unterteilt man den Ring in L Teile, wobei L eine natürliche Zahl sein soll, so daß L Plätze entstehen, kann man diese Ortsangabe auf die Längenskala

$$a = 2\pi R/L \quad (12)$$

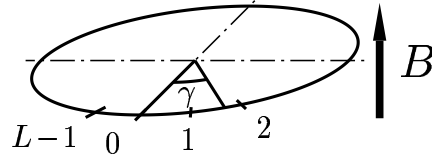


Abbildung 3: Das Problem behandelt Teilchen, die sich auf einem eindimensionalen Ring bewegen.

beziehen. Der Ort auf dem Ring wird dann mit der Zahl $l = x/a$ beschrieben. Die Zahl l ist zunächst reel und liegt in $[0, L)$. Der Hamiltonoperator auf dem Ring wird dadurch

$$H_1 = \frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{a^2} \frac{\partial^2}{\partial l^2} + \frac{i\hbar e}{ac} RB \frac{\partial}{\partial l} + \frac{e^2}{4c^2} R^2 B^2 \right] + V(l). \quad (13)$$

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung für die Wellenfunktion $\psi(l)$ des Teilchens in Ortsdarstellung lautet

$$H_1 \psi(l) = E \psi(l). \quad (14)$$

3.2 Diskretisierung

Eine numerische Behandlung des Problems erfordert die Erfassung der Zustände durch endlich viele Parameter. Die zunächst kontinuierlichen Wellenfunktionen müssen dazu auf einen endlichen Funktionenraum eingeschränkt werden. Eine Möglichkeit ist die Einführung eines Rasters und Beschreibung der Funktion ausschließlich auf den Rasterpunkten. Der dazu wesentliche Schritt wurde durch die Einführung einer Skala für die Angabe der Position auf dem Ring bereits ausgeführt. Statt der kontinuierlichen Wellenfunktion in der Ortsdarstellung werden nun nur noch ganzzahlige Vielfache der Längeneinheit a zugelassen. Das bedeutet, daß die Positionsangabe l für das Teilchen eine natürliche Zahl sein muß. Die Wellenfunktion kann dann mit einem endlichdimensionalen Vektor beschrieben werden. Als Ortsbasis $\{|l\rangle\}$ für die Wellenfunktion kann man Wannier-Funktionen verwenden. Im Zustand $|l\rangle$ ist das Teilchen dabei auf Platz l lokalisiert. In der Vektorschreibweise bedeutet dies eine Eins an der l -ten Position, während alle anderen Einträge Null sind. Unter Ausnutzung der Ringperiodizität wird zudem die Identität

$$|L\rangle \equiv |0\rangle \quad (15)$$

in der Ortsbasis eingeführt, die in vielen Fällen eine abkürzende Schreibweise erlaubt.

Durch den Übergang zu natürlichen Zahlen l ist nun eine Approximation für die Ableitungen der Wellenfunktion nach der Position des Teilchens anzugeben. Damit im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ wieder das exakte Resultat entsteht, muß man den Differenzenquotienten bei endlicher Differenz verwenden. Dabei wird eine symmetrische Darstellung um den Zustand $|l\rangle$ gewählt, um die vorhandene Symmetrie zu erhalten.

$$\frac{\partial}{\partial l} |l\rangle \rightarrow \frac{1}{2} (|l+1\rangle - |l-1\rangle) \quad (16a)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial l^2} |l\rangle \rightarrow |l+1\rangle + |l-1\rangle - 2|l\rangle \quad (16b)$$

Damit wird der Hamiltonoperator H_1 eine Matrix \mathcal{H}_1 und die Schrödingergleichung eine Eigenwertgleichung für diese Matrix.

$$\mathcal{H}_1 = \begin{pmatrix} D_0 & -t^* & 0 & \cdots & 0 & -t \\ -t & D_1 & -t^* & & 0 & 0 \\ 0 & -t & D_2 & & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & & D_{L-2} & -t^* \\ -t^* & 0 & 0 & \cdots & -t & D_{L-1} \end{pmatrix}. \quad (17)$$

Die auftretenden Diagonalterme D_l lauten dabei

$$D_l = \underbrace{\frac{e^2 R^2 B^2}{8mc^2} + \frac{\hbar^2}{ma^2}}_C + V_l. \quad (18)$$

Durch Festlegung eines geeigneten Energienullpunktes kann man die Konstante C Null setzen. Man muß dann allerdings beachten, daß diese Wahl vom Wert des Magnetfeldes B abhängt. Betrachtet man Änderungen von Energien unter Variation des Magnetfeldes, wird dieser feste Einfluß des Feldes entsprechend ignoriert. Insbesondere kann man bei den Krümmungen von Energien unter Variation des Magnetfeldes einen konstanten Anteil identifizieren, der durch Setzen von $C = 0$ und damit $D_l = V_l$ nicht mehr auftritt.

Die Nichtdiagonaleinträge von \mathcal{H}_1 beinhalten das Hüfelement

$$t = \underbrace{\frac{\hbar^2}{2ma^2}}_F \exp \left\{ \frac{iaeRB}{2\hbar c} \right\}. \quad (19)$$

Bei der Rechnung erhält man nicht direkt die Exponentialfunktion, sondern als Folge der Näherung der Ableitungen die ersten zwei Terme ihrer Taylorreihe. Da das Magnetfeld wie im kontinuierlichen Problem aber nur Einfluß auf die Phase haben darf, ist diese Interpretation als Phasenverschiebung notwendig.

Um die Schreibweise übersichtlicher zu gestalten, kann man zu einer Energieskala übergehen, in der der Vorfaktor F Eins ist. Das Potential V wird dann wie auch alle anderen Energien in Vielfachen von F angegeben. Zudem ist es sinnvoll, statt des Magnetfeldes den magnetischen Fluß durch den Ring φ , sowie dessen Verhältnis ϕ zum Flußquant φ_0 einzuführen:

$$\varphi = \pi R^2 B, \quad \varphi_0 = \frac{hc}{e}, \quad \phi = \frac{\varphi}{\varphi_0}. \quad (20)$$

Damit wird das Hüfelement t zu

$$t = \exp \left\{ \frac{2\pi i}{L} \phi \right\}. \quad (21)$$

Daß als Skala für den eingeschlossenen magnetischen Fluß φ gerade das Flußquant φ_0 auftritt, ist Folge der Wahl der Elementarladung als Teilchenladung. Das Vorzeichen der Ladung des Teilchens schlägt sich zudem nur im Vorzeichen des Imaginärteiles des Hüpfmatrixelements t nieder; statt des genannten Hüpfmatrixelements t tritt das komplex konjugierte dessen auf. Der

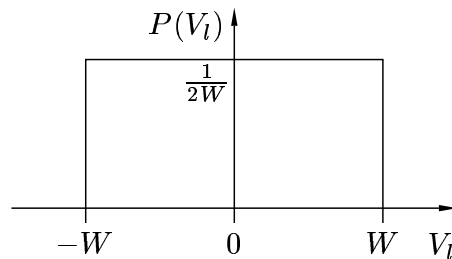


Abbildung 4: Zur Modellierung der Unordnung V_l auf den Plätzen $l = 0, \dots, L - 1$ wird eine Kastenverteilung der Breite $2W$ verwendet.

Übergang zu der komplex konjugierten Matrix etwa durch Wechsel des Vorzeichens der Ladung oder auch einen Vorzeichenwechsel des eingeschlossenen magnetischen Flusses ϕ verändert jedoch die Eigenwerte der hermiteschen Matrix und damit die Eigenenergiezustände des Systems nicht. Diese Unabhängigkeit insbesondere vom Vorzeichen von ϕ wird später noch an Beispielen zu sehen sein sowie auch für die numerische Berechnung von Krümmungen ausgenutzt.

Im Rahmen der Diskretisierung des Modells ist auch die Wahl des Potentials V_l , das die Unordnung beschreibt, auf den L Plätzen festzulegen. Dazu werden Zufallszahlen aus dem Bereich $[-W : W]$ verwendet, die unabhängig voneinander für jeden Gitterplatz gewählt werden. Die Verteilung, mit der die Zufallszahlen gezogen werden, ist ein Kasten, wie in Abbildung 4 dargestellt ist.

3.3 Unterschiede zwischen dem kontinuierlichen und dem diskreten Modell

Das nun entstandene diskrete Modell weist ein paar wesentliche Unterschiede gegenüber dem kontinuierlichen Ansatz auf, die hier kurz angesprochen werden sollen. Das ist insbesondere notwendig, um die Parameter des Modells richtig zu interpretieren.

Die in Gleichung (12) eingeführte Längenskala a , auf die sich die Diskretisierung bezieht, wurde stets als fest angenommen. Insbesondere tritt sie in Form des auf Eins gesetzten Parameters F als Konstante in der Energieskala in Gleichung (19) auf. Das bedeutet, daß unterschiedliche L im diskreten Modell als unterschiedliche Ringgrößen R interpretiert werden müssen, nicht jedoch als unterschiedliche Auflösung des diskreten Modells.

Im kontinuierlichen Fall gibt es beliebig hoch angeregte Zustände, da der Impuls und damit die kinetische Energie des Teilchens beliebig hohe Werte annehmen kann. Nach der Diskretisierung bleiben jedoch nur noch L Energiezustände übrig also insbesondere nur noch endlich viele, weil die kinetische Energie durch die Diskretisierung beschränkt wird. Das somit entstandene Energie-„band“ aus einer endlichen Anzahl von Zuständen ist aber ein durchaus erwünschter Effekt, da im Festkörper aufgrund der Gitterperiodizität ebenfalls Energiebänder auftreten. Diese besitzen dort tatsächlich eine kontinuierliche Zustandsdichte, weil es sich um makroskopische Systeme handelt.

Die voneinander unabhängige Wahl des Potentials für jeden Gitterpunkt führt ebenfalls zu einer deutlichen Abweichung vom kontinuierlichen Problem. Insbesondere kann man keinen Grenzübergang zu beliebig feiner Auflösung mittels Verkleinerung der Längenskala a bei fester Ringgröße R durchführen, ohne eine Korrelation zwischen benachbarten Potentialwerten im diskreten Modell einzuführen. Das wird hier jedoch nicht weiter diskutiert, denn der ursprüngliche

kontinuierliche Ansatz sollte vor allem der Motivation des Modells dienen. Die Arbeiten [38, 39] zeigen jedoch, daß man diesen Unterschied nicht vernachlässigen darf.

3.4 Magnetischer Fluß als Randbedingung

Der Hamiltonoperator für ein Teilchen im Ring lautet nach der Diskretisierung

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{l=0}^{L-1} \left(V_l |l\rangle \langle l| - t |l+1\rangle \langle l| - t^* |l\rangle \langle l+1| \right) \quad (22)$$

Dabei ist das Hüfelement t eine komplexe Zahl mit Betrag 1. Man kann nun untersuchen, wie sich der Hamiltonoperator unter Variation der Phase der Wellenfunktion transformiert. Dazu kann man den Hamiltonoperator in einer neuen Basis schreiben. Speziell seien hier die Zustände $\{|l\rangle\}$ betrachtet, die aus der ursprünglichen Basis gebildet werden gemäß

$$|l\rangle = t^l |l\rangle. \quad (23)$$

In dieser Basis wird der Hamiltonoperator zu

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{l=0}^{L-1} V_l |l\rangle \langle l| - \sum_{l=0}^{L-2} \left(|l+1\rangle \langle l| + |l\rangle \langle l+1| \right) - t^L |0\rangle \langle L-1| - t^{*L} |L-1\rangle \langle 0|. \quad (24)$$

In der gewählten Basis $\{|l\rangle\}$ tritt der magnetische Fluß also nur noch in den Übergangselementen t^L und t^{*L} zwischen dem Platz 0 und dem Platz $L-1$ auf. Durch Verwendung der Basis

$$\underline{|l\rangle} = \begin{cases} t^l |l\rangle & \text{falls } l \leq m \\ t^{l-L} |l\rangle & \text{sonst} \end{cases} \quad (25)$$

läßt sich durch verschiedene ganzzahlige $m = 0, \dots, L-2$ auch jede andere Position im Ring als Position der Übergangselemente t^L und t^{*L} einstellen.

Die Eigenenergien des Systems, die natürlich unabhängig von der gewählten Basis der Wellenfunktionen die Eigenwerte des Hamiltonoperators sind, sind somit statt von t und t^* nur von t^L und t^{*L} abhängig, die direkt als Exponentialfunktionen geschrieben werden können:

$$t^L = \exp\{2\pi i \phi\}, \quad (26a)$$

$$t^{*L} = \exp\{-2\pi i \phi\}. \quad (26b)$$

Daraus folgt sofort die Periodizität mit der Periode 1 der Eigenenergien des Systems als Funktion von ϕ , also des magnetischen Flusses φ mit der Periode φ_0 , dem magnetischen Flußquant.

3.5 Einteilchenenergieniveaus als Funktion des magnetischen Flusses

Die Abbildung 5 zeigt an Beispielen das typische Verhalten der Energieniveaus eines Rings mit $L = 25$ Plätzen als Funktion des im Ring eingeschlossenen magnetischen Flusses ϕ bei unterschiedlich starker Unordnungsstärke W . Man erkennt deutlich die Periodizität im magnetischen Fluß φ für Vielfache des magnetischen Flußquants φ_0 , weshalb sich für $\phi = \varphi/\varphi_0$ die Periode 1 ergibt. Auch die Symmetrie um $\phi = 0$ und damit auch um $\phi = n$ mit ganzzahligen n ist klar erkennbar, sowie die daraus auch direkt folgende Symmetrie bezüglich $\phi = n + 1/2$.

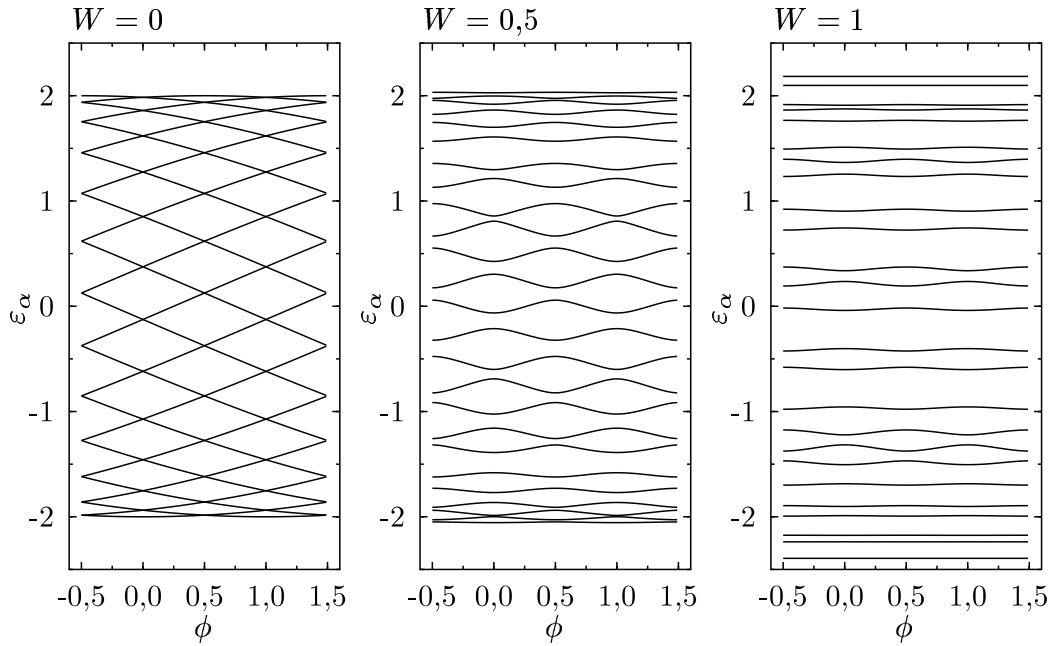


Abbildung 5: Beispiele der Abhängigkeit der Energieniveaus ε_α vom magnetischen Fluß ϕ bei zunehmender Unordnungsstärke W für ein Teilchen auf einem Ring mit 25 Plätzen anhand jeweils einer zufälligen Realisierung der Unordnung.

Der in Abbildung 5 links dargestellte Fall ohne Unordnung kann sehr einfach analytisch bestimmt werden. Der Hamiltonoperator und die Schrödingergleichung lauten in diesem Fall

$$\tilde{\mathcal{H}}_1 = - \sum_{l=0}^{L-1} (t|l+1\rangle\langle l| + t^*|l\rangle\langle l+1|), \quad (27a)$$

$$\tilde{\mathcal{H}}_1|\tilde{\psi}_\alpha\rangle = \tilde{\varepsilon}_\alpha|\tilde{\psi}_\alpha\rangle. \quad (27b)$$

Die Lösung sind ebene Wellen und man erhält

$$\langle l|\tilde{\psi}_\alpha\rangle \propto \exp\{ik_\alpha l\}, \quad (28a)$$

$$\tilde{\varepsilon}_\alpha = -2 \cos\left(\frac{2\pi}{L}\phi + k_\alpha\right), \quad (28b)$$

wobei die Wellenzahl k_α der Zustände $\alpha = 0, \dots, L-1$ gegeben ist durch

$$k_\alpha = \frac{2\pi}{L}\alpha. \quad (29)$$

Die Gleichungen werden zwar auch durch beliebige andere ganzzahlige α gelöst, jedoch entstehen aufgrund der Periodizität der auftretenden Funktionen beim Übergang $\alpha \rightarrow \alpha + mL$ mit ganzzahligen m keine weiteren Lösungen. Zudem muß man bei der analytischen Lösung des unordnungsfreien Falls beachten, daß die Eigenenergien $\tilde{\varepsilon}_\alpha$ nicht nach steigender Energie sortiert sind. Insbesondere ist die auftretende zweifache Entartung für $\phi = 0$, wie sie in Abbildung 5 im links dargestellten Fall ohne Unordnung zu sehen ist, nicht durch benachbarte k_α gegeben, sondern als direkte Folge der Ringsymmetrie durch Paare k_α und $k_{-\alpha} = -k_\alpha$.

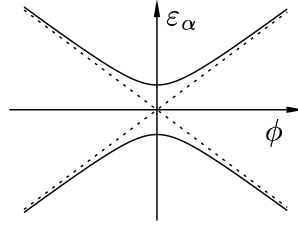


Abbildung 6: Skizze zur Aufhebung der Entartung von Zuständen durch die von der Unordnung erzeugte Kopplung.

In der Mitte und rechts in Abbildung 5 sind die Energieniveaus als Funktion des Flusses bei je einer Beispielrealisierung der Unordnung mit zunehmender Unordnungsstärke W gezeigt. Die Energieniveaus werden durch die Unordnung geglättet und die Entartungen, die ohne Unordnung auftreten, werden aufgehoben. Dieses typische Verhalten kann man erklären, wenn man berücksichtigt, daß das Potential im allgemeinen zu einer Kopplung entarteter Eigenzustände ohne Unordnung führt. Dazu betrachtet man den Hamiltonoperator \mathcal{H}_1 in der Basis zweier entarteter Eigenzustände ohne Unordnung. Die Kopplung dieser zwei Zustände führt im Hamiltonoperator zu Nichtdiagonalelementen ξ .

$$\mathcal{H}_1 = \begin{pmatrix} \phi & \xi^* \\ \xi & -\phi \end{pmatrix} \quad (30)$$

Die Eigenenergien sind entsprechend der zeitunabhängiger Schrödingergleichung die Eigenwerte des Hamiltonoperators. Im Fall ohne Unordnung ($\xi = 0$) ergeben sich also die für dieses einfache Beispiel angesetzten Funktionen ϕ und $-\phi$, die bei $\phi = 0$ entartet sind. Mit endlicher Kopplung ξ erhält man die Hyperbeln $\sqrt{\phi^2 + |\xi|^2}$ und $-\sqrt{\phi^2 + |\xi|^2}$. In Abbildung 6 ist dieses Verhalten skizziert. Eine wesentliche Erkenntnis hieraus ist, daß die Energieniveaus nach der Einführung einer Kopplung nicht mehr entartet sind, sich also als Funktion des Flusses nicht mehr berühren oder kreuzen.

3.6 Einteilchenzustandsdichte

Um nachfolgend die Einteilchenkrümmungen als Funktion der Energie und später auch die Kombinationen von Einteilchenzuständen zu wechselwirkungsfreien Zweiteilchenzuständen diskutieren zu können, ist es notwendig, einige Eigenschaften der Einteilchenzustandsdichte zusammenzutragen. Dazu sind in Abbildung 7 Beispiele für Zustandsdichten bei unterschiedlicher Unordnungsstärke im Mittel über sehr viele Realisierungen der Unordnung dargestellt. Die Zustandsdichten wurden numerisch bestimmt, indem das Eigenwertproblem, welches die diskretisierte Schrödingergleichung definiert, im Fall ohne eingeschlossenen magnetischen Fluß ϕ und mit Zufallszahlen für das Unordnungspotential, gelöst wurde. Die dazu notwendige Berechnung der Eigenwerte erfolgte mittels mathematischer Standard-Bibliotheken.

Im Fall ohne Unordnung kann man die Zustandsdichte aus der analytischen Lösung nach Abschnitt 3.5 bestimmen und erhält

$$\varrho_1(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{L}{2\pi\sqrt{1-(\frac{\varepsilon}{2})^2}} & \text{falls } |\varepsilon| \leq 2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (31)$$

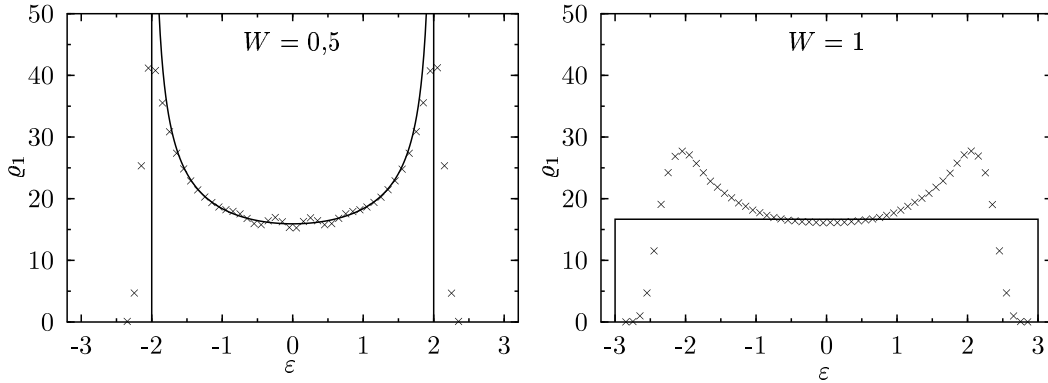


Abbildung 7: Zustandsdichten für ein Teilchen im Ring mit 100 Plätzen und unterschiedlicher Unordnungsstärke W . Die Kreuze sind numerische Ergebnisse im Mittel über 100 000 Realisierungen der Unordnung und die durchgezogenen Linien sind die im Text besprochenen Approximationen für Grenzfälle sehr kleiner und sehr großer Unordnung. Die für kleine Unordnung in der Mitte des Spektrums zu erkennenden Abweichungen sind Folge der endlichen Systemgröße kombiniert mit hoher energetischer Auflösung und geringer Unordnungsstärke. In diesem Fall wird nämlich die diskrete Zustandsdichte des unordnungsfreien Falls unzureichend geglättet.

Dabei wurde vorausgesetzt, daß die Energie eine Funktion einer reellen Zustandsnummer α ist. Für natürliche Zustandsnummern α ist die Zustandsdichte eine Summe von Delta-Funktionen, deren Dichte entsprechend variiert, während bei kontinuierlicher Betrachtung eine Mittelung über die Delta-Funktionen entsteht. An den Rändern des Spektrums bei $|\varepsilon| = 2$ treten van Hove Singularitäten in der Zustandsdichte auf.

Wie in Abbildung 7 anhand der eingezeichneten gestrichelten Kurve im Fall kleinerer Unordnung dargestellt ist, ist dieser im Grenzfall analytisch gegebene Ausdruck für die Zustandsdichte eine gute Approximation im Fall kleiner Unordnung. Insbesondere führt die Unordnung im Mittel über viele Realisierungen zu einer Verschmierung der Delta-Funktionen in der Zustandsdichte, genau wie es bei der analytischen Lösung auch angesetzt wurde. Abbildung 7 zeigt, daß diese Tendenz bei größerer Unordnung zu einer immer weiteren Glättung der Zustandsdichte führt. Gleichzeitig werden die Ränder im Spektrum, bis zu denen Zustände auftreten, nach außen verschoben. Da die kinetische Energie aufgrund der Diskretisierung in immer gleicher Weise beschränkt bleibt und einen Beitrag $|\varepsilon| < 2$ zur Bandbreite liefert, und gleichzeitig die potentielle Energie durch die Unordnungsverteilung gemäß Abbildung 4 betragsmäßig durch W begrenzt ist, ergibt sich für die Bandbreite eine Abschätzung nach oben durch $4 + 2W$. Im Fall großer Unordnung wird durch die zunehmend gleichmäßige Verteilung der Zustände innerhalb dieses Bereiches eine Approximation der Zustandsdichte durch einen Kasten der Breite $4 + 2W$ und einer Höhe $L/(4 + 2W)$, die aus der Normierung auf die Anzahl der Zustände L gegeben ist, recht gut. Allein die Ränder des Spektrums werden natürlich nicht so gut wiedergegeben. Bei starker Unordnung wird also die Energieabhängigkeit der Zustandsdichte vergleichsweise gering. In weiten Bereichen kann der mittlere Niveauabstand Δ_1 deshalb energieunabhängig durch die Näherungsformel

$$\Delta_1 \approx \frac{4 + 2W}{L} \quad (32)$$

abgeschätzt werden.

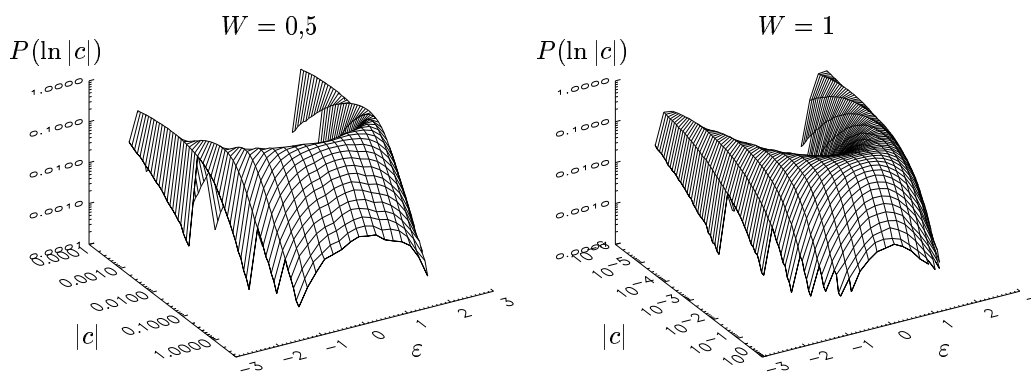


Abbildung 8: Übersichtsdarstellung der Verteilungen $P(\ln |c|)$ der Krümmungen c für ein Teilchen im Ring mit 100 Plätzen bei unterschiedlicher Unordnungsstärke W im Mittel über 100 000 Realisierungen der Unordnung.

3.7 Einteilchenkrümmungen

Als Krümmungen c_α von Energieniveaus ε_α bezeichnet man deren zweite Ableitung nach einem äußeren Parameter, in diesem Fall dem magnetischen Fluß ϕ :

$$c_\alpha = \left. \frac{\partial^2 \varepsilon_\alpha}{\partial \phi^2} \right|_{\phi=0}. \quad (33)$$

Wie in Anhang A vorgeführt wird, kann man durch eine störungstheoretische Rechnung zweiter Ordnung im magnetischen Fluß ϕ diese zweite Ableitung aus den Eigenenergien und Eigenzuständen ohne magnetischen Fluß berechnen. Damit kann man die Krümmungen numerisch ermitteln, indem man das Eigenwertproblem, welches die Schrödingergleichung definiert, für $\phi = 0$ löst und gemäß Anhang A die Krümmungen berechnet. Neben den Eigenwerten wie bei der Berechnung der Zustandsdichte im vorherigen Abschnitt müssen dazu außerdem die Eigenvektoren bestimmt werden, was ebenfalls mit numerischen Standard-Bibliotheken geschieht. Die so erhaltenen Ergebnisse kann man wiederum über viele Realisierungen der Unordnung mitteln. Abhängig von der energetischen Position im Spektrum ε ergeben sich Wahrscheinlichkeitsdichten $P(\ln |c|)$, wie sie in den Übersichtsdarstellungen in Abbildung 8 dargestellt sind.

In Abbildung 9 hingegen sind einige Beispiele dieser Verteilung $P(\ln |c|)$ bei festen Positionen E im Spektrum gezeigt. Daraus können typische Krümmungen ermittelt werden, die das mittlere Verhalten unabhängig von einer speziellen Wahl der Unordnung zusammenfassen und somit allgemeine Aussagen im Unordnungsmittel zulassen. Das Verfahren, welches dazu hier im folgenden diskutiert und anschließend verwendet wird, hat sich nicht nur im Einteilchenfall bewährt, sondern kann aus den gleichen Gründen wie hier später auch für zwei Teilchen mit Wechselwirkung angewendet werden.

Aus Stabilitätsgründen wird bei der Bestimmung typischer Krümmungen stets das Maximum einer in ihren Parametern durch Minimierung der Fehlerquadrate optimal angepaßten Gaußkurve an die Verteilung $P(\ln |c|)$ verwendet. Damit erhält man einen Mittelwert, der mit $\langle \ln |c| \rangle$ bezeichnet wird und der gegenüber einer einfachen arithmetischen Mittelwertbildung $\overline{\ln |c|}$ oder auch $\overline{|c|}$ schon für deutlich weniger Realisierungen der Unordnung numerisch gut reproduzierbar ist. Typische Werte der Krümmung selbst erhält man aus dieser Mittelwertbildung durch

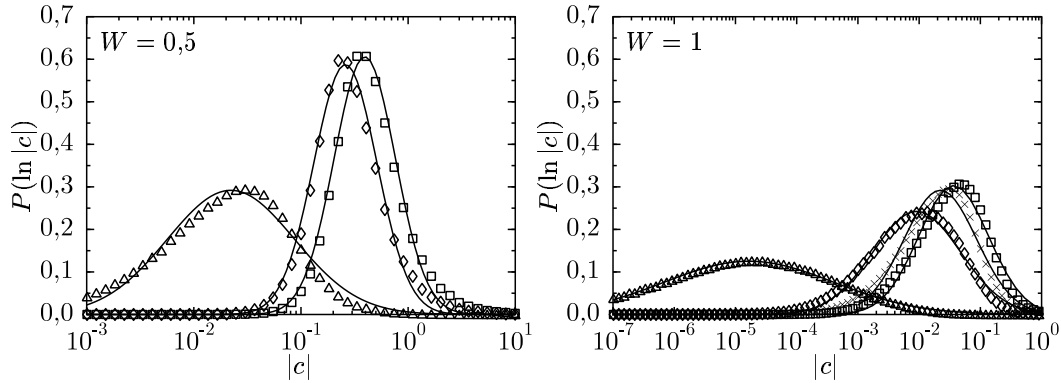


Abbildung 9: Verteilungen $P(\ln|c|)$ für ein Teilchen im Ring mit 100 Plätzen bei unterschiedlicher Unordnungsstärke W im Mittel über 100 000 Realisierungen der Unordnung. Die dreieckigen Symbole ergeben sich bei Mittelung über Energien E zwischen $-1,8$ bis $-1,6$ des Spektrums, die Rauten für -1 bis $-0,8$ und die Quadrate für $-0,2$ bis 0 . Die durchgezogenen Linien sind Gaußverteilungen mit Argument $\ln|c|$, die in Mittelwert und Breite durch Minimierung der Summe der quadrierten Differenzen zwischen Punkten und Verteilungskurve bestmöglich angepaßt wurden. Die Kreuze in der rechten Abbildung (bei größerer Unordnungsstärke) sind die Dreiecke aus der linken Abbildung (geringere Unordnungsstärke).

$$c_{\text{typ}} = \exp\{\langle \ln|c| \rangle\}. \quad (34)$$

Neben dem typischen Wert für die Krümmungen variiert auch die Verteilung der Krümmungen. Die gute Approximation der Krümmungsverteilung im wechselwirkungsfreien Anderson-Modell durch eine Gaußkurve bei starker Unordnung im somit lokalisierten Bereich ist bereits eingehender untersucht worden [57] und konnte auch analytisch gezeigt werden [58]. Im diffusiven Bereich hingegen ist die Systemgröße kleiner als die Lokalisierungslänge, aber immer noch größer als die mittlere freie Weglänge. Dann ergibt sich ein Verhalten [57, 59, 60], das gut durch eine aus der Betrachtung von Zufallsmatrizen erhaltenen Form [61] approximiert wird. Im ballistischen Bereich schließlich ist die Systemgröße sogar kleiner als die mittlere freie Weglänge, was wiederum eine andere Krümmungsverteilung liefert [62]. Auch für den kritischen Fall am Metall-Isolator-Übergang gibt es einen Vorschlag für die Form der Verteilung [19]. Auf diese Diskussion der Verteilungen wird in Kapitel 6 im Detail eingegangen.

Die hier verwendete Mittelungsprozedur zur Bestimmung der typischen Krümmungen ist in Zusammenspiel mit der Verteilung der Krümmungen jedenfalls nicht Ursache für die Veränderung des Mittelwerts, wie sie später untersucht werden, denn bereits im ersten Moment der Verteilung der Logarithmen der Krümmungen¹ tritt dieser Effekt deutlich auf. Unterschiedliche getestete Methoden zur Bestimmung der typischen Krümmungen, sowohl einfache arithmetische Mittel wie auch verschiedene Approximationsfunktionen, haben qualitativ stets zu dem selben Verhalten geführt. Einzig die Absolutwerte der typischen Krümmungen hängen vom gewählten Verfahren der Mittelwertbildung ab, so daß die qualitativen und – bis auf für die diskutierten Eigenschaften nicht weiter wesentliche Nuancen – auch die quantitativen Effekte der nachfolgenden Untersuchungen unabhängig von dieser speziellen Wahl der Mittelungsprozedur sind. An den entsprechenden Stellen, wo Absolutwerte der typischen Krümmungen explizit in die

¹Das gilt auch bereits für die Krümmungen selbst, allerdings werden solche Mittelwerte nur nach sehr aufwendigen Unordnungsmitteln numerisch einigermaßen stabil.

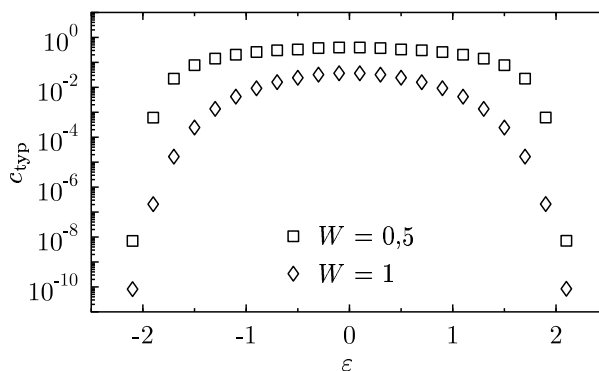


Abbildung 10: Typischen Krümmungen als Funktion der Energie der Zustände E für ein Teilchen im Ring mit 100 Plätzen bei unterschiedlicher Unordnungsstärke W im Mittel über 100 000 Realisierungen der Unordnung.

Diskussion einbezogen werden, wird auf dieses Problem ihres von der Bestimmungsmethode ein wenig abhängigen Absolutwertes jedoch nochmals hingewiesen.

In Abbildung 10 sind diese typischen Krümmungen c_{typ} für verschiedene Unordnungsstärken aufgetragen. Dabei ist offensichtlich, daß die Krümmungen durch stärkere Unordnung deutlich verringert werden sowie in der Bandmitte ein Maximum besitzen. Aufgrund der schon diskutierten Aufhebung der Entartung durch Unordnung kann man für schwache Unordnung eine Approximation der typischen Krümmungen angeben. Nimmt man an, daß bei der Aufhebung der Entartung durch Unordnung, wie im vorhergehenden Abschnitt 3.5 beschrieben, die Kopplung ξ zwischen den Niveaus im Mittel nicht von den betrachteten Zuständen abhängt, kann man die auftretende Krümmung aus dem Anstieg im Fall ohne Unordnung ermitteln. Danach ist die Krümmung proportional zum Quadrat des Anstiegs der Energieniveaus. Der Anstieg selbst ist, wie aus der analytischen Lösung (28b) ablesbar, sinusförmig mit der Zustandsnummer verknüpft, weshalb gilt

$$c_{\text{typ}}^{\text{theo}}(\alpha) \propto \sin^2\left(\pi \frac{\alpha}{L}\right). \quad (35)$$

Auf der linken Seite in Abbildung 11 wurde dabei eine Auftragung gegenüber der Zustandsnummer α gewählt, weil man auf diese Weise direkt die hervorragende Qualität dieser einfachen Approximation erkennt. Einzig die beiden Zustände genau in der Mitte des Spektrums scheinen dem Zusammenhang nicht zu gehorchen. Dies tritt in dieser Weise aber nur für geradzahlige Ringgrößen L auf. Ursache ist die spezielle Form der beiden beteiligten Zustände, deren Entartung in diesem Fall aufgehoben wird. An der Entartungsstelle $\phi = 0$ kann man die Zustände ohne Unordnung nämlich statt als Exponentialfunktionen auch in einer anderen Linearkombination als einen Sinus und einen Cosinus schreiben, die abwechselnd auf jedem zweiten Gitterplatz verschwinden. Führt man nun die Wechselwirkung in Form einer Störungstheorie ein, verschindet deshalb die Korrektur der Eigenenergien dieser beiden Zustände in erster Ordnung. Die Kopplung der Zustände durch eine Unordnung ist deshalb geringer und die Krümmungen entsprechend größer.

Rechts in Abbildung 11 wurde statt der Auftragung über der Zustandsnummer α eine Auftragung über der Energie ε im Spektrum gewählt. Die Umrechnung erfolgt mittels der Zustandsdichte nach Gleichung (31) und es entsteht

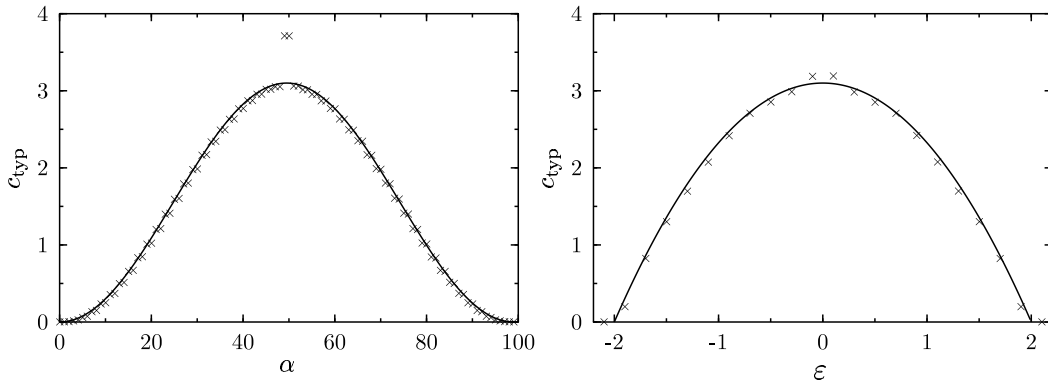


Abbildung 11: Vergleich der typischen Krümmungen (Kreuze) mit theoretischen Abschätzungen (durchgezogene Linien) für den Fall geringer Unordnung $W = 0,1$ im Ring mit 100 Plätzen im Mittel über 100 000 Realisierungen der Unordnung. Links ist eine Auftragung gegenüber der Nummer der Zustände α und rechts gegenüber der Energie ϵ im Spektrum zu sehen. Die Abweichungen in der Mitte des Spektrums treten nur für geradzahlige Ringgrößen auf und werden im Text näher erläutert.

$$c_{\text{typ}}^{\text{theo}}(\epsilon) \propto 1 - \left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2. \quad (36)$$

Die angegebenen Abschätzungen für das Verhalten der typischen Krümmungen sind im Fall kleiner Unordnung sehr gut. Die Abschätzung als Funktion der Zustandsnummer ist für Einteilchenlokalisierungslängen größer der Systemgröße gut. Als Funktion der Energie im Spektrum darf zudem die absolute Unordnungsstärke W nicht zu groß werden, da sonst die eingehende Approximation der Zustandsdichte nach Gleichung (31) schlecht wird, wie schon anhand der Abbildung 7 gezeigt wurde.

In Abbildung 11 links ist zudem klar zu sehen, daß für schwache Wechselwirkung die ohne Unordnung entarteten Zustände deutlich als Paare erhalten bleiben. Das Vorzeichen zweier solcher ohne Unordnung entarteter Zustände ist dabei generell verschieden. Der untere der beiden Zustände eines solchen Paares hat dabei stets eine negative Krümmung, der obere hingegen positive Krümmung. Das ist aufgrund der Aufhebung der Entartung entsprechend Abbildung 6 auch zu erwarten. Nicht so naheliegend ist hingegen, daß dieses alternierende Vorzeichen der Krümmungen als Funktion der Nummer des Zustandes beginnend mit einem positiven Vorzeichen für den Grundzustand für jede beliebige Realisierung der Unordnung auftritt und nicht nur im Grenzfall kleiner Unordnung. Das ist von erheblicher Bedeutung für die Kombination solcher Krümmungen zu Mehrteilchenzuständen, weil es eine gleichmäßige Verteilung der Vorzeichen der Krümmungen im gesamten Spektrum impliziert.

Um dieses alternierende Vorzeichen der Krümmungen als Funktion der Nummer des Zustandes zu erklären, muß man für dieses eindimensionale System für eine beliebige Unordnung zunächst zeigen, daß die erste Ableitung der Energieniveaus ϵ_α nach dem magnetischen Fluß ϕ genau für die Fälle ganzzahliger 2ϕ verschwindet. Das wird im einzelnen in Anhang B vorgeführt. Betrachtet man also ein Energieniveau im Bereich zwischen $\phi = 0$ und $\phi = 1/2$ bei beliebiger Unordnung, liegt Maximum und Minimum des Energieniveaus als Funktion von ϕ stets an den Rändern, da nur hier die ersten Ableitungen nach dem Fluß verschwinden. Läßt man eine solche beliebige Unordnung nun in Gedanken gegen Null gehen, müssen sich die Energieniveaus kontinuierlich dem Fall ohne Unordnung annähern, da die Energieniveaus als Eigenwerte des

Hamiltonoperators stetig von den Matrixelementen und somit auch der Unordnung abhängen. Bei einer solchen Variation der Unordnung müssen nun Maximum und Minimum des Energieniveaus immer an den Rändern des Bereiches $\phi = 0$ bis $\phi = 1/2$ liegen und dürfen auch nicht vertauschen oder den gleichen Wert annehmen, denn das wird durch die generelle Forderung, daß die erste Ableitung innerhalb des Bereiches $0 < \phi < 1/2$ ungleich Null sein muß, verhindert. Damit muß natürlich auch das Vorzeichen der zweiten Ableitung bei $\phi = 0$ und $\phi = 1/2$, das bestimmt, ob ein Minimum oder ein Maximum vorliegt, erhalten bleiben, wenn man die Unordnung gedanklich gegen Null gehen läßt. Als weitere Folge der Aufhebung der Entartung, die das Vorzeichen der Krümmung im Grenzfall beliebig kleiner Unordnung festlegt, ist das Vorzeichen demnach auch für eine beliebige Realisierung der Unordnung allein aus der Nummer des Zustandes bestimmt.

Von diesem soweit also sehr gut verständlichen Grenzfall kleiner Unordnung ausgehend, werden bei stärkerer Unordnung die Krümmungen deutlich kleiner, wie es schon in Abbildung 10 gezeigt wurde. Zudem entstehen an den Rändern des Spektrums bei starker Unordnung immer mehr Zustände mit extrem kleinen Krümmungen, da in den dann sehr großen Potentialmulden einzelne Zustände lokalisieren.

Auch den Betrag der in der Mitte des Spektrums auftretenden typischen Krümmungen kann man von der Größenordnung her angeben. Kennt man die Einteilchenlokalisierungslänge L_1 , wie sie in früheren Arbeiten diskutiert wurde [13] und abgeschätzt werden kann durch

$$L_1 \approx \frac{25}{W^2}, \quad (37)$$

kann man einen funktionalen Zusammenhang zwischen Unordnungsstärke W , Systemgröße L und maximalen typischen Krümmungen c_{\max} , die in der Mitte des Spektrums auftreten, angeben. Da die Wellenfunktionen für $L_1 \ll L$ mit $\exp\{-l/L_1\}$ entlang der Systemkoordinate l abfallen, und die Krümmungen den Einfluß einer Randbedingung messen, der entsprechend genauso klein wird, entsteht

$$c_{\max} \propto \exp\left\{-\frac{LW^2}{25}\right\}. \quad (38)$$

Die Festlegung der Proportionalitätskonstante ist allerdings nur grob möglich, indem man die größtmöglichen Krümmungen abschätzt. Zwar läßt sich die Aufhebung der Entartung nicht richtig erfassen, aber die bei etwas größeren Unordnungen entstehenden glatten Niveaus (siehe Abbildung 5) kann man in den Fall ohne Unordnung extrapolieren und durch einen Cosinus nähern. Die Amplitude ist dabei durch den mittleren Niveauabstand Δ_1 gegeben und durch Gleichung (32) approximiert. Es entsteht

$$\varepsilon(\phi) = \Delta_1 \cos(2\pi\phi) = \frac{4 + 2W}{L} \cos(2\pi\phi). \quad (39)$$

Die Krümmung dieses idealisierten Zustandes wird als Abschätzung für die Proportionalitätskonstante im Fall ohne Unordnung verwendet und es folgt

$$c_{\max} \approx 4\pi^2 \frac{4 + 2W}{L} \exp\left\{-\frac{LW^2}{25}\right\}. \quad (40)$$

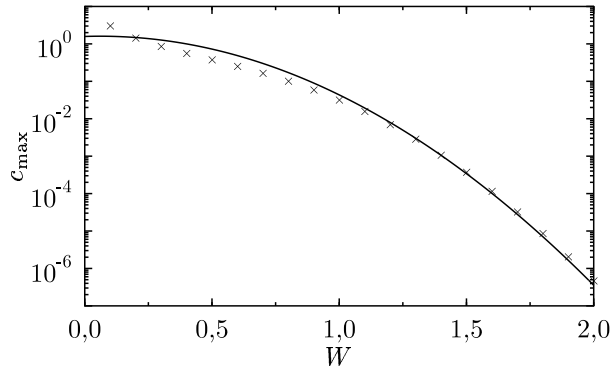


Abbildung 12: Vergleich der Abschätzung der typischen Krümmungen in der Mitte des Einteilchenspektrums als Funktion der Unordnungsstärke W (durchgezogene Linie) mit den typischen Krümmungen, die sich bei Mittelung über das Energieintervall $[-0,5 : 0,5]$ und 1000 Realisierungen der Unordnung im Ring mit 100 Plätzen ergeben (Kreuze).

In Abbildung 12 wurde diese Abschätzung mit dem tatsächlichen Verhalten verglichen. Die Übereinstimmung ist wie erwartet für nicht zu kleine Unordnung recht gut. Sowohl die Größenordnung als auch die Abhängigkeit von der Unordnungsstärke wird im wesentlichen richtig erfaßt.

3.8 Symmetrie im Spektrum

Im Mittel über viele Realisierungen der Unordnung ergibt sich, wie viele der bisherigen Abbildungen schon andeuteten, eine Symmetrie bezüglich des Vorzeichens der Energie im Spektrum.

Zunächst ist offensichtlich, daß eine Veränderung aller Vorzeichen im Hamiltonoperator, also in der Matrix \mathcal{H}_1 , zu einem Vorzeichenwechsel in der Energie führt. Im Mittel über viele Unordnungsrealisierungen ist der Vorzeichenwechsel in der Diagonale der Matrix \mathcal{H}_1 unerheblich, da dort die Zufallszahlen aus der bezüglich des Vorzeichens symmetrischen Verteilung $P(V_i)$ nach Abbildung 4 stehen. Demnach ist es völlig gleichgültig, ob man das Vorzeichen in der Diagonale wechselt oder nicht. Der Vorzeichenwechsel in der Energieskala ist also äquivalent mit dem Vorzeichenwechsel der Nichtdiagonaleinträge t nach Gleichung (21), wie er beispielsweise durch einen zusätzlich eingeschlossenen magnetischen Fluß $L/2$ in Einheiten des magnetischen Flußquants entstehen würde. Im Fall geradzahlgiger L ist dies jedoch aufgrund der Periodizität des Spektrums bei Änderung des eingeschlossenen magnetischen Feldes um Vielfache des magnetischen Flußquants äquivalent mit dem ursprünglich eingeschlossenen magnetischen Fluß. Das Spektrum verändert sich demnach überhaupt nicht durch den Vorzeichenwechsel und folglich ist das Spektrum im Mittel über viele Realisierungen der Unordnung symmetrisch bezüglich $E = 0$. Für ungeradzahlgige L folgt entsprechend eine Symmetrie zum Spektrum für den Fall eines um ein halbes Flußquant verschobenen eingeschlossenen magnetischen Flusses.

Auch die Verschiebung des magnetischen Flusses um ein halbes Flußquant verändert das Spektrum im Unordnungsmittel abgesehen von kleinen Effekten aufgrund der Diskretisierung nicht weiter. Die analytische Lösung ohne Unordnung aus Abschnitt 3.5 zeigt wie auch Abbildung 5, daß die Lage der Niveaus zueinander im Fall ohne Unordnung durch die Verschiebung nicht verändert wird. Die Kopplung der Zustände durch Unordnung unterscheidet sich deshalb

im Mittel über verschiedene Unordnungsrealisierungen nicht. Abgesehen vom Vorzeichen der Ableitung nach dem magnetischen Fluß ist die Verschiebung anhand eines Energieniveaus nicht mehr beobachtbar. Für ausreichend große Unordnungen W und Ringgrößen L , wie sie hier betrachtet werden, ist die Nummer α eines Zustandes im Spektrums anhand seiner Energie ε_α jedoch nicht mehr identifizierbar. Somit enthalten spektrale Auftragungen von Größen keine Informationen mehr über die Verschiebung des magnetischen Flusses um ein halbes Flußquant.



4 Zwei Teilchen ohne Wechselwirkung

4.1 Eigenzustände und Eigenenergien ohne Wechselwirkung

Im Fall ohne Wechselwirkung ergeben sich Mehrteilchenhamiltonoperatoren als Summe von Einteilchenhamiltonoperatoren. Für zwei nichtwechselwirkende Teilchen folgt

$$\tilde{\mathcal{H}}_2 = \mathcal{H}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \mathcal{H}_1, \quad (41)$$

wobei das Unordnungspotential in den Einteilchenhamiltonians \mathcal{H}_1 für beide Teilchen identisch gewählt wird. Die Lösung dieses Problems ist sofort aus der Lösung des Einteilchenproblems gegeben, weil es keine Kopplung zwischen den Teilchen gibt. Aus der Lösung der Schrödingergleichung

$$\mathcal{H}_1 |\psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |\psi_\alpha\rangle \quad (42)$$

läßt sich sofort die Zweiteilchenlösung konstruieren, denn es gilt einfach

$$\tilde{\mathcal{H}}_2 (|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi_\beta\rangle) = (\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta) (|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi_\beta\rangle) = E_{\alpha\beta} (|\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi_\beta\rangle). \quad (43)$$

Insbesondere gilt also, daß die Energie eines Zweiteilchenzustandes $E_{\alpha\beta}$ durch Summation von Einteilchenenergien ε_α und ε_β gebildet wird. Als Schreibweise werden für die Zweiteilchenzustände

$$|\psi_\alpha, \psi_\beta\rangle = |\psi_\alpha\rangle \otimes |\psi_\beta\rangle \quad (44a)$$

und die Wannier-Basis dieser Zustände

$$|l_1, l_2\rangle = |l_1\rangle \otimes |l_2\rangle \quad (44b)$$

eingeführt.

4.2 Symmetrisierung

Da die Teilchen ununterscheidbar sein sollen, wie beispielsweise zwei Elektronen, ist die Festlegung, daß das eine Teilchen im Zustand ψ_α und das andere Teilchen im Zustand ψ_β oder umgekehrt ist, nicht möglich. In der einfachen Konstruktion im vorherigen Abschnitt 4.1 wurde diesem Sachverhalt jedoch keine Beachtung geschenkt. Es hängt nun davon ab, was für eine Statistik der Teilchen man betrachten will, welche Art Symmetrie bei Vertauschung erfüllt werden muß. In der folgenden Arbeit werden symmetrische Ortswellenfunktionen betrachtet, wie sie beispielsweise für Bosonen auftreten. Elektronen, die hingegen die Statistik von Fermionen erfüllen, haben aufgrund des Pauli-Prinzips antisymmetrische Wellenfunktionen. Betrachtet man zwei Elektronen mit antiparallelem Spin, ist bereits der Spinanteil der Wellenfunktion antisymmetrisch, weshalb der Ortsanteil symmetrisch gewählt werden muß. Im Fall einer symmetrischen Spinwellenfunktion, also parallelen Spins, muß der Ortsanteil hingegen antisymmetrisch sein. Das bedeutet gemäß einer typischen Formulierung des Pauliprinzips, daß die beiden Elektronen bei parallelem Spin nicht im selben Zustand sein dürfen.

Zunächst kann man die Ortsbasis in symmetrische und antisymmetrische Anteile umschreiben. Antisymmetrische Ortswellenfunktionen kann man demnach aus

$$|l_1, l_2\rangle_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(|l_1, l_2\rangle - |l_2, l_1\rangle) = -|l_2, l_1\rangle_a \quad (l_1 \neq l_2) \quad (45)$$

bilden, wohingegen symmetrische Ortswellenfunktionen aus

$$|l_1, l_2\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(|l_1, l_2\rangle + |l_2, l_1\rangle) = |l_2, l_1\rangle_s \quad (l_1 \neq l_2) \quad (46a)$$

und

$$|l, l\rangle_s = |l, l\rangle \quad (46b)$$

entstehen.

Stellt man den Hamiltonoperator in der eben angegebenen Basis aus symmetrischen und antisymmetrischen Ortswellenfunktionen dar, stellt man fest, daß es keine Einträge für den Übergang zwischen antisymmetrischen und symmetrischen Anteilen gibt, denn man erhält für beliebige Kombinationen l_1, l_2, l_3, l_4 stets

$${}_a\langle l_1, l_2 | \tilde{\mathcal{H}}_2 | l_3, l_4 \rangle_s = \left({}_s\langle l_3, l_4 | \tilde{\mathcal{H}}_2 | l_1, l_2 \rangle_a \right)^* = 0. \quad (47)$$

Das bedeutet, daß der Raum der Lösungen in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Teil zerfällt. Auch eine Wechselwirkung zwischen den Teilchen, wie sie später hinzugefügt wird, ändert an dieser Tatsache nichts, weil sie nur die Diagonalelemente des diskretisierten Hamiltonoperators beeinflusst, hingegen aber keine neuen Übergänge zwischen Zuständen einführt.

Da die Wechselwirkung, die später in der Arbeit eingeführt wird, in den meisten betrachteten Fällen eine sogenannte Hubbard-Wechselwirkung ist, die nur für den Fall, daß sich die Teilchen auf demselben Platz befinden, ihre Wirkung zeigt, kann man die Diskussion auf den Anteil beschränken, der von dieser Wechselwirkungsart überhaupt beeinflusst wird, nämlich die symmetrischen Lösungen. Schon Shepelyansky hat in seiner ersten Arbeit zum TIP-Problem [27] diese Einschränkung damit gerechtfertigt, daß für antisymmetrische Wellenfunktionen bei modifizierter Wechselwirkung qualitativ die selben Phänomene auftreten sollten. Für den Einfluß auf die Lokalisierungslänge wurde dies numerisch später auch genauer untersucht und bestätigt [32].

Der Übergang in den Unterraum symmetrischer Funktionen führt automatisch zu symmetrischen Lösungen der Schrödingergleichung. Unter Verwendung der bereits in Abschnitt 4.1 eingeführten Schreibweise führt das zu

$$|\psi_\alpha, \psi_\beta\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_\alpha, \psi_\beta\rangle + |\psi_\beta, \psi_\alpha\rangle) = |\psi_\beta, \psi_\alpha\rangle_s \quad (l_1 \neq l_2) \quad (48a)$$

und

$$|\psi_\alpha, \psi_\alpha\rangle_s = |\psi_\alpha, \psi_\alpha\rangle, \quad (48b)$$

so daß die Schrödingergleichung für die symmetrisierten Zustände

$$\tilde{\mathcal{H}}_2(|\psi_\alpha, \psi_\beta\rangle_s) = (\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta)|\psi_\alpha, \psi_\beta\rangle_s = E_{\alpha\beta}|\psi_\alpha, \psi_\beta\rangle_s. \quad (49)$$

lautet. Insbesondere hat die Symmetrisierung keinen Einfluß auf die Eigenenergien $E_{\alpha\beta}$ der Zustände, die weiterhin einfach die Summen der Eigenenergien der zwei beteiligten Einteilchenzustände ε_α und ε_β sind.

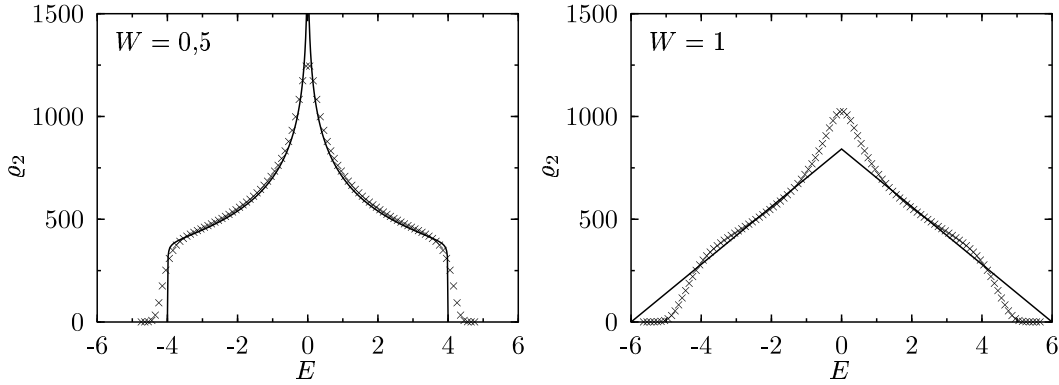


Abbildung 13: Zustandsdichte zweier nichtwechselwirkender Teilchen im Ring mit 100 Plätzen und unterschiedlicher Unordnungsstärke W im Mittel über 100 000 Realisierungen der Unordnung.

4.3 Zustandsdichte ohne Wechselwirkung

In Abbildung 13 ist die Zweiteilchenzustandsdichte $\varrho_2(E)$ für einige Beispiele angegeben. Dazu wurde das Einteilchenproblem wie in Abschnitt 3.6 gelöst und durch Summation daraus die Zweiteilchenenergien und ihre Zustandsdichte ermittelt.

Die eingezeichneten Approximationen erhält man aus der in Abschnitt 3.6 diskutierten Abschätzung für die Einteilchenzustandsdichte. Dazu muß man lediglich feststellen, daß für eine gegebene Zweiteilchenenergie die möglichen beteiligten Einteilchenzustände durch die Bedingung gegeben sind, daß die Summe der Einteilchenenergien $\varepsilon_1 + \varepsilon_2$ gleich der geforderten Zweiteilchenenergie E sein muß. Folglich ist die Zustandsdichte durch

$$\varrho_2(E) = \frac{L+1}{2L} \int d\epsilon \varrho_1(\epsilon) \varrho_1(E - \epsilon) \quad (50)$$

bestimmt, was eine Faltung der Einteilchenzustandsdichte ϱ_1 darstellt. Der Vorfaktor vor dem Integral entsteht aufgrund der Einschränkung auf symmetrische Zustände. Die Abschätzung der Einteilchenzustandsdichte nach Formel (31) ergibt dann die eingezeichnete Approximation, die im Fall kleiner Unordnung gut mit den Daten übereinstimmt. Die Abschätzung der Einteilchenzustandsdichte im Fall großer Unordnung durch einen Kasten führt hingegen zu der für $W = 1$ eingezeichneten Dreiecksform.

4.4 Krümmungen ohne Wechselwirkung

Da die Eigenenergien der Zweiteilchenzustände die Summe aus Einteilchenzuständen sind, gilt dies wegen der Linearität der Ableitung auch für die Krümmungen. In Abbildung 14 sind die typischen Krümmungen, die somit im Zweiteilchenspektrum auftreten, an Beispielen dargestellt. Dazu wurde das Einteilchenproblem wie in Abschnitt 3.7 gelöst und durch Summation daraus die Zweiteilchenenergien und -krümmungen ermittelt. Anschließend wurden die typischen Krümmungen genau wie in Abschnitt 3.7 durch den Maximalwert einer in ihren Parametern an den Verlauf der Verteilung $P(\ln |c|)$ angepaßten Gaußverteilung bestimmt.

Die qualitative Form der Kurve und insbesondere das Minimum in der Mitte des Spektrums wird bereits durch die einfachen Abschätzungen für Zustandsdichte und Krümmung der Einteilchenniveaus beschrieben. Allerdings muß man dabei beachten, daß die Einteilchenkrümmungen

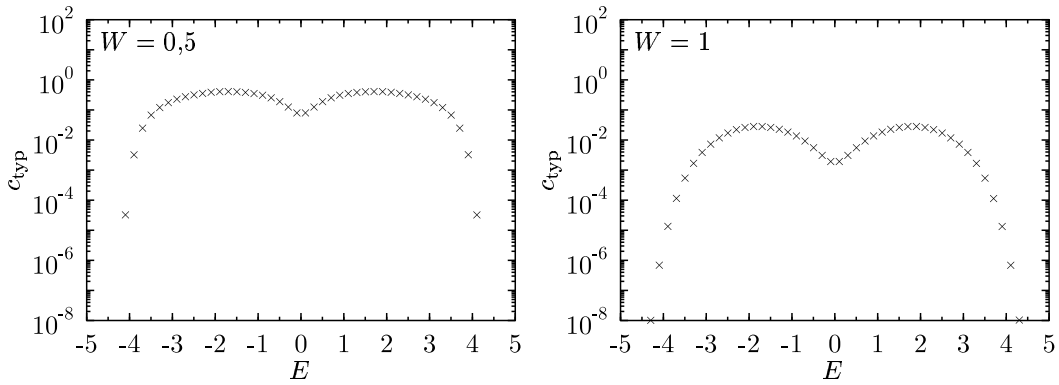


Abbildung 14: Typische Krümmungen zweier nichtwechselwirkender Teilchen im Ring mit 100 Plätzen und unterschiedlicher Unordnungsstärke W im Mittel über 100 000 Realisierungen der Unordnung.

bei der Summation zum Teil verschiedenes Vorzeichen haben. Da dieses Vorzeichen entsprechend der Diskussion aus Abschnitt 3.7 mit der Zustandsnummer alterniert, treten für die typischen Zweiteilchenkrümmungen $c_2(E)$ Mittelwerte aus dem Betrag der Summe und dem Betrag der Differenz mittlerer Einteilchenkrümmungen $c_1(\varepsilon)$ auf. Zusammen mit der entsprechenden Zustandsdichte, die den Einfluß der Einteilchenkrümmungen bei einer bestimmten Energie aufgrund der Anzahl der Zustände dort angibt, entsteht somit

$$c_2(E) \approx \frac{L+1}{4L\varrho_2(E)} \int d\varepsilon \varrho_1(\varepsilon) \varrho_1(E-\varepsilon) \left(|c_1(\varepsilon) + c_1(E-\varepsilon)| + |c_1(\varepsilon) - c_1(E-\varepsilon)| \right). \quad (51)$$

Der Vorfaktor vor dem Integral besteht aus mehreren Teilen. Zunächst entsteht ein Faktor $1/2$ aufgrund der notwendigen Mittelung der betragsmäßigen Summe und der betragsmäßigen Differenz der Einteilchenkrümmungen. Die Verwendung der Zustandssummen im Integral beachtet zudem wiederum nicht, daß nur symmetrische Zustände betrachtet werden, so daß sich die gleiche Korrektur wie in Gleichung (50) ergibt. Schließlich ist die Wichtung der verschiedenen Energiebereiche durch die Zustandssumme wieder zu korrigieren, weshalb im Vorfaktor noch durch die Zweiteilchenzustandsdichte geteilt werden muß.

In Abbildung 15 ist die Abschätzung (51) unter Verwendung der Einteilchenapproximation für $c_1(\varepsilon)$ nach Formel (36) mit dem in Abbildung 11 ermittelten Vorfaktor dargestellt. Wie zu sehen ist, wird das numerisch ermittelte Verhalten durch Formel (51) recht gut wiedergegeben.

Zudem kann man das Verhalten der Zweiteilchenkrümmungen im hier betrachteten Fall ohne Wechselwirkung qualitativ sehr gut verstehen. Während die Ränder des Zweiteilchenspektrums zwingend aus Einteilchenzuständen mit beiden Teilchen am selben Rand des Einteilchenspektrums gebildet werden, gibt es im Zentrum des Zweiteilchenspektrums mehr Möglichkeiten. Einerseits kann hierfür eines der Teilchen vom unteren Rand des Spektrums und das andere Teilchen vom oberen Rand stammen. In so einem Fall treten typischerweise sehr kleine Krümmungen auf, denn es werden Zustände von den Rändern des Einteilchenspektrums verwendet. Andererseits können natürlich auch beide Zustände aus der Mitte des Einteilchenspektrums stammen, wobei dann zwar sehr große Krümmungen auftreten, die sich aber in der Hälfte der Fälle aufgrund der verschiedenen Vorzeichen wegmitteln. Betrachtet man hingegen Positionen im Zweiteilchenspektrum zwischen diesen Punkten an den Bandenden und in der Mitte des Spektrums, also für Werte $|E| \approx 2$, so entstehen diese durch Kombinationen aus Einteilchen-

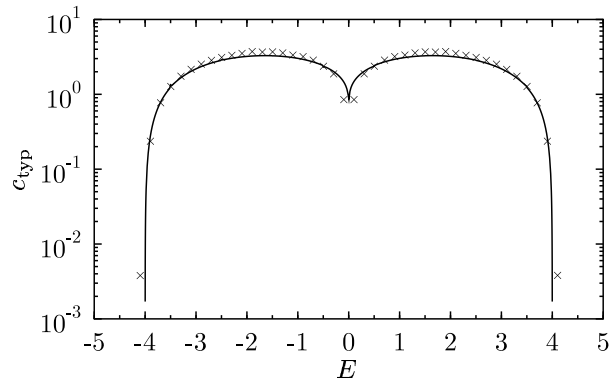


Abbildung 15: Vergleich der typischen Krümmungen (Kreuze) mit einer theoretischen Abschätzung (durchgezogene Linie) für den Fall geringer Unordnung $W = 0,1$ im Ring mit 100 Plätzen und im Mittel über 100 000 Realisierungen der Unordnung.

zuständen, bei denen das eine Teilchen nah an einem Rand des Einteilchenspektrums ist und das andere Teilchen im mittleren Bereich des Einteilchenspektrums. Dadurch treten für diese Positionen größere typische Krümmungen als in der Mitte des Zweiteilchenspektrums auf.



5 Zwei Teilchen mit Wechselwirkung

5.1 Einführung einer Wechselwirkung

Durch Einführung einer Wechselwirkung U zwischen den Teilchen wird der in Abschnitt 4.1 eingeführte Hamiltonoperator erweitert zu

$$\mathcal{H}_2 = \tilde{\mathcal{H}}_2 + U \sum_{l=0}^{L-1} |l, l\rangle \langle l, l| = \mathcal{H}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \mathcal{H}_1 + U \sum_{l=0}^{L-1} |l, l\rangle \langle l, l|. \quad (52)$$

Die Wechselwirkungsenergie U tritt also in den Fällen auf, bei denen sich beide Teilchen auf demselben Platz befinden. Dieser einfachste Fall einer Wechselwirkung ist vom Hubbard-Modell her bekannt und wird deshalb als Hubbard-Wechselwirkung bezeichnet. Gegenüber dem Hubbard-Modell kann hier aber zusätzlich Anderson-Lokalisierung durch das Unordnungspotential in den Einteilchenhamiltonoperatoren \mathcal{H}_1 auftreten. Untersuchungsgegenstand dieses TIP-Problems ist der Einfluß der Wechselwirkung auf das Einteilchenproblem.

5.2 Symmetrisierung des vollen Zweiteilchenproblems

Wie schon bei der Diskussion der Einschränkung der Lösung im Grenzfall ohne Wechselwirkung auf einen Unterraum aus symmetrischen Ortswellenfunktionen in Abschnitt 4.2 angegeben, separiert auch das Problem mit Wechselwirkung in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Anteil, wobei letzterer die Wechselwirkung überhaupt nicht enthält und hier nicht weiter untersucht werden soll.

Bei der Berechnung der Matrixelemente des Hamiltonoperators des Zweiteilchenproblems in der symmetrisierten Basis ist eine Fallunterscheidung für die Basisanteile nach den Gleichungen (46) notwendig, wobei für die Terme, die von Null verschieden sind, folgende Möglichkeiten entstehen:

- Diagonaleinträge

$${}_s \langle l_1, l_2 | \mathcal{H}_2 | l_1, l_2 \rangle_s = V_{l_1} + V_{l_2} + U \delta_{l_1, l_2} \quad (53a)$$

- $l_1 + 1 \neq l_2$ und $l_1 \neq l_2$

$${}_s \langle l_1, l_2 - 1 | \mathcal{H}_2 | l_1, l_2 \rangle_s = -t \quad (53b)$$

$${}_s \langle l_1 + 1, l_2 | \mathcal{H}_2 | l_1, l_2 \rangle_s = -t^* \quad (53c)$$

- $l_1 + 1 = l_2$ oder $l_1 = l_2$

$${}_s \langle l_1, l_2 - 1 | \mathcal{H}_2 | l_1, l_2 \rangle_s = -\sqrt{2}t \quad (53d)$$

$${}_s \langle l_1 + 1, l_2 | \mathcal{H}_2 | l_1, l_2 \rangle_s = -\sqrt{2}t^* \quad (53e)$$

- $l_1 \neq l_2 + 1$ und $l_1 \neq l_2$

$${}_s \langle l_1 - 1, l_2 | \mathcal{H}_2 | l_1, l_2 \rangle_s = -t \quad (53f)$$

$${}_s \langle l_1, l_2 + 1 | \mathcal{H}_2 | l_1, l_2 \rangle_s = -t^* \quad (53g)$$

5.2 Symmetrisierung des vollen Zweiteilchenproblems

Ringgröße	Matrixgröße	„everest“	SP RZ Uni-Augsburg	SP2 LRZ-München
50	1275	1,2 min.	1,4 min.	3,6 min.
75	2850	6,9 min.	7,0 min.	18,3 min.
100	5050	26,0 min.	21,1 min.	54,9 min.
150	11325	125,0 min.	103,9 min.	269,3 min.
200	20100	373,3 min.	313,2 min.	864,0 min.

Tabelle 1: Beispiele für Rechenzeiten bei der Berechnung aller Eigenwerte der im TIP-Problem auftretenden „sparse“-Matrizen mit dem Lanczos-Algorithmus [63]. Die Größe der T-Matrizen, die man diesem Algorithmus vorgeben muß und die die Rechenzeiten sowie die Stabilität bei der Berechnung aller Eigenwerte erheblich beeinflusst, wurde 5 mal so groß wie die Matrixgröße gewählt. Die Maschine „everest“ ist eine 4-Prozessor IBM Workstation des Institutes für Physik der Uni-Augsburg. Die Rechenzeiten ergeben sich für die Berechnung auf einem der 332 MHz 604e-X5 Prozessoren. Für die Berechnung der Daten, die in dieser Diplomarbeit präsentiert werden, stand dieser Rechner jedoch noch nicht zur Verfügung. Die Maschine SP RZ Uni-Augsburg ist ein Parallelrechner IBM SP mit 14 Knoten und die angegebenen Rechenzeiten erhält man bei der Benutzung von einem der 160 MHz P2SC Prozessoren. Die Maschine SP2 LRZ-München ist ein Parallelrechner IBM SP2 mit 77 Knoten und die angegebenen Rechenzeiten ergeben sich bei der Verwendung von einem der 67 MHz Power2 Prozessoren. Für die in dieser Diplomarbeit präsentierten Daten wurden zu etwa gleichen Teilen die Rechner SP RZ Uni-Augsburg und SP2 LRZ-München verwendet, wobei die Parallelarchitektur für die gleichzeitige Rechnung mit verschiedenen Unordnungsrealisierungen ausgenutzt wurde. Der Gesamtaufwand lag bei mehreren tausend CPU-Stunden.

- $l_1 = l_2 + 1$ oder $l_1 = l_2$

$${}_s\langle l_1 - 1, l_2 | \mathcal{H}_2 | l_1, l_2 \rangle_s = -\sqrt{2}t \quad (53h)$$

$${}_s\langle l_1, l_2 + 1 | \mathcal{H}_2 | l_1, l_2 \rangle_s = -\sqrt{2}t^* \quad (53i)$$

Die Parameter l_1 und l_2 durchlaufen die Ringpositionen $0, \dots, L-1$. Die abkürzende Schreibweise für die Ringperiodizität muß dazu neben der bereits eingeführten Identität $|L\rangle \equiv |0\rangle$ um $|-1\rangle \equiv |L-1\rangle$ ergänzt werden.

Das Hüpfmatrizelement t , welches in den Nichtdiagonalelementen auftritt, ist das gleiche wie beim Einteilchenproblem in Gleichung (21) und lautet

$$t = \exp \left\{ \frac{2\pi i}{L} \phi \right\}. \quad (54)$$

Für die numerische Lösung dieses Problems in der symmetrischen Basis ist demnach die Diagonalisierung einer Matrix mit $L(L+1)/2$ Zeilen und Spalten notwendig. Für die Ringgröße L sollen verschiedene Werte in der Größenordnung von 100 Plätzen verwendet werden, denn bisherige numerische Arbeiten zum TIP-Problem, die bereits im Abschnitt 2.3 der Grundlagen angesprochen wurden, zeigen, daß solche Ringgrößen notwendig sind, um den Einfluß der Wechselwirkung auf die Lokalisierung der Teilchen deutlich beobachten zu können. Im Fall solcher besonders großer Matrizen mit mehreren tausend Zeilen und Spalten müssen aus Speicherplatz- und Rechenzeitgründen spezielle Algorithmen für die Berechnung der Eigenwerte verwendet werden, die ausnutzen, daß die Matrizen sehr viele Nullen enthalten, also sogenannte „sparse“-Matrizen sind. Eine etablierte Lösung ist der Lanczos-Algorithmus, der in der Implementation von Cullum und Willoughby [63] verwendet wurde. Damit lassen sich bereits auf einer Workstation alle Eigenwerte für die gewünschten Ringgrößen berechnen. Der Speicherbedarf liegt im

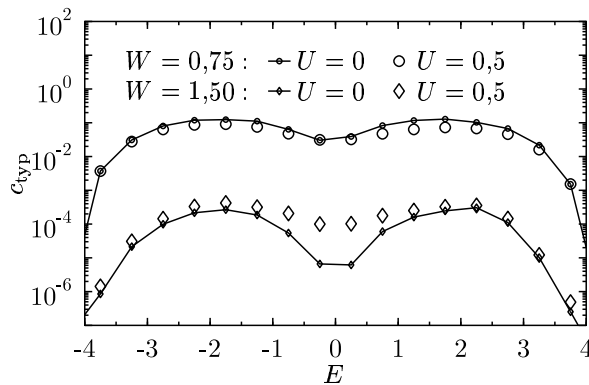


Abbildung 16: Typische Krümmungen mit Wechselwirkung $U = 0,5$ gegenüber dem Fall ohne Wechselwirkung $U = 0$ bei unterschiedlicher Unordnungsstärke W in einem Ring mit 100 Plätzen und Mittelung über 20 Realisierungen der Unordnung.

Bereich von einigen MegaByte und stellt keine wesentliche Einschränkung dar, denn der Zeitbedarf steigt erheblich schneller über die verfügbaren Grenzen. Die typischen Rechenzeiten für eine einzelne Berechnung der Eigenwerte sind in Tabelle 1 aufgelistet.

5.3 Krümmungen

Obwohl es auch möglich ist, einzelne Eigenvektoren mittels Lanczos-Algorithmus zu bestimmen, wurde auf diese Möglichkeit aufgrund des großen numerischen Aufwandes verzichtet. Die Bestimmung von Krümmungen durch Störungsrechnung analog zum Einteilchenproblem ist deshalb nicht möglich, da hierfür alle Eigenvektoren benötigt werden. Statt dessen kann man jedoch numerische Verfahren zur Bildung der zweiten Ableitung verwenden. Eine solche Bestimmung ist zu Testzwecken auch im wechselwirkungsfreien Fall ausgeführt wurden, obwohl dann die störungstheoretische Bestimmung der Krümmungen problemlos möglich ist, jedoch lassen sich dadurch verschiedene numerische Verfahren vergleichen und deren Parameter optimieren. Gleichzeitig entsteht dabei eine Fehlerabschätzung für das numerische Verfahren.

Die im Problem vorhandene Symmetrie zwischen ϕ und $-\phi$, deren Ursache im Übergang zu den komplex konjugierten Hüpfmatrixelementen t bei dieser Transformation liegt, welche die Eigenwerte einer Matrix nicht beeinflusst, kann für die numerische Berechnung der Ableitung nach dem magnetischen Fluß ϕ ausgenutzt werden. Man berechnet dazu die Eigenwerte des Hamiltonoperators für $\phi = 0$ und einige endliche positive Werte. Durch Approximation mit einem aus eben genannten Symmetriegründen geraden Polynom kann man auf diese Weise die Krümmung näherungsweise bestimmen. Problematisch dabei ist, daß die Krümmungen typischerweise über viele Größenordnungen variieren und zudem die Eigenwerte nur mit endlicher Genauigkeit berechnet werden können. Die vollständige Beschreibung eines Verfahrens, welches in dieser Arbeit vorgeschlagen und verwendet wurde, um dieses Problem zu lösen, ist in Anhang C zusammengefaßt. Für die erreichte absolute Rechengenauigkeit σ wurde 10^{-12} als sinnvoller Wert ermittelt und die Schrittweite h für die Änderung des magnetischen Flusses ϕ ist im untersuchten Unordnungsbereich mit 10^{-3} günstig gewählt. Wählt man für h deutlich größere Werte, werden die relativen Fehler bei der Berechnung der Krümmungen schnell viel größer, weil der Verlauf der Energieniveaus als Funktion des magnetischen Flusses nur noch

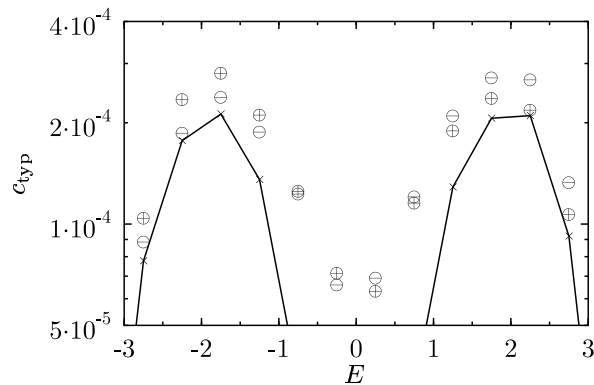


Abbildung 17: Typische Krümmungen mit Wechselwirkung bei unterschiedlichem Vorzeichen der Wechselwirkung gegenüber dem Fall ohne Wechselwirkung in einem Ring mit 100 Plätzen und Mittelung über 100 Realisierungen der Unordnung. Die durch Linien verbundenen kleinen Kreuze entstehen im Fall ohne Wechselwirkung, die Kreise mit dem Plus-Symbol für die positive Wechselwirkung $U = 0,5$ und die Kreise mit dem Minus-Symbol für die negative Wechselwirkung $U = -0,5$. Der Vorzeichenwechsel in der Wechselwirkung ist im Unordnungsmittel äquivalent zum Vorzeichenwechsel der Energieskala. Diese Symmetrie ist in der Abbildung nicht perfekt gegeben und auch der Fall $U = 0$ ist zu sich selbst nicht ganz symmetrisch, doch bei Erhöhung der Anzahl der verwendeten Unordnungsrealisierungen werden diese Fehler immer geringer.

ungenügend wiedergegeben wird. Kleinere Werte für h sind jedoch auch nicht sinnvoll, denn die Rechengenauigkeiten reichen dann nicht mehr aus, um auch die auftretenden sehr kleinen Krümmungen genau bestimmen zu können.

Die Berechnung der typischen Krümmungen wird auch im Fall mit Wechselwirkung wie in Abschnitt 3.7 durch den Maximalwert einer in ihren Parametern an den Verlauf der Verteilung $P(\ln |c|)$ angepaßten Gaußverteilung bestimmt. In Abbildung 16 ist der Einfluß der Wechselwirkung auf die typischen Krümmungen der Zweiteilchenniveaus dargestellt. Der Vergleich zwischen den Kurven ohne Wechselwirkung und mit endlicher Wechselwirkung zeigt direkt, daß sich die Krümmungen im Fall geringer Unordnung durch die Wechselwirkung verringern, während sie statt dessen für größere Unordnung erhöht werden. Das ist bereits eine direkte Bestätigung des von Akkermans und Pichard in [40] analytisch abgeschätzten Verhaltens. Dabei tritt offenbar auch eine wesentliche Abhängigkeit von der Energie im Spektrum auf. Besonders ist die Aufhebung des deutlichen Minimums in der Mitte des Bandes bei starker Unordnung durch die Wechselwirkung erkennbar.

5.4 Vorzeichen der Wechselwirkung

Auch wenn es in Abbildung 16 zunächst nach einer Symmetrie bezüglich der Energie im Spektrum aussieht, gibt es kleine aber signifikante Unterschiede. Während das Spektrum ohne symmetrisch ist, führt die Wechselwirkung zu einer Aufhebung dieser Symmetrie. Die nichtsymmetrischen Anteile können dabei nicht nur als Unterschied zwischen positiver und negativer Energie im Spektrum interpretiert werden, sondern stehen in der selben Weise auch mit dem Vorzeichen der Wechselwirkung in Verbindung. Wenn man von der speziellen Wahl der Unordnung absieht, also das Mittel über viele Realisierungen der Unordnung betrachtet, bleiben die Eigenschaften unverändert, wenn man das Vorzeichen der Energie im Spektrum und das Vorzeichen der Wechselwirkung gleichzeitig vertauscht. Es ist deshalb nicht notwendig, verschiedene Vorzeichen der

Wechselwirkung getrennt zu betrachten, weil dabei keine neuen Informationen entstehen.

Insbesondere stellt diese Eigenschaft auch eine Möglichkeit dar, die Qualität des Unordnungsmittels zu testen. Dazu wurde in Abbildung 17 der Fall positiver und negativer Wechselwirkung gegenübergestellt. Die Symmetrie bezüglich gleichzeitigem Vorzeichenwechsel in der Wechselwirkung und in der Energie des Spektrums ist deutlich zu sehen.

Aufgrund der Symmetrie bei gleichzeitigem Vorzeichenwechsel der Energie und der Wechselwirkung werden im folgenden die Fälle gleichen Vorzeichens von Wechselwirkung und Energie im Spektrum als anziehende Wechselwirkung bezeichnet, bei umgekehrtem Vorzeichen statt dessen als abstoßende Wechselwirkung.

5.5 Ein-Parameter-Abhängigkeit der Krümmungen mit fester Wechselwirkung

Bevor der Einfluß der Wechselwirkung auf die Krümmungen diskutiert werden soll, sind ein paar Bemerkungen zu den numerischen Schwierigkeiten bei den Berechnungen angebracht. Für die kleinen Symbole in Abbildung 18 wurden Fehlerbalken angegeben, sofern sie die Symbolgröße überschreiten. Es handelt sich dabei um Abschätzungen der numerischen Ungenauigkeiten. Zunächst wurde generell – auch im Fall ohne Wechselwirkung – das volle Problem mit zwei Teilchen im Ring gelöst, um Artefakte aus der Differenzbildung von Krümmungen, die auf unterschiedliche Art und Weise bestimmt wurden, zu verhindern. Berechnet man die typischen Krümmungen im Fall ohne Wechselwirkung außerdem auch aus den Einteilchenkrümmungen, die durch die Störungstheorie im magnetischen Fluß numerisch erheblich präziser bestimmbar sind, erhält man eine Vorstellung von den Abweichungen, die die Numerik generell enthält. Nimmt man an, daß die Krümmungen auch mit Wechselwirkung ähnliche Fehler aufweisen, ist die doppelte Differenz der auf unterschiedliche Weise ermittelten Krümmungen im wechselwirkungsfreien Fall eine Abschätzung für den numerischen Fehler der Differenz der Krümmungen mit Wechselwirkung und ohne.

Ein weiterer Effekt, der quantitativen Einfluß auf die numerische Genauigkeit hat, ist das Unordnungsmittel. Es zeigt sich, daß es einer Mittelung über extrem viele Realisierungen der Unordnung bedarf, bevor die Abhängigkeit vom Startpunkt des Zufallszahlengenerators verschwindet. Eine solche Herangehensweise ist deutlich zu aufwendig. Deshalb wurden die Daten als Mittel von deutlich weniger Realisierungen der Unordnung gebildet und statt dessen stets die gleichen Zufallszahlen als Grundlage gewählt. Das gilt nicht nur für die Daten bei gleicher Unordnungsstärke, sondern auch darüber hinaus, indem hierfür nur die lineare Abbildungsfunktion von den Zufallszahlen aus $[0 : 1]$ in das Intervall $[-W : W]$ geändert wurde, die Zufallszahlen selbst jedoch beibehalten wurden. Bei dieser Vorgehensweise ist es natürlich entscheidend, genau zu testen, welche Details eventuell auf die Weise künstlich entstehen. Beispielsweise wurde die Unterscheidung nach dem Vorzeichen in der Energieskala, wie sie auch schon im vorangehenden Abschnitt 5.4 diskutiert wurde, durch weitere Rechnungen mit völlig anderen Zufallszahlen als generelle Eigenschaft identifiziert. An späterer geeigneter Stelle werden solche Daten noch präsentiert, um einen Eindruck zu vermitteln, in welcher Größenordnung die Auswirkungen dieses Tricks mit den gleichen Zufallszahlen liegen.

Den Einfluß der Wechselwirkung auf die Krümmungen von Energieniveaus wird anhand der dimensionslosen Krümmung $g_{\text{typ}}(U)$ untersucht, die durch

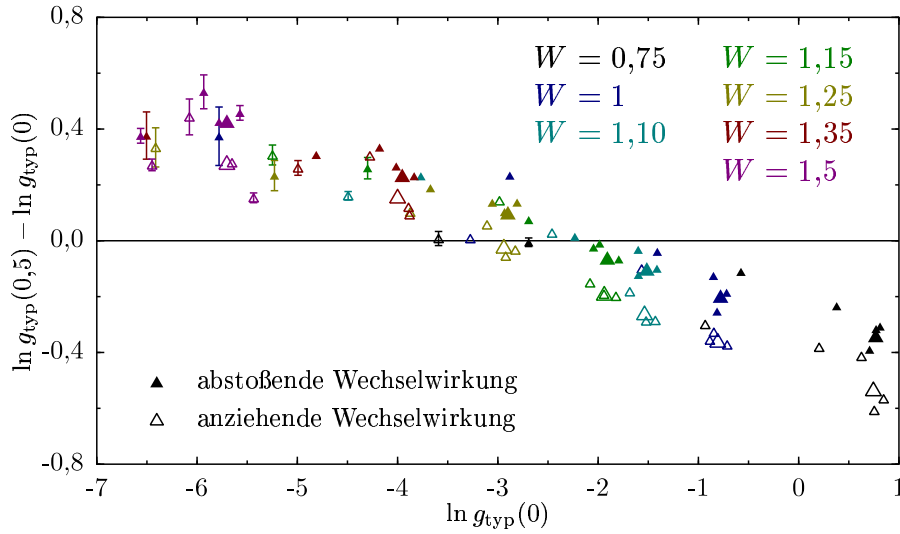


Abbildung 18: Einfluß der Wechselwirkung $U = 0,5$ gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall $U = 0$ auf die typischen dimensionslosen Krümmungen $g_{\text{typ}}(U) = c_{\text{typ}}(U)/\Delta_1$ im Ring mit 100 Plätzen und Mittelung über jeweils 20 Realisierungen der Unordnung bei unterschiedlicher Unordnungsstärke W . Dazu ist die Differenz der dimensionslosen Krümmungen aus beiden Fällen gegenüber dem Wert ohne Wechselwirkung dargestellt. Die vollen Dreiecke entstehen für negative Energien im Spektrum, die offenen Symbole hingegen für positive Energien. Die großen Symbole sind Mittelungen über die Intervalle $[-2,5 : -1]$ und $[1 : 2,5]$, die kleinen Symbole mit schlechterer Statistik über kleinere Energieintervalle der Breite 0,5 in den Energiebereichen $[-4 : -1]$ und $[1 : 4]$. Fehlerbalken sind in den Fällen eingezeichnet, in denen sie die Symbolgröße überschreiten und sind – wie im Text erläutert – Abschätzungen der numerischen Genauigkeit und nicht das statistischen Fehlers, der später diskutiert wird.

$$g_{\text{typ}}(U) = \frac{c_{\text{typ}}(U)}{\Delta_1} \quad (55)$$

definiert wird. Die eingehende typische Krümmung c_{typ} ist dabei durch die schon im Einteilchenproblem besprochene Mittelungsprozedur der Krümmungen der Energieniveaus gegeben, hier jedoch nun angewandt auf die Krümmungen der Zweiteilchenzustände. Neben der Energie im Spektrum E tritt als Parameter, in Abhängigkeit dessen diese dimensionslosen Krümmungen betrachtet werden, deshalb wie angedeutet die Stärke der Wechselwirkung U auf, für welche die Krümmungen berechnet wurden. Der mittlere Niveauabstand Δ_1 der Einteilchenniveaus ist für die Normierung der Energieskala naheliegend, weil sich dann zumindest in den Fällen ohne Wechselwirkung wegen der dabei auftretenden einfachen Summation von Einteilchenkrümmungen eine Leitfähigkeit gemäß der Thouless-Relation ergibt. Wenn man die dimensionslose Zweiteilchenkrümmung $g_{\text{typ}}(0)$ bestimmt, wird natürlich implizit eine Mittelung über viele Zustände aus ganz verschiedenen Bereichen des Einteilchenspektrums ausgeführt und demnach eine entsprechend mittlere Leitfähigkeit gebildet. Insbesondere wird deshalb generell die Energieabhängigkeit des mittleren Einteilchenniveauabstandes Δ_1 vernachlässigt. Wie in Abschnitt 3.6 diskutiert wurde, wird diese Abhängigkeit für zunehmende Unordnung aber klein und man kann die Abschätzung nach Gleichung (32) verwenden.

In Abbildung 18 ist die Differenz der Logarithmen der dimensionslosen Krümmungen im wechselwirkenden Fall mit $U = 0,5$ und im wechselwirkungsfreien Fall $U = 0$ gegenüber dem Wert ohne Wechselwirkung aufgetragen. Die vollen Symbole stehen dabei für negative Energie im Spektrum, während leere Symbole positive Energien bedeuten. Die Mitte des Zweiteilchen-

bandes, gegeben durch den Energiebereich $[-1 : 1]$, wurde dabei nicht mit berücksichtigt, da für starke Unordnung hier die Verteilung der Krümmungen $P(\ln |c|)$ besonders im Fall ohne Wechselwirkung kein deutliches Maximum mehr zeigt und die Wechselwirkung hier einen überproportional erhöhenden Einfluß auf die Krümmungen ausübt (siehe Abbildung 16). Eine Fehlerabschätzung, die in diesem Abschnitt später noch detailliert beschrieben wird, demonstriert auch eine erhebliche Unsicherheit in diesen Fällen, so daß trotz der deutlich höheren Differenz der dimensionslosen Krümmungen selbst das Vorzeichen dieser Differenz als nicht in jedem Fall mit Sicherheit festliegend angesehen werden muß, auch wenn bei den Rechnungen nie Fälle aufgetreten sind, die die Systematik der Erhöhung der Krümmungen durch Wechselwirkung für starke Unordnung auch in der Bandmitte, tatsächlich verletzt haben.

Die großen Symbole in Abbildung 18 sind durch Mittelung über die Energieintervalle $[-2,5 : -1]$ und $[1 : 2,5]$ entstanden, denn für diesen Bereich ist die Energieabhängigkeit der typischen Krümmungen vergleichsweise gering (siehe Abbildung 16). Eine Fehlerabschätzung der numerischen Unsicherheit ist für diese Symbole nicht eingezeichnet, da sie deutlich unter der Symbolgröße liegt.

Die kleinen Symbole in Abbildung 18 entstanden aus denselben Daten, nur wurde die Mittelung hierbei für Energieintervalle der Breite 0,5 ausgeführt. Dadurch ergibt sich zunächst eine schlechtere Statistik. Dafür wurden jedoch auch Energieintervalle näher an den Rändern des Zweiteilchenbandes ausgewertet, obwohl dort eine deutliche Abhängigkeit der typischen Krümmungen von der Energie auftritt. Zudem sind die typischen Krümmungen an den Rändern des Spektrums deutlich kleiner, so daß sich auch bei vergleichsweise geringer Unordnung bereits Punkte ergeben, bei denen die Wechselwirkung zu einer Erhöhung der Krümmungen führt. Durch die Auftragung gegenüber der dimensionslosen Krümmung selbst liegen diese Punkte damit im Rahmen der erzielbaren Genauigkeit bei denen für stärkere Unordnung innerhalb der Maxima der typischen Krümmungen entstehenden Daten. Demnach scheint als Maß für den Einfluß der Wechselwirkung nicht die Unordnung entscheidend, sondern die von Unordnung und Energie abhängende dimensionslose Krümmung ohne Wechselwirkung $g_{\text{typ}}(0)$.

Die in Abbildung 18 gefundene Abhängigkeit des Einflusses der Wechselwirkung von der dimensionslosen Krümmung im Fall ohne Wechselwirkung selbst, gilt insbesondere auch bei Veränderung der Ringgröße. Dazu ist in Abbildung 19 für Ringgrößen L zwischen 75 und 180 wiederum die Änderung der dimensionslosen Krümmung durch Wechselwirkung gegenüber ihrem Wert ohne Wechselwirkung aufgetragen. Die Stärke der Unordnung mußte dabei natürlich abhängig von der Ringgröße verändert werden, um mit der dimensionslosen Krümmung immer in die gleiche Größenordnung zu gelangen und somit stets den Wechsel im Einfluß der Wechselwirkung – bei kleiner Unordnung Abnahme der Krümmungen, bei großer Unordnung hingegen Zunahme – beobachten zu können.

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wurden in Abbildung 19 nur Mittelungen im Bereich der Maxima der typischen Krümmungen im Spektrum ausgeführt, da dort ein vergleichsweise großer Energiebereich verwendet werden kann ohne wesentlich verschiedene typische Krümmungen zu vermischen. Die Punkte streuen dennoch ein wenig mehr als bei der Darstellung in Abbildung 18, jedoch ist keine Systematik als Abhängigkeit von der Ringgröße erkennbar. Man sollte bei der Interpretation der Daten vielmehr beachten, daß die Mittelung über die Realisierungen der Unordnung weniger günstig als im Fall fester Ringgröße ausfällt, weil für jede Ringgröße eine andere Anzahl von Zufallszahlen notwendig ist. Dadurch läßt sich die oben beschriebene Me-

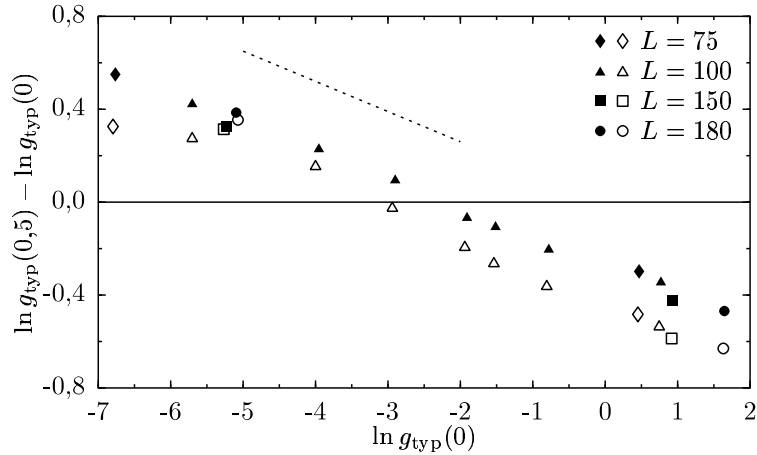


Abbildung 19: Einfluß der Wechselwirkung $U = 0,5$ gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall $U = 0$ auf die typischen dimensionslosen Krümmungen $g_{\text{typ}}(U)$ im Mittel über 20 Realisierungen der Unordnung bei Veränderung der Ringgröße L . Dazu ist die Differenz der dimensionslosen Krümmungen aus beiden Fällen gegenüber ihrem Wert ohne Wechselwirkung dargestellt. Die vollen Dreiecke entstehen durch Mittelung über das Energieintervall $[-2,5 : -1]$ im Spektrum, die offenen Symbole hingegen für $[1 : 2,5]$. Die gepunktete Linie hat etwa die gleiche Steigung 0,13 wie die aufgetragene Veränderung der Krümmung durch Wechselwirkung.

thode der Verwendung stets derselben Zufallszahlen nur für jede Ringgröße separat anwenden. Andererseits ist das natürlich genau ein Test, inwiefern die qualitativen Aussagen genereller Natur sind.

Die numerische Berechnung von Krümmungen von Zweiteilchenenergieniveaus in einem ungeordneten Potential hat ergeben, daß der Einfluß fester Wechselwirkung abhängig von der Größe der dimensionslosen Krümmung unterschiedlich ist. Die Verringerung im Fall großer Krümmungen und Vergrößerung im Fall kleiner Krümmungen durch Wechselwirkung, wie es in den beiden Abbildungen 18 und 19 dargestellt ist, wird in diesen logarithmischen Auftragungen gut durch eine Gerade angenähert – insbesondere, wenn man positive und negative Energien im Spektrum unterscheidet. Der Anstieg m der Geraden liegt dabei, wie es die gestrichelte Linie in Abbildung 19 zeigt, bei etwa 0,13. Das bedeutet, daß die Änderung der Krümmungen durch eine zunächst feste Wechselwirkung der Stärke $U = 0,5$ durch ein Potenzgesetz angenähert werden kann:

$$\frac{g_{\text{typ}}(0,5)}{g_{\text{typ}}(0)} \approx \left(\frac{g_{\text{typ}}(0)}{g_{\text{crit}}} \right)^m. \quad (56)$$

Die Konstante g_{crit} bezeichnet dabei den Wert für die dimensionslose Krümmung ohne Wechselwirkung, unterhalb derer Wechselwirkung zu einer Erhöhung der Krümmung, oberhalb hingegen zu einer Verringerung derselben führt. Bevor dieser in dem Sinne kritische Wert für die dimensionslose Krümmung weiter diskutiert wird, soll zunächst der Einfluß der Wechselwirkungstärke beginnend mit einem weiteren Grenzfall untersucht werden.

5.6 Grenzfall betragsmäßig unendlicher Wechselwirkung

Für unendlich starke Wechselwirkung separieren die Zustände, bei denen beide Teilchen auf dem gleichen Platz lokalisiert sind, energetisch vollständig von den restlichen Zuständen. Unabhängig davon, ob die unendlich große Wechselwirkung anziehend oder abstoßend ist, ergibt

sich eine Gruppe von Eigenzuständen, bei denen sich beide Teilchen auf dem gleichen Platz befinden. Das sieht man ein, wenn man vom Hamiltonoperator in der oben gewählten Basis $\{|l_1, l_2\rangle\}$ ausgeht und den Eintrag in der Diagonale mit den Einträgen außerhalb der Diagonale vergleicht. Sind beide Teilchen auf demselben Platz, wird der Diagonaleintrag wegen der Wechselwirkung betragsmäßig unendlich, während die Nichtdiagonaleinträge ihren endlichen Wert behalten. Außerdem sind diese Zustände nicht direkt miteinander gekoppelt, weil keine Matrixelemente auftreten, bei denen beide Teilchen gleichzeitig ihren Platz verändern. Deshalb sind diese Zustände bereits Eigenzustände mit betragsmäßig unendlichen Eigenwerten, da die Kopplung an andere Zustände aufgrund der betragsmäßig unendlichen Energiedifferenz verschwindet.

Die anderen Zustände kann man bestimmen, indem man den Hamiltonoperator für zwei Teilchen ohne die Fälle, bei denen die Teilchen auf demselben Platz sind, betrachtet. Die Wechselwirkung tritt dann in der Matrix nicht mehr auf. Die Berechnung der übrigen Eigenzustände und -energien ist somit problemlos möglich.

Da im Fall betragsmäßig unendlicher Wechselwirkung die Zustände, bei denen die beiden Teilchen auf dem selben Platz sind, von den restlichen Zuständen separieren, kann man für dieses eindimensionale Modell die Eigenzustände wiederum aus den Einteilchenzuständen berechnen. Diese Möglichkeit wurde in [64] für feste Randbedingungen diskutiert und ist auch auf periodische Randbedingungen erweiterbar [43]. Danach lassen sich die Zweiteilcheneigenzustände schreiben als

$$\langle l_1, l_2 | \psi_\alpha, \psi_\beta \rangle_\infty = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle l_1 | \psi_\alpha \rangle_{1/2} \langle l_2 | \psi_\beta \rangle_{1/2} - \langle l_2 | \psi_\alpha \rangle_{1/2} \langle l_1 | \psi_\beta \rangle_{1/2} \right) \text{sgn}(l_1 - l_2), \quad (l_1 \neq l_2). \quad (57)$$

Dabei sind die Zustände $|\alpha\rangle_{1/2}$ die Einteilchenlösungen des Hamiltonoperators \mathcal{H}_1 beim magnetischen Fluß $\phi' = \phi + 1/2$ und die Vorzeichenfunktion $\text{sgn}(x)$ ist durch

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{falls } x \geq 0 \\ -1 & \text{sonst} \end{cases} \quad (58)$$

definiert. Die Idee, die dem Ansatz zugrunde liegt, ist die Verwendung antisymmetrischer Ortsanteile für die Wellenfunktion. Dadurch können die beiden Teilchen nie auf demselben Platz sein. Da aber symmetrische Funktionen benötigt werden, muß mittels $\text{sgn}(l_1 - l_2)$ ein Vorzeichenwechsel eingebaut werden. Das führt jedoch zu einer Veränderung der Randbedingung ebenfalls um ein Vorzeichen. Letzteres wiederum läßt sich jedoch durch die Verwendung von Einteilchenlösungen mit einem um ein halbes Flußquant verschobenen magnetischen Fluß leicht wieder korrigieren.

Nun läßt sich das Problem im Fall betragsmäßig unendlicher Wechselwirkung wie auch im Fall ohne Wechselwirkung zwischen den Teilchen auf die Einteilchenlösung reduzieren. Für die Energieeigenwerte der Zweiteilchenzustände mit betragsmäßig unendlicher Wechselwirkung, die durch Gleichung (57) gegeben sind, gilt ganz analog zum Fall ohne Wechselwirkung, daß die Symmetrisierung – in diesem Fall zunächst durch antisymmetrische Kombinationen mit anschließender Korrektur durch ein explizites Vorzeichen $\text{sgn}(l_1 - l_2)$ – den Eigenwert nicht beeinflusst und dieser somit weiterhin einfach die Summe der beiden beteiligten Einteilchenenergieeigenwerte ist. Anders als im Fall ohne Wechselwirkung dürfen die beiden Teilchen aber nicht im gleichen Zustand sein, denn eine antisymmetrische Kombination aus gleichen Einteilchenzuständen verschwindet stets. Die somit fehlenden L Zustände sind die Zustände $|l, l\rangle_s$ mit $l = 0, \dots, L - 1$,

die zu betragsmäßig unendlicher Energie gehören, weil diese die Wechselwirkung in voller Stärke spüren.

Aufgrund der Summation von Einteilcheneigenenergien – zwar bei einem anderen magnetischen Fluß, was aber aus Symmetriegründen entsprechend Abschnitt 3.8 im Mittel über viele Realisierungen der Unordnung keinen Unterschied macht – ändert sich für die Zustandsdichte wie auch für die Krümmungen bei unendlicher Wechselwirkung zwischen den Teilchen nichts, wenn man von den L Zuständen, die zu unendlicher Energie hin verschoben werden, absieht. Das sind aber im Vergleich zu den verbleibenden $L(L - 1)/2$ Zuständen sehr wenige und sie sind im Fall ohne Wechselwirkung auch gleichmäßig im Energiespektrum verteilt. Einzig sind bei diesen Zuständen die Vorzeichen der Krümmungen notwendigerweise gleich, weshalb sich für die typischen Krümmungen für kleine L im Mittel über sehr viele Realisierungen signifikant etwas geringere Werte ergeben als im Grenzfall ohne Wechselwirkung. Dieser Effekt ist für Ringgrößen, wie sie hier diskutiert werden, extrem klein und nimmt mit zunehmender Ringgröße weiter ab. Die Mittelung über relativ wenige Realisierungen der Unordnung, auf die sich diese Arbeit für große Ringgrößen L aus Gründen des numerischen Aufwandes beschränken muß, führt zudem zu deutlich höheren statistischen Fehlern und der Einfluß des Ausschließens der Zustände mit der unendlichen Wechselwirkungsenergie wird überhaupt nicht sichtbar. Für die Ringgröße $L = 25$ konnte im Mittel über 100 000 Realisierungen der Unordnung jedoch tatsächlich diese kleine Verringerung der typischen Krümmungen bei betragsmäßig unendlicher Wechselwirkung gegenüber dem Fall ohne Wechselwirkung bestätigt werden.

5.7 Dualität zwischen schwacher und starker Wechselwirkung

Wie im vorherigen Abschnitt diskutiert wurde, ergibt sich im Grenzfall betragsmäßig unendlicher Wechselwirkung bis auf einige energetisch separierte Zustände das gleiche Verhalten wie im Fall ohne Wechselwirkung. In [43] wurde zudem gezeigt, daß eine Symmetrie im Verhalten für kleine U und kleine $1/U$ besteht.

In Abbildung 20 ist die Abhängigkeit der dimensionslosen Krümmungen gegenüber der Wechselwirkungsstärke aufgetragen. In den beiden Grenzfällen schwacher und starker Wechselwirkung ist das Verhalten wie erwartet ähnlich. Die logarithmische Auftragung ermöglicht es, die zwei Fälle, einerseits proportional zur Wechselwirkungsstärke U und andererseits indirekt proportional zur Wechselwirkungsstärke U , in einer Graphik zusammenzufassen, da sie wegen $\log(1/U) = -\log(U)$ in gleicher Weise erfaßt werden. Dazwischen ist für eine Wechselwirkungsstärke U der Ordnung 1 der Einfluß auf die Krümmungen maximal. Das Maximum des Einflusses der Wechselwirkung selbst steigt dabei mit der Unordnungsstärke an. Eine solche Abhängigkeit wurde in [65] bereits für den Grundzustand vieler wechselwirkender Fermionen beobachtet.

Die für die Unordnungsstärke $W = 1,25$ eingerahmten Daten bei Wechselwirkungsstärke $U = 1,25$ sind in Abbildung 21 nochmals detailliert gezeichnet. Es handelt sich dabei um Punkte, die im Mittel über jeweils zwanzig verschiedene Realisierungen der Unordnung berechnet worden sind. Die Zufallszahlen, die zu den Punkten „a“ geführt haben, sind dabei dieselben, wie sie ansonsten in der Abbildung 20 verwendet wurden.

Die Beispiele aus Abbildung 21 zeigen, daß es einem Mittel über sehr viele Realisierungen der Unordnung bedarf, ehe präzise quantitative Aussagen über typische Krümmungen im

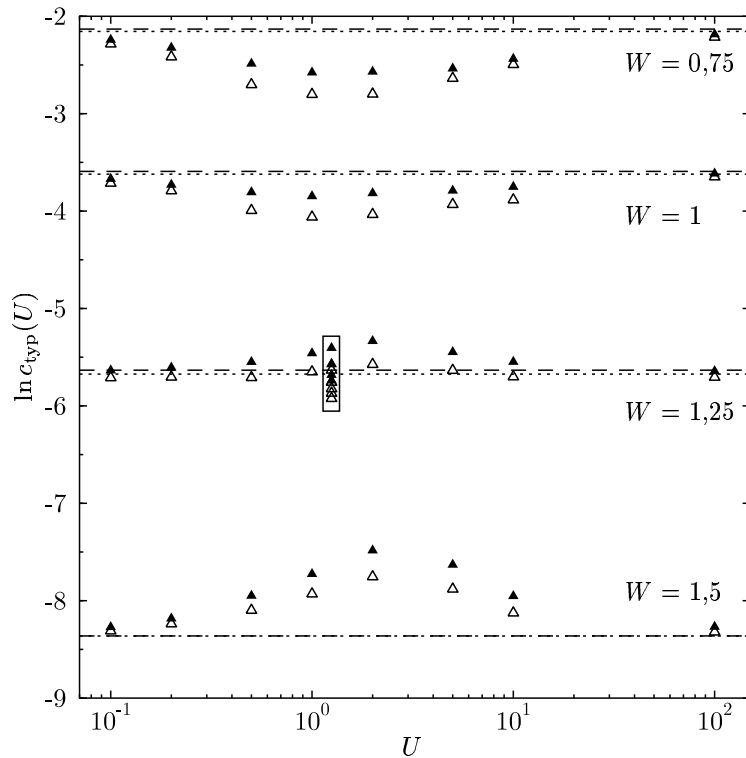


Abbildung 20: Verhalten der typischen Krümmungen c_{typ} im Mittel über 20 Realisierungen im Ring mit 100 Plätzen als Funktion der Wechselwirkung U bei verschiedenen Unordnungen W . Die Linien geben jeweils die Werte für $U = 0$ an. Die vollen Dreiecke und die gestrichelten Linien entstehen durch Mittelung im Energieintervall $[-2,5 : -1]$, die offenen Dreiecke und gepunkteten Linien hingegen für $[1 : 2,5]$. Die für $U = 1,25$ und $W = 1,25$ eingerahmt dargestellten Werte zeigen Fluktuationen durch Mittelung über jeweils 20 verschiedene Realierungen der Unordnung. Die Daten werden in Abbildung 21 nochmals detailliert gezeigt und sind hier nur zum Größenvergleich einblendet.

Unordnungsmittel möglich werden. Das ist insbesondere der Grund, warum man für die Untersuchung des Einflusses der Wechselwirkung von den gleichen Realisierungen der Unordnung ausgehen sollte, denn dadurch wird der Aufwand deutlich verringert. Es zeigt sich nämlich, daß die stark eingeschränkten Unordnungsmittel sehr wohl genügen, um den Einfluß der Wechselwirkung zu untersuchen, denn die gefundenen Abhängigkeiten finden sich bei der Verwendung anderer Realisierungen der Unordnung in gleicher Weise wieder.

5.8 Ein-Parameter-Abhängigkeit der Krümmungen bei Variation der Wechselwirkung

Nachdem der Einfluß der Wechselwirkung verschiedener Stärke bereits diskutiert worden ist, soll nun noch betrachtet werden, wie sich das auf die bereits in Abschnitt 5.5 diskutierte Ein-Parameter-Abhängigkeit des Einflusses der Wechselwirkung auf die Krümmungen auswirkt.

Zunächst ergibt sich für die andere Wechselwirkungsstärken erwartungsgemäß eine qualitativ völlig analoge Abhängigkeit wie sie in den Abbildungen 18 und 19 bereits aufgetreten ist. Insbesondere kann nun für jede Wechselwirkungsstärke wiederum eine Approximationsformel (56) finden. Der kritische Wert g_{crit} , bei dem der Einfluß der Wechselwirkung von einer Erhöhung der

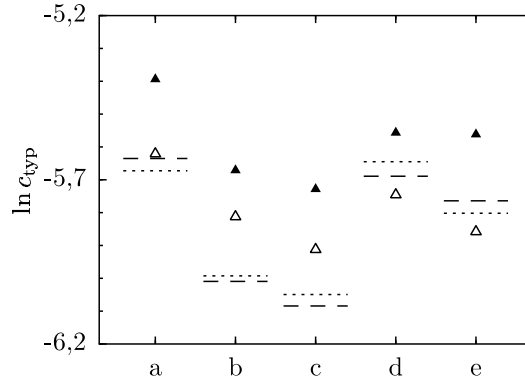


Abbildung 21: Verhalten der typischen Krümmungen c_{typ} im Mittel über 20 Realisierungen im Ring mit 100 Plätzen für eine Wechselwirkungsstärke $U = 1,25$ und für eine Unordnungsstärke $W = 1,25$. Die Linien geben jeweils die Werte für $U = 0$ an. Die vollen Dreiecke und die gestrichelten Linien entstehen durch Mittelung im Energieintervall $[-2,5 : -1]$, die offenen Dreiecke und gepunkteten Linien hingegen für $[1 : 2,5]$. Die Werte „a“ bis „e“ der Abszisse stehen für Mittelungen über jeweils verschiedene Realisierungen der Unordnung und zeigen damit typische Fluktuationen aufgrund der speziellen Wahl der Unordnungen, über die gemittelt wird.

Krümmungen im Fall kleinerer Krümmungen zu einer Verringerung im Fall größerer Krümmungen wechselt, erweist sich in innerhalb der numerisch zugänglichen Genauigkeit als unabhängig von der Stärke der Wechselwirkung U .

Ganz im Gegensatz dazu ist der Anstieg m deutlich abhängig von der Wechselwirkungsstärke U , denn bereits in Abbildung 20 war deutlich zu sehen, daß die Amplitude der Änderung der Krümmungen bei unterschiedlich starker Wechselwirkung variiert. Zunächst steigt der Einfluß an, bevor er bei höherer Wechselwirkung wieder auf den ursprünglichen Wert abfällt. Verallgemeinert man also die Gleichung (56) zu

$$\frac{g_{\text{typ}}(U)}{g_{\text{typ}}(0)} \approx \left(\frac{g_{\text{typ}}(0)}{g_{\text{crit}}} \right)^{m(U)}, \quad (59)$$

erhält man die Abhängigkeit des Einflusses der Wechselwirkung auf die Krümmungen von der Wechselwirkungsstärke selbst in Form des Parameters $m(U)$, der in Abbildung 22 dargestellt ist.

Für positive Energie im Spektrum liegt der Wert für $\ln g_{\text{crit}}$ bei etwa -3 , für negative Energie hingegen mit $-2,2$ etwas höher. Diese quantitativen Werte müssen jedoch mit etwas Vorsicht betrachtet werden, da stabile Aussagen ein extrem aufwendiges Unordnungsmittel benötigen. Außerdem sind diese Absolutwerte von der Mittelungsprozedur bei der Bestimmung der typischen Krümmungen abhängig auch wenn sich das bei verschiedenen Tests immer nur in der ersten Stelle nach dem Komma ausgewirkt hat.

Den Wert g_{crit} kann man mit den Abschätzungen der Einteilchenkrümmungen, die am Ende des Abschnittes 3.7 diskutiert wurden, sehr anschaulich auf ein Verhältnis der Einteilchenlokalisierungslänge L_1 zur Systemgröße L umrechnen. Danach ergeben sich für L/L_1 Werte in der Größenordnung von 5 für abstoßende und 6 für anziehende Wechselwirkung. Ist das Verhältnis noch größer, dann werden die Krümmungen durch die Wechselwirkung erhöht, im anderen Fall werden sie jedoch durch eine Wechselwirkung zwischen den Teilchen verringert.

Das hier numerisch gefundene Verhalten, daß die dimensionslosen Krümmungen oberhalb eines kritischen Wertes g_{crit} durch Wechselwirkung verringert werden, unterhalb jedoch erhöht,

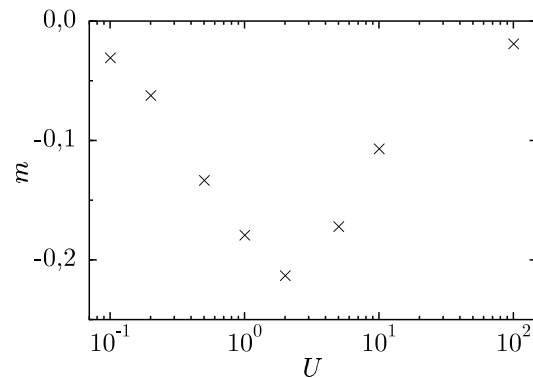


Abbildung 22: Dargestellt ist die Abhängigkeit des Exponenten $m(U)$ der Approximationsformel (59) als Funktion der Wechselwirkungsstärke U . Dazu wurden die in Abbildung 20 dargestellten Daten umgerechnet. Im wechselwirkungsfreien Fall $U = 0$ und für unendlich starke Wechselwirkung $U \rightarrow \infty$ wird der aufgetragene Exponent $m(U)$ Null.

steht in direktem Zusammenhang mit verschiedenen anderen Untersuchungsergebnissen zum TIP-Problem. Zunächst bestätigt es die Abschätzungen von Akkermans und Pichard [40], die ein solches Verhalten vorhergesagt haben. Dieses Bild wird erweitert durch die Einführung einer Ein-Parameter-Abhängigkeit, bei der der Wechsel zwischen dem vorzeichenmäßig unterschiedlichen Einfluß der Wechselwirkung stattfindet. Erwartungsgemäß findet man den Umschlagpunkt an einer Stelle, bei der die Einteilchenlokalisierungslänge L_1 in der Größenordnung der Systemgröße L liegt. Für kleinere Einteilchenlokalisierungslängen erhält man eine Erhöhung der Krümmungen durch die Wechselwirkung, wie es für eine Vergrößerung der Lokalisierungslänge erwartet wird. Das bestätigt den von Shepelyansky gefundenen Delokalisierungseffekt durch eine Wechselwirkung [27]. Die bei großer Lokalisierungslänge, also entsprechend geringer Unordnungsstärke, gefundene Verringerung der Krümmungen, bestätigt hingegen den vor Beginn der Diskussion des TIP-Problems als typisch angenommenen Lokalisierungseffekt einer Wechselwirkung zwischen den Teilchen. Dieser Standpunkt, der aus Untersuchungen stammte, die eine gleichzeitige Betrachtung starker Unordnung und starker Wechselwirkung nicht zuließen, verliert damit seine allgemeine Gültigkeit, weshalb der Delokalisierungseffekt keineswegs im Widerspruch mit früheren Erkenntnissen steht.

Der in verschiedenen Bereichen unterschiedliche Einfluß wurde auch bei der Simulation der Zeitentwicklung von Zuständen im TIP-Problem ausgehend von nah beieinanderliegenden Teilchen beobachtet [44]. Zunächst propagieren die Teilchen dabei innerhalb der Einteilchenlokalisierungslänge ballistisch, weil sie die mittlere freie Weglänge, die in einer Dimension gleich der Lokalisierungslänge ist, noch nicht erreicht haben. In diesem Sinne liegt dabei also delokalisiertes Einteilchenverhalten vor. Durch die Einführung einer Wechselwirkung wird diese Zeitentwicklung verlangsamt, sodaß die Einteilchenlokalisierungslänge später erreicht wird. Danach schlägt der Einfluß der Wechselwirkung jedoch um. Während im wechselwirkungsfreien Fall die räumliche Ausdehnung der Zustände nicht weiter anwächst und demnach lokalisiertes Einteilchenverhalten vorherrscht, führt Wechselwirkung zu einer weiteren Delokalisierung mit einem logarithmischen Zeitgesetz für die Schwerpunktsbewegung bis die Zweiteilchenlokalisierungslänge erreicht ist. Diese Interpretation der Ergebnisse legt nahe, daß hier auf ganz unterschiedliche Weise dieselbe Auswirkung der Wechselwirkung beobachtet wird.

Auch bei Untersuchungen des Grundzustandes vieler Teilchen in einer Dimension hat eine Wechselwirkung zwischen den Teilchen derart unterschiedlichen Einfluß auf die Lokalisierung der Zustände gezeigt [65]. Der Wechsel von einem in den anderen Bereich ist dabei ebenfalls durch die Einteilchenlokalisierungslänge bestimmt. Für viele Teilchen ist offenbar jedoch nicht das Verhältnis zur Systemgröße selbst entscheidend, sondern das Verhältnis zum Quotienten aus Systemgröße und Teilchenzahl. Inwiefern diese einfache Abhängigkeit eine Besonderheit der dort untersuchten spinlosen Fermionen ist, ist bisher jedoch noch nicht klar.

Schließlich zeigen erste Ergebnisse aus Untersuchungen des Gleichstrom-Kubo-Leitwertes vieler wechselwirkender Teilchen in zwei Dimensionen ebenfalls einen unterschiedlichen Einfluß der Wechselwirkung [66]. Die vielversprechende numerische Methode der Diagonalisierung des Hamiltonoperators in einer vergleichsweise kleinen Basis aus Hartree-Fock Zuständen erlaubt eine näherungsweise Berechnung der niedrigsten angeregten Zustände.

5.9 Langreichweitige Wechselwirkungen

Abschließend soll der Einfluß einer langreichweitigen Wechselwirkung betrachtet werden, da dies insbesondere für die in [45] diskutierte experimentelle Untersuchung des Wechselwirkungseffektes im TIP-Problem von entscheidender Bedeutung ist. Dazu muß zunächst ein Abstand $d(l_1, l_2)$ zwischen zwei Ringpositionen l_1 und l_2 definiert werden. Unter Beachtung der Periodizität im Ring bietet sich

$$d(l_1, l_2) = \begin{cases} |l_1 - l_2| & \text{falls } 2|l_1 - l_2| < L \\ L - |l_1 - l_2| & \text{sonst} \end{cases} \quad (60)$$

an. Nun kann man den Hamiltonian \mathcal{H}_2 modifizieren zu

$$\mathcal{H}'_2 = \mathcal{H}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \mathcal{H}_1 + \sum_{l_1, l_2=0}^{L-1} \frac{U}{d(l_1, l_2) + 1} \exp \left\{ -\frac{d(l_1, l_2)}{\lambda} \right\} |l_1, l_2\rangle \langle l_1, l_2|. \quad (61)$$

Der positive Parameter λ kann zur Veränderung der Art der Wechselwirkung verwendet werden. Für $\lambda \rightarrow 0$ ergibt sich die ursprüngliche Hubbard-Wechselwirkung aus \mathcal{H}_2 , da dann für $l_1 \neq l_2$ die Exponentialfunktion den Wechselwirkungsterm unterdrückt. Für $\lambda \rightarrow \infty$ fällt hingegen der Einfluß der Exponentialfunktion weg, wodurch ein Coulomb-ähnliches Potential entsteht. Die Divergenz, die im Fall $l_1 = l_2$ eines Coulomb-Potentials angesetzt werden müßte, wurde durch die Addition der Eins im Quotient $U/(d+1)$ unterdrückt. Wählt man λ zwischen Null und unendlich, wird durch die Exponentialfunktion die Abschirmung des Coulomb-ähnlichen Potentials verändert, wobei die für $l_1 = l_2$ maximal auftretende Wechselwirkung zwischen den Teilchen gleich bleibt.

In Abbildung 23 wurde durch Wahl verschiedener λ die Art der Wechselwirkung ausgehend von einer Hubbard-Wechselwirkung über eine abgeschirmte Coulomb-ähnlichen Wechselwirkung hin zu der nichtabgeschirmten Coulomb-ähnlichen Wechselwirkung variiert. Gegenüber dem Unterschied zwischen dem wechselwirkungsfreien Fall $U = 0$ und dem Fall mit einer Hubbard-Wechselwirkung der Stärke $U = 0,5$ ist der Einfluß des Abschirmparameters λ sehr gering. Die langreichweitigen Wechselwirkungen verstärken den Effekt, den die Hubbard-Wechselwirkung gegenüber dem nichtwechselwirkenden Fall ausübt, im Mittel ein wenig. Den

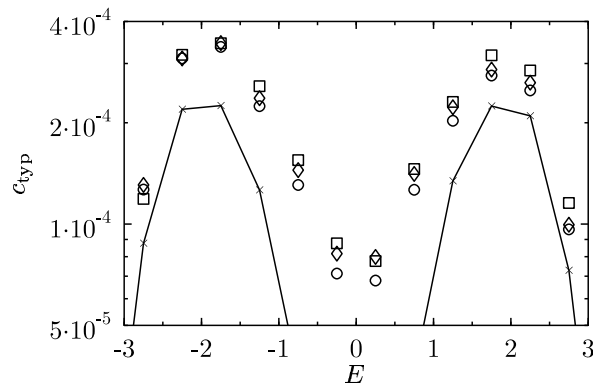


Abbildung 23: Typische Krümmungen bei Variation der Wechselwirkung im Ring mit 100 Plätzen und Mittelung über 100 Realisierungen der Unordnung. Die durch Linien verbundenen kleinen Kreuze entstehen im Fall ohne Wechselwirkung, die Kreise durch Hubbard-Wechselwirkung $\lambda \rightarrow 0$, die Rauten durch ein abgeschirmtes Coulomb-ähnliches Potential mit $\lambda = 1$ und die Quadrate durch ein nichtabgeschirmtes Coulomb-ähnliches Potential $\lambda \rightarrow \infty$. Für die Wechselwirkungsstärke U wurde in den wechselwirkenden Fällen jeweils der Wert 0,5 verwendet. Die erzielten Rechengenauigkeiten liegen innerhalb der Symbolgröße.

Einfluß einer Wechselwirkung durch Variation der Abschirmlänge an einer Elektronen-Loch-Paar-Anregung experimentell zu untersuchen, wie im Rahmen von [45] diskutiert wird, scheint demnach schwierig.



6 Verteilung der Krümmungen

6.1 Motivation

Neben dem typischen Wert für die Krümmungen der Zweiteilchenniveaus verändert sich auch die Verteilung der Krümmungen unter dem Einfluß einer Wechselwirkung. Im Abschnitt 2.1 der Grundlagen wurde am Beispiel der Niveaustatistik $P(s)$ bereits demonstriert, daß die Auswertung solcher Verteilungsfunktionen Informationen über Transporteigenschaften liefern kann. Neben der Poisson- und der Zufallsmatrixverteilung des Gaußschen Orthogonalen Ensembles (GOE), die in vielen verschiedenen Problemen immer wieder in gleicher Weise auftreten, findet man dabei auch die sogenannte kritische Statistik, die ebenfalls an vielen unterschiedlichen Systemen beobachtet werden kann und deshalb in ähnlicher Weise universell scheint. Im TIP Problem wurde diese kritische Verteilung in der Niveaustatistik für Ringgrößen L im Bereich der Einteilchenlokalisierungslänge L_1 in der Bandmitte gefunden [43] und hier soll nun für diese Parameter die Statistik der Krümmungen näher untersucht werden. Die grundlegend zu beantwortende Frage dabei ist, ob sich die kritische Statistik bei verschiedenen Systemen stets in der gleichen Weise für verschiedene Größen zeigt und somit tatsächlich eine hohe Universalität vorliegt, wie sich das auch für die schon lang bekannten Poisson- und Zufallsmatrixverteilungen herausgestellt hat. Dazu soll untersucht werden, ob sich auch im Fall des TIP-Problems mit seinem aus der Niveaustatistik $P(s)$ erwarteten kritischen Verhalten [43] eine Statistik für die Krümmungen ergibt, die in [19] für einen anderen Fall kritischer Statistik, nämlich den Metall-Isolator-Übergang im dreidimensionalen Anderson-Modell, vorgeschlagen wurde.

In Abbildung 24 sind Übersichtsdarstellungen für die Verteilungen $P(|c|)$ als Funktion der Energie E im Spektrum bei einer Unordnungsstärke von $W = 0,5$ und einer Ringgröße von 100 Plätzen dargestellt, so daß die Einteilchenlokalisierungslänge L_1 in der Bandmitte der Einteilchenzustände gerade der Systemgröße L entspricht und nur die Zustände näher an den Rändern des Einteilchenspektrums lokalisiert sind. Das Bild auf der linken Seite entsteht im wechselwirkungsfreien Fall, während rechts eine Unordnung von $U = 1,25$ vorliegt, wo also der Einfluß der Wechselwirkung nahe seinem Maximum ist. Statt der Auftragung der Verteilung $P(\ln|c|)$, wie es in den vorherigen Kapiteln zur Bestimmung typischer Krümmungen sinnvoll war, ist es hier günstiger, eine logarithmische Auftragung von $P(|c|)$ zu verwenden, die zwar dieselben Informationen enthält, sich jedoch für die Unterscheidung verschiedener Verteilungen als vorteilhaft erweist.

In der Mitte und an den Enden des Zweiteilchenspektrums sind die Krümmungen kleiner als für andere Energien, wie es schon für die typischen Krümmungen gefunden wurde, und die Verteilung der Krümmungen ist stark zu deutlich kleineren Krümmungen hin verschoben. Außerdem verändert sich auch die Form der Verteilung als Funktion der Energie und der Wechselwirkung erheblich.

Vor der detaillierteren Diskussion der Verteilungen sollen die typischen Krümmungsverteilungen angegeben werden, die vom Anderson-Modell her bekannt sind und die dort ausgenutzt werden können, um unterschiedliche Bereiche der Lokalisierung zu identifizieren. Solche Verteilungen von Krümmungen werden als Funktion normierter Krümmungen k ausgedrückt, die durch

$$k = \frac{c}{|c|} \quad (62)$$

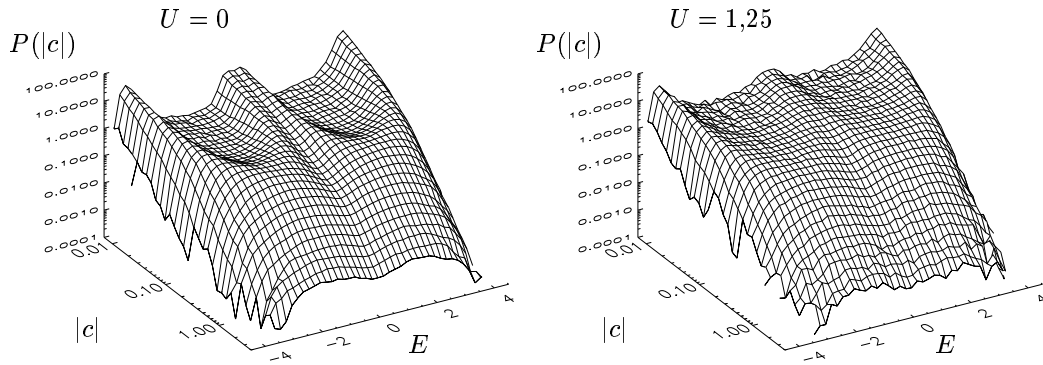


Abbildung 24: Überblick über die Statistik der Krümmungen $P(|c|)$ von Zweiteilchenenergieniveaus im Fall ohne Wechselwirkung $U = 0$ und mit Wechselwirkung $U = 1,25$ über der Energie E im Spektrum. Die Unordnungsstärke W ist mit dem Wert 0,5 so gewählt, daß die Einteilchenlokalisierungslänge in der Bandmitte gleich der Ringgröße $L = 100$ ist, wie es in [43] als Bedingung für das Auftreten kritischer Statistik gefunden wurde. Im Fall ohne Wechselwirkung wurde über 1 000 Realisierungen der Unordnung gemittelt, im Fall mit Wechselwirkung über 100 Realisierungen.

definiert sind, wobei $\overline{|c|}$ den Mittelwert, also das erste Moment, der Verteilung der Krümmungen $P(|c|)$ bezeichnet. Dadurch fällt der Einfluß der absoluten Krümmungen heraus und es entstehen wesentlich universellere Verteilungen.

Im lokalisierten Bereich, wenn die Systemgröße L größer als die Lokalisierungslänge L_1 ist, findet man numerisch in guter Näherung eine log-normale Verteilung der $P(|k|)$ [57], die auch analytisch hergeleitet werden konnte [58]. Im diffusiven Bereich hingegen ist die Systemgröße kleiner als die Lokalisierungslänge, aber immer noch größer als die mittlere freie Weglänge. Dann ergibt sich ein Verhalten [57, 59, 60], das gut durch eine aus der Betrachtung von Zufallsmatrizen des Gaußschen Orthogonalen Ensembles GOE erhaltenen Form [61] approximiert wird. Außerdem wurde gezeigt, daß für die Verteilung der Krümmung trotz der Einführung eines Flusses ϕ und damit dem Übergang zu einer anderen Symmetrieklasse, nämlich dem Übergang von reell-symmetrischen Matrizen zu komplex-hermiteschen Matrizen, im Grenzfall $\phi \rightarrow 0$ trotzdem die vom GOE her bekannte Form gültig bleibt [59, 60]. Sie lautet

$$P_{\text{GOE}}(|k|) = \frac{1}{(1 + |k|^2)^{3/2}}. \quad (63)$$

Dieser Fall diffusiven Transports ist in einer Dimension jedoch marginal, da hier die Lokalisierungslänge mit der mittleren freien Weglänge übereinstimmt. Im ballistischen Bereich schließlich ist die Systemgröße sogar kleiner als die mittlere freie Weglänge, was wiederum eine andere Krümmungsverteilung zur Folge hat [62]. Gegenüber dem diffusiven Fall P_{GOE} entsteht bei $|k| \approx 1$ ein Maximum in der Verteilung $P(|k|)$, daß umso deutlicher hervortritt, je kleiner das System gegenüber der freien Weglänge wird. Schließlich gibt es auch für den kritischen Fall am Metall-Isolator-Übergang im drei Dimensionen aufgrund numerischer Untersuchungen [19] einen Vorschlag für die Form der Verteilung. Dieser unterscheidet sich vom Zufallsmatrixergebnis im wesentlichen durch den Exponenten und lautet

$$P_{\text{crit}}(|k|) = \frac{A}{(1 + |k|^\mu)^{3/\mu}}, \quad (64)$$

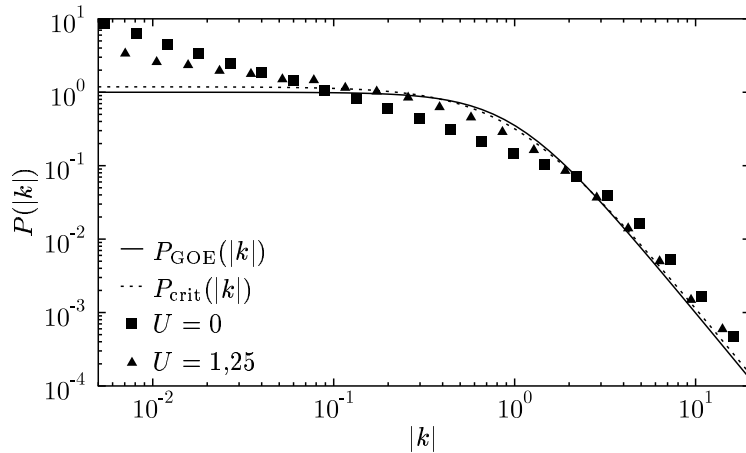


Abbildung 25: Detailbild der Statistik $P(|c|)$ aus Abbildung 24 als Mittelung im Energiebereich $[-0,1 : 0,1]$ umgerechnet auf normierte Krümmungen $k = c/\bar{c}$.

wobei der Parameter A durch die Normierung festgelegt ist. Man erhält für ihn

$$A = \frac{\mu\Gamma(3/\mu)}{\Gamma(1/\mu)\Gamma(2/\mu)}. \quad (65)$$

Für den Parameter μ ist in [19] der Wert 1,58 gefunden worden.

6.2 Verhalten in der Bandmitte

Insbesondere im wechselwirkungsfreien Fall findet man in der Bandmitte des Zweiteilchenspektrums deutlich keine Sättigung der Verteilung $P(|k|)$, wie in Abbildung 25 zu sehen ist. Sie unterscheidet sich damit substantiell von den Verteilungen der Krümmungen, die im Anderson-Modell in den unterschiedlichen Bereichen gefunden wurden. Die Ursache dafür ist wiederum die Kombination von Einteilchenzuständen, die sich genau im Vorzeichen ihrer Einteilchenenergie unterscheiden. Dadurch entsteht eine Mischung über das komplette Einteilchenspektrum hinweg und somit gibt es insbesondere auch sehr viele extrem kleine Krümmungen.

Mit Wechselwirkung wird die Verteilung deutlich in Richtung der durch die Verteilung $P_{\text{GOE}}(|k|)$ gegebenen Form hin verschoben, was dem diffusiven Verhalten im wechselwirkungsfreien Anderson-Modell entspricht. Im ballistischen und lokalisierten Bereich treten dagegen noch weniger kleine Krümmungen auf, und die Verteilungen unterscheiden sich noch deutlicher als $P_{\text{GOE}}(|k|)$ von der in Abbildung 25 gefundenen Form.

Anhand der Energieniveaustatistik $P(s)$ und der Σ_2 -Statistik wurde bei Ringgrößen im Bereich der Einteilchenlokalisierungslänge und mittlerer Wechselwirkung in der Bandmitte eine Statistik gefunden, die zwischen Poisson und GOE liegt, und die nicht unterscheidbar von der kritischen Statistik ist, wie sie in einer ganzen Reihe unterschiedlicher Systeme auftritt [43]. Die Abbildung 25 ist genau für diese Parameter gezeichnet. Außerdem ist die Verteilung $P_{\text{crit}}(|k|)$, die in [19] im Anderson-Modell in drei Dimensionen am Metall-Isolator-Übergang als kritische Verteilung der Krümmungen gefunden wurde, gestrichelt eingezeichnet. In der hier gewählten doppeltlogarithmischen Auftragung von $P(|k|)$ ist der Unterschied zwischen der auch hier zunächst vermuteten Verteilung $P_{\text{crit}}(|k|)$ und dem Zufallsmatrixergebnis $P_{\text{GOE}}(|k|)$ sehr gering

und die Daten sind inkonsistent mit beiden Verteilungen. Besonders der Anstieg der Verteilung bei extrem kleinen Krümmungen ist zwar im Fall mit Wechselwirkung gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall deutlich kleiner, aber trotzdem noch vorhanden. Das ist auch der Grund, weshalb hier genau diese Auftragung gewählt wurde, die sich insbesondere auch von der in [19] verwendeten Darstellung unterscheidet. Obwohl für den Fall mit Wechselwirkung in der spektralen Statistik $P(s)$ genau die Form der kritischen Statistik gefunden wurde [43], ist die Statistik der Krümmungen deutlich von der verschieden, die beim Metall-Isolator-Übergang in dreidimensionalen Anderson-Modell aufgrund numerischer Daten für die kritische Statistik vorgeschlagen wurde.

In [40] wurde eine topologische Krümmung c^{top} vorgeschlagen, die sich qualitativ von der hier untersuchten „gewöhnlichen“ Krümmung unterscheidet. Sie entsteht, indem man für beide Teilchen unabhängige magnetische Flüsse ϕ_1 und ϕ_2 einführt und dann Ableitungen der Zweiteilchenenergieniveaus E_α nach beiden Flüssen bildet, also

$$c_\alpha^{\text{top}} = \frac{\partial^2 E_\alpha}{\partial \phi_1 \partial \phi_2}. \quad (66)$$

Für diese topologische Krümmung wird erwartet, daß sie direkter mit Eigenschaften wie der spektralen Statistik $P(s)$ verknüpft ist [40] und deshalb ist es möglich, daß für diese Größe ein kritisches Verhalten gleich dem in [19] gefundenen, auftritt. Andererseits ist es auch möglich, daß eine Universalität in den Verteilungen der Krümmungen für verschiedene Fälle kritischen Verhaltens in anderen Energieniveaustatistiken einfach nicht vorhanden ist. Um das eingehender zu untersuchen ist es insbesondere notwendig, auch solche anderen Fälle kritischen Verhaltens genauer zu betrachten. Beispielsweise wird aus den in [19] präsentierten Daten nicht klar, ob bei der doppeltlogarithmischen Auftragung von $P(|k|)$ tatsächlich ein Sättigungswert für kleine Krümmungen erreicht wird, wie es die angegebene Approximationsformel (64) impliziert. Andererseits führt eine Auftragung ohne logarithmische Skalenteilung dazu, daß die Verteilungen noch schlechter voneinander unterschieden werden können.

6.3 Verhalten außerhalb der Bandmitte

Außerhalb der Bandmitte ist das Verhalten deutlich vom bisher diskutierten verschieden. Dazu wurde in Abbildung 26 die Verteilung im Energiebereich $[1,5 : 2]$ des Spektrums dargestellt. Ohne Wechselwirkung zeigt die Verteilung $P(|k|)$ der Krümmungen dabei ein Minimum bei kleinen Krümmungen und zudem ein Maximum in der Nähe des Wertes der typischen Krümmung in diesem Fall. Dies wird sogar noch deutlicher, wenn die Unordnungsstärke verringert wird. Dieses Verhalten ist für den ballistischen Bereich von Einteilchenkrümmungen bekannt [57, 59], wenn die typische freie Weglänge größer als die Systemgröße ist. Für Teilchen ohne Wechselwirkung ist man in der Bandmitte bei der gewählten Unordnung gerade in dem Bereich, daß beide Längenskalen gleich sind und erreicht damit offensichtlich in den Zweiteilchenenergieniveaus den ballistischen Bereich noch.

Mit mäßiger Wechselwirkung wird die Verteilung der Krümmungen im Rahmen der erzielten Genauigkeit dem vom GOE her bekannten Verhalten identisch, welches im Einteilchenfall typisch für diffusives Verhalten ist. Das legt nahe, daß die Wechselwirkung zwischen den Teilchen die mittlere freie Weglänge durch Streuprozesse reduziert und dadurch die Zweiteilchendynamik

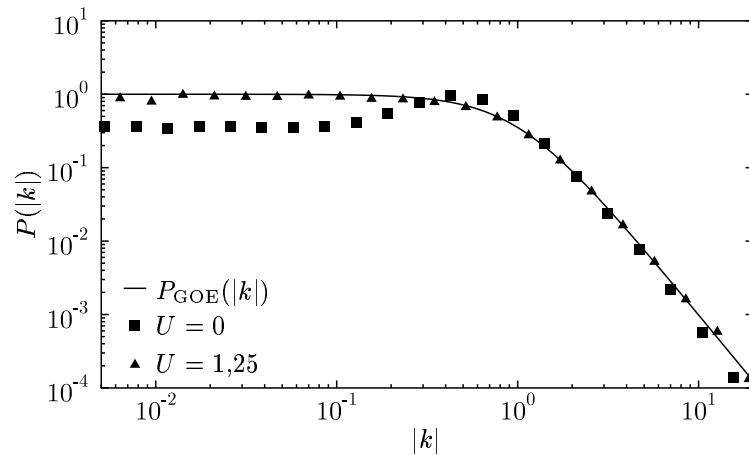


Abbildung 26: Detailbild der Statistik $P(|c|)$ aus Abbildung 24 als Mittelung im Energiebereich $[1,5 : 2]$ umgerechnet auf normierte Krümmungen $k = c/\bar{c}$.

diffusiv macht. Dies deckt sich auch mit der Beobachtung der Verringerung der Krümmungen im Sinne einer Verringerung der Mobilität der Teilchen.

Zeichnet man die Abbildung 26 für höhere Unordnungsstärken, ähnelt das Bild zunehmend der Darstellung 25. Der Einfluß der Wechselwirkung kehrt sich in ihrer Auswirkung auf die Form der Verteilung also um, ganz ähnlich wie es auch schon für die typischen Krümmungen beobachtet wurde.



7 Zusammenfassung

In dieser Diplomarbeit wurden numerische Berechnungen von Krümmungen von Energieniveaus durchgeführt, um anhand dieser Größe Informationen über die Lokalisierung im Problem zweier wechselwirkender Teilchen in ungeordneten eindimensionalen Systemen zu erhalten. Dabei hat sich gezeigt, daß die Auswertung von Verteilungen von Krümmungen und die Bestimmung typischer Krümmungen ein geeignetes Mittel darstellen, den Einfluß einer Wechselwirkung zu studieren. Die typischen Krümmungen geben den Einfluß einer Randbedingung auf die Energieniveaus an, wodurch die Lokalisierung der Teilchen gemessen wird. Der numerische Aufwand dafür ist erheblich, liefert dafür aber ein facettenreiches Bild, nach dem der Einfluß einer Wechselwirkung in unterschiedlichen Bereichen vom Vorzeichen her verschieden ist. Im Fall großer Unordnung und entsprechend kleiner Krümmungen führt eine Wechselwirkung im Mittel zu einer Erhöhung der Krümmungen, was für den in den letzten Jahren viel diskutierten Delokalisierungseffekt einer Wechselwirkung spricht. Bei kleiner Unordnung hingegen werden die auftretenden großen Krümmungen durch die Wechselwirkung verringert. Die Unterdrückung des Transports durch eine Wechselwirkung, die man lange Zeit als generelles Phänomen eingeschätzt hat, ist demnach zwar in bestimmten Bereichen vorhanden, verliert aber ihre Allgemeingültigkeit. Die Ergebnisse dieser Arbeit stellen damit eine der ersten Beobachtungen dar, die die Widersprüche zwanglos auflösen, die dem Delokalisierungseffekt durch Wechselwirkung zunächst anzulasten schienen.

Im Bereich des Umschlagpunktes des Einflusses der Wechselwirkung auf die auftretenden Krümmungen wurde eine Ein-Parameter-Abhängigkeit von der Größe der typischen Krümmungen im wechselwirkungsfreien Fall selbst gefunden. Die Krümmungen müssen dazu dimensionslos auf den mittleren Einteilchenniveauabstand bezogen werden. Dadurch kann der Wechsel zwischen den beiden Bereichen durch ein Verhältnis aus Lokalisierungslänge zu Systemgröße festgelegt werden, das bei etwa 1 zu 5 für abstoßende Wechselwirkung und 1 zu 6 für anziehende Wechselwirkung liegt.

Gleichzeitig scheint das Auftreten kritischer Statistik in verschiedenen spektralen Eigenschaften und bestimmten Parameterbereichen im TIP-Problem nicht gänzlich verstanden. Die Ergebnisse dieser Arbeit, bei denen versucht wurde, auch anhand der Verteilung der Krümmungen einen Hinweis auf das Vorhandensein kritischer Statistik zu finden, haben gezeigt, daß sich gegenüber einem anderen Fall kritischer Statistik, nämlich dem Metall-Isolator-Übergang im dreidimensionalen Anderson-Modell, signifikante Unterschiede ergeben. Möglicherweise ist die problemübergreifende Universalität im Fall kritischer Niveaustatistik nicht so ausgeprägt, wie im Fall anderer Universalitätsklassen. Untersuchungen zu diesem Thema gestalten sich jedoch aufwendig, da hierzu verschiedene Probleme behandelt und verglichen werden müssen.

Die aufgezeigten Möglichkeiten der numerischen Betrachtung des Einflusses auf Randbedingungen ermutigen, die Methode für die Behandlung vieler offener Fragestellungen, die sich nicht zuletzt auch in dieser Arbeit ergeben, einzusetzen. Eine detaillierte Untersuchung des Grundzustandes und der ersten angeregten Zustände ist insbesondere für die thermodynamischen Eigenschaften fundamental. Gleichzeitig erscheint es auf die Weise möglich, etwas mehr Teilchen oder auch höhere Dimensionen zu betrachten, denn der geringere numerische Aufwand bei Reduzierung auf den Rand des Energiespektrums läßt Erfolg in diese Richtung erhoffen.

Die bisherigen Resultate bei den begonnenen Untersuchungen von Modellen, die gleichzeitig starke Unordnung und Wechselwirkung enthalten, sind vielversprechend und man kann hoffen,

daß damit in naher Zukunft verschiedene bisher nicht verstandene experimentelle Ergebnisse erklärt werden können, wie beispielsweise das Auftreten metallischen Verhaltens in ungeordneten zweidimensionalen Schichten.

A Bestimmung von Krümmungen mittels Störungstheorie

Der Hamiltonoperator für ein Teilchen im Ring ohne Magnetfeld sei mit $\mathcal{H}_{1,\phi=0}$ bezeichnet und lautet

$$\mathcal{H}_{1,\phi=0} = \sum_{l=0}^{L-1} \left(V_l |l\rangle\langle l| - |l+1\rangle\langle l| - |l\rangle\langle l+1| \right). \quad (67)$$

Die Eigenzustände und -energien sind die Lösungen $\{|\psi_\alpha\rangle, \varepsilon_\alpha^{(0)}\}$ der Schrödingergleichung

$$\mathcal{H}_{1,\phi=0}|\psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha^{(0)}|\psi_\alpha\rangle. \quad (68)$$

Dabei ist der Hamiltonoperator $\mathcal{H}_{1,\phi=0}$ eine reelle symmetrische Matrix. Deshalb können auch die Eigenvektoren $\{|\psi_\alpha\rangle\}$ reell gewählt werden. Das bedeutet, daß die Projektionen $\langle l|\psi_\alpha\rangle$ reelle Zahlen sind und somit $\langle l|\psi_\alpha\rangle = \langle \psi_\alpha|l\rangle$ gilt.

Man kann einen Störoperator \mathcal{S}_ϕ einführen, der die Veränderungen durch das Magnetfeld enthält:

$$\mathcal{S}_\phi = - \sum_{l=0}^{L-1} \left((t-1)|l+1\rangle\langle l| + (t^*-1)|l\rangle\langle l+1| \right). \quad (69)$$

Dabei bezeichnet t das Hüpfmatrixelement nach Formel (21) und somit treten im Störoperator \mathcal{S}_ϕ nur Terme der Ordnung Eins und höher im magnetischen Fluß ϕ auf.

Der Hamiltonoperator mit Magnetfeld \mathcal{H}_1 wurde damit zerlegt in einen Hamiltonoperator ohne Magnetfeld $\mathcal{H}_{1,\phi=0}$ und einen Störoperator \mathcal{S}_ϕ , der die Korrekturen im magnetischen Fluß ϕ beinhaltet:

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_{1,\phi=0} + \mathcal{S}_\phi. \quad (70)$$

Nun kann man Störungstheorie auf diese Zerlegung anwenden. In erster Ordnung ergibt sich für die Korrektur der Eigenenergien aufgrund des Magnetfeldes

$$\varepsilon_\alpha^{(1)} = \langle \psi_\alpha | \mathcal{S}_\phi | \psi_\alpha \rangle = \left[\frac{4\pi^2\phi^2}{L^2} + O(\phi^4) \right] \sum_{l=0}^{L-1} \langle \psi_\alpha | l+1 \rangle \langle \psi_\alpha | l \rangle. \quad (71)$$

In zweiter Ordnung Störungstheorie entsteht hingegen

$$\varepsilon_\alpha^{(2)} = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\langle \psi_\alpha | \mathcal{S}_\phi | \psi_\beta \rangle \langle \psi_\beta | \mathcal{S}_\phi | \psi_\alpha \rangle}{\varepsilon_\alpha^{(0)} - \varepsilon_\beta^{(0)}} = \frac{4\pi^2\phi^2}{L^2} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{|\langle \psi_\beta | \mathcal{P} | \psi_\alpha \rangle|^2}{\varepsilon_\alpha^{(0)} - \varepsilon_\beta^{(0)}} + O(\phi^4). \quad (72)$$

Dabei bezeichnet der Operator \mathcal{P} bis auf einen Vorfaktor den Impulsoperator und lautet

$$\mathcal{P} = \sum_{l=0}^{L-1} \left(|l+1\rangle\langle l| - |l\rangle\langle l+1| \right). \quad (73)$$

Die Korrekturen in höherer Ordnung Störungstheorie enthalten nur noch Terme höherer Ordnung als 2 in ϕ . Die Krümmung $c_\alpha = \partial^2 \varepsilon_\alpha / \partial \phi^2|_{\phi=0}$ kann deshalb durch die ersten beiden Ordnungen Störungstheorie exakt bestimmt werden. Man erhält

$$c_\alpha = \left. \frac{\partial^2 \varepsilon_\alpha}{\partial \phi^2} \right|_{\phi=0} = \left. \frac{\partial^2 \varepsilon_\alpha^{(1)}}{\partial \phi^2} \right|_{\phi=0} + \left. \frac{\partial^2 \varepsilon_\alpha^{(2)}}{\partial \phi^2} \right|_{\phi=0} = \frac{8\pi^2}{L^2} \left[\sum_{l=0}^{L-1} \langle \psi_\alpha | l+1 \rangle \langle \psi_\alpha | l \rangle + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{|\langle \psi_\beta | \mathcal{P} | \psi_\alpha \rangle|^2}{\varepsilon_\alpha^{(0)} - \varepsilon_\beta^{(0)}} \right]. \quad (74)$$



B Bedingung für das Verschwinden der ersten Ableitung

Man kann mit einer Störungsrechnung die Ableitung der Energieniveaus ε_α nach dem magnetischen Fluß ϕ bei endlichem Fluß ϕ_0 bestimmen und diskutieren. Den Hamiltonoperator \mathcal{H}_{1,ϕ_0} für diesen Fluß ϕ_0 kann man in der Basis $\{|l\rangle\}$, die in Formel (23) eingeführt wurde, schreiben und erhält

$$\mathcal{H}_{1,\phi_0} = \sum_{n=0}^{L-1} V_n \underline{|n\rangle} \underline{\langle n|} - \sum_{n=0}^{L-2} \left(\underline{|n+1\rangle} \underline{\langle n|} + \underline{|n\rangle} \underline{\langle n+1|} \right) - \exp\{2\pi i \phi_0\} \underline{|0\rangle} \underline{\langle L-1|} - \exp\{-2\pi i \phi_0\} \underline{|L-1\rangle} \underline{\langle 0|}. \quad (75)$$

Man setzt die Lösung $\{|\psi_\alpha\rangle, \varepsilon_\alpha^{(0)}\}$ für den ungestörten Fall an mit

$$\mathcal{H}_{1,\phi_0} |\psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha^{(0)} |\psi_\alpha\rangle. \quad (76)$$

Als Störoperator muß man nun den Einfluß des Flusses ϕ an der Stelle ϕ_0 verwenden:

$$\mathcal{S}_{\phi-\phi_0} = -(\exp\{2\pi i \phi\} - \exp\{2\pi i \phi_0\}) \underline{|0\rangle} \underline{\langle L-1|} - (\exp\{-2\pi i \phi\} - \exp\{-2\pi i \phi_0\}) \underline{|L-1\rangle} \underline{\langle 0|}. \quad (77)$$

Auf diese Weise erhält man die für eine Störungsrechnung gewünschte Zerlegung

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_{1,\phi_0} + \mathcal{S}_{\phi-\phi_0}. \quad (78)$$

In erster Ordnung Störungstheorie erhält man

$$\varepsilon_\alpha^{(1)} = \langle \psi_\alpha | \mathcal{S}_{\phi-\phi_0} | \psi_\alpha \rangle = 4\pi(\phi - \phi_0) \text{Im}[\exp\{2\pi i \phi_0\} \langle \psi_\alpha | \underline{|0\rangle} \underline{\langle L-1|} | \psi_\alpha \rangle] + O((\phi - \phi_0)^2). \quad (79)$$

Die Korrekturen in höherer Ordnung Störungstheorie enthalten nur noch Terme mindestens quadratisch in $\phi - \phi_0$. Die erste Ableitung der Energieniveaus kann deshalb bereits mittels erster Ordnung Störungstheorie exakt bestimmt werden.

$$\left. \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \phi} \right|_{\phi=\phi_0} = \left. \frac{\partial \varepsilon_\alpha^{(1)}}{\partial \phi} \right|_{\phi=\phi_0} = 4\pi \text{Im}[\exp\{2\pi i \phi_0\} \langle \psi_\alpha | \underline{|0\rangle} \underline{\langle L-1|} | \psi_\alpha \rangle] \quad (80)$$

An diesem Ausdruck kann man sofort erkennen, daß die erste Ableitung für ganzzahlige $2\phi_0$ verschwindet. In diesem Fall ist nämlich der Hamiltonoperator \mathcal{H}_{1,ϕ_0} reell und somit können auch die Eigenvektoren und deren Projektionen $\langle \psi_\alpha | \underline{|l\rangle}$ reell gewählt werden. Folglich sind an diesen Stellen die ersten Ableitungen Null.

Andererseits kann man auch zeigen, daß die erste Ableitung für nicht-ganzzahlige $2\phi_0$ nie verschwinden kann, indem man den Ausdruck 80 unter Verwendung von Transfermatrizen umformt. Dazu müssen diese Transfermatrizen bestimmt werden, die eine Interpretation der Schrödingergleichung als Iterationsvorschrift für die Wellenfunktion darstellen. Unter Verwendung des Hamiltonoperators (75) und der Schrödingergleichung (76) entstehen zunächst die Ausdrücke

$$\underline{\langle 0|} \mathcal{H}_{1,\phi_0} |\psi_\alpha\rangle = V_0 \underline{\langle 0|} |\psi_\alpha\rangle - \exp\{2\pi i \phi_0\} \underline{\langle L-1|} |\psi_\alpha\rangle - \underline{\langle 1|} |\psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha \underline{\langle 0|} |\psi_\alpha\rangle, \quad (81a)$$

$$\underline{\langle l|} \mathcal{H}_{1,\phi_0} |\psi_\alpha\rangle = V_l \underline{\langle l|} |\psi_\alpha\rangle - \underline{\langle l-1|} |\psi_\alpha\rangle - \underline{\langle l+1|} |\psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha \underline{\langle l|} |\psi_\alpha\rangle, \quad (81b)$$

$$\underline{\langle L-1|} \mathcal{H}_{1,\phi_0} |\psi_\alpha\rangle = V_{L-1} \underline{\langle L-1|} |\psi_\alpha\rangle - \underline{\langle L-2|} |\psi_\alpha\rangle - \exp\{-2\pi i \phi_0\} \underline{\langle 0|} |\psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha \underline{\langle L-1|} |\psi_\alpha\rangle. \quad (81c)$$

Diese Gleichungen können mit Matrizen umgeschrieben werden und man erhält

$$\begin{pmatrix} \langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle \\ \langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} V_0 - \varepsilon_\alpha & -\exp\{2\pi i \phi_0\} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{T_0} \begin{pmatrix} \langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle \\ \langle \underline{L-1} | \psi_\alpha \rangle \end{pmatrix}, \quad (82a)$$

$$\begin{pmatrix} \langle \underline{l+1} | \psi_\alpha \rangle \\ \langle \underline{l} | \psi_\alpha \rangle \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} V_l - \varepsilon_\alpha & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{T_l} \begin{pmatrix} \langle \underline{l} | \psi_\alpha \rangle \\ \langle \underline{l-1} | \psi_\alpha \rangle \end{pmatrix}, \quad (82b)$$

$$\begin{pmatrix} \langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle \\ \langle \underline{L-1} | \psi_\alpha \rangle \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} (V_{L-1} - \varepsilon_\alpha) \exp\{2\pi i \phi_0\} & -\exp\{2\pi i \phi_0\} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{T_{L-1}} \begin{pmatrix} \langle \underline{L-1} | \psi_\alpha \rangle \\ \langle \underline{L-2} | \psi_\alpha \rangle \end{pmatrix}. \quad (82c)$$

Mit den sogenannten Transfermatrizen T_0, \dots, T_{L-1} kann man nun schrittweise von einer Position auf dem Ring zur nächsten Ringposition rechnen bis der Ring einmal komplett durchlaufen ist.

$$\begin{pmatrix} \langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle \\ \langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle \end{pmatrix} = T_0 T_{L-1} \prod_{l=L-2}^1 T_l \begin{pmatrix} \langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle \\ \langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle \end{pmatrix} \quad (83)$$

Im Produkt aus den Transfermatrizen bemerkt man zunächst, daß die Matrizen T_1, \dots, T_{L-2} reell sind. Außerdem läßt sich das Produkt $T_0 T_{L-1}$ bestimmen, wobei

$$T_0 T_{L-1} = \exp\{2\pi i \phi_0\} \begin{pmatrix} (V_0 - \varepsilon_\alpha)(V_{L-1} - \varepsilon_\alpha) - 1 & -(V_0 - \varepsilon_\alpha) \\ V_{L-1} - \varepsilon_\alpha & -1 \end{pmatrix} \quad (84)$$

entsteht. Damit folgt

$$\exp\{-2\pi i \phi_0\} \begin{pmatrix} \langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle \\ \langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} \langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle \\ \langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle \end{pmatrix}, \quad (85)$$

wobei $T = (T_{ij})$ eine nicht näher spezifizierte reelle Matrix ist, also die T_{ij} reelle Zahlen sind. Diese Matrixgleichung wird nun in Komponenten geschrieben.

$$\exp\{-2\pi i \phi_0\} \langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle = T_{11} \langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle + T_{12} \langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle, \quad (86a)$$

$$\exp\{-2\pi i \phi_0\} \langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle = T_{21} \langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle + T_{22} \langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle \quad (86b)$$

Diese Zusammenhänge kann man nun verwenden, um zu zeigen, daß die erste Ableitung nur genau für ganzzahlige $2\phi_0$ Null ist. Mit der Gleichung (81a) kann man die Formel (80) für die erste Ableitung umschreiben zu

$$\left. \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \phi} \right|_{\phi=\phi_0} = 4\pi \text{Im}[\langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle (\langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle)^*]. \quad (87)$$

Unter der Annahme, daß in Gleichung (86a) $T_{12} \neq 0$ ist, folgt

$$\left. \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \phi} \right|_{\phi=\phi_0} = 4\pi \text{Im} \left[\frac{\exp\{-2\pi i \phi_0\} - T_{11}}{T_{12}} \underbrace{\langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle (\langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle)^*}_{\text{reell}} \right]. \quad (88)$$

Die Ableitung ist für $\langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle \neq 0$ nur dann Null, wenn $\exp\{-2\pi i \phi_0\}$ reell ist. Dies bedeutet, daß $2\phi_0$ ganzzahlig ist.

Falls hingegen $T_{12} = 0$ ist, muß nach Formel (86a) bereits gelten

$$\langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle (\exp\{-2\pi i \phi_0\} - T_{11}) = 0. \quad (89)$$

Für $\langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle \neq 0$ folgt, daß $\exp\{-2\pi i \phi_0\}$ reell und somit $2\phi_0$ ganzzahlig sein muß.

Bleibt schließlich zu diskutieren, was bei $\langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle = 0$ passiert. Dann wird Gleichung (86b) zu

$$\langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle (\exp\{-2\pi i \phi_0\} - T_{22}) = 0. \quad (90)$$

Entweder, es gilt analog zu oben, daß $\exp\{-2\pi i \phi_0\}$ reell ist oder daß $\langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle$ bereits Null ist. Doch im letzteren Fall erhält man durch Anwendung der Transfermatrizen $\langle \underline{l} | \psi_\alpha \rangle = 0$ für alle l , da ja bereits $\langle \underline{0} | \psi_\alpha \rangle = \langle \underline{1} | \psi_\alpha \rangle = 0$ gilt. Das ist keine gültige Lösung.

Damit wurde gezeigt, daß die erste Ableitung der Energieniveaus ε_α für beliebigen Fluß ϕ_0 genau an den Stellen mit ganzzahligen $2\phi_0$ verschwinden.

$$\left. \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \phi} \right|_{\phi=\phi_0} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad 2\phi_0 \text{ ganzzahlig} \quad (91)$$



C Verfahren zur numerischen Berechnung von Krümmungen

Es ist ein Verfahren gesucht, mit dem man die 2. Ableitung – Krümmung genannt – einer numerisch berechenbaren Kurve ermitteln kann. Aufgrund des hohen Rechenaufwandes können nur wenige Punkte dieser Kurve berechnet werden, die zudem numerische Ungenauigkeiten aufweisen. Außerdem dürfen keine Punkte in Abhängigkeit von bisherigen Abschätzungen berechnet werden, da die Berechnung der Punkte nicht unabhängig voneinander für jede Kurve und damit für jede zu bestimmende Krümmung ausgeführt werden kann.

Für eine symmetrische Kurve genügt es, eine Seite bezüglich der Symmetrieachse zu betrachten. Die Ableitung kann man bestimmen, indem man die Kurve mit einer ebenfalls symmetrischen Funktion approximiert und die Ableitung dieser Funktion verwendet. Die Wahl der Approximationsvorschrift und der Funktion ist dabei wesentlich für die Genauigkeit, mit der die Ableitung der Kurve bestimmt wird.

Es hat sich herausgestellt, daß es sinnvoll ist, ein einfaches Polynom als Approximationsfunktion f zu verwenden.

$$f(\phi) = a + \frac{1}{2}c\phi^2 \quad (92)$$

Als gesuchte 2. Ableitung erhält man auf diese Weise c . Um diesen Koeffizienten zu bestimmen, werden zunächst 4 Werte der Kurve an den Stellen $0, h, 2h$ und $3h$ bestimmt, die mit $E(0), E(h), E(2h)$ und $E(3h)$ bezeichnet werden. Der Fehler Δ der Approximation ist durch die Summe der Fehlerquadrate abschätzbar und soll möglichst klein sein.

$$\Delta = (E(0) - f(0))^2 + (E(h) - f(h))^2 + \alpha_1(E(2h) - f(2h))^2 + \alpha_2(E(3h) - f(3h))^2 \quad (93)$$

Die Parameter α_1 und α_2 geben eine Wichtung an und können zunächst beliebig variiert werden, sollten jedoch im allgemeinen positiv sein. Die Variation dieser Parameter verändert den Einfluß der betreffenden Punkte im Fehler Δ . Das erhöht die Flexibilität bei sehr kleinen und sehr großen Krümmungen.

Die Bedingung, daß der Fehler Δ minimal sein soll, führt zu den Gleichungen

$$\frac{\partial \Delta}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial \Delta}{\partial c} = 0. \quad (94)$$

Dieses lineare Gleichungssystem kann man nach c auflösen und erhält

$$c = \frac{E(0)B_0 + E(h)B_1 + E(2h)B_2 + E(3h)B_3}{h^2(1 + 25\alpha_1 + 145\alpha_2 + 25\alpha_1\alpha_2)}, \quad (95)$$

wobei

$$\begin{aligned} B_0 &= -2 - 8\alpha_1 - 18\alpha_2, & B_1 &= 2 - 6\alpha_1 - 16\alpha_2, \\ B_2 &= 14\alpha_1 - 10\alpha_1\alpha_2, & B_3 &= 34\alpha_2 + 10\alpha_1\alpha_2. \end{aligned}$$

Bevor man diese Formel einsetzen kann, ist es notwendig, günstige Werte für h und die Wichtungsparameter α_1 und α_2 festzulegen. Dabei hilft die Annahme weiter, daß die Kurve nicht exakt der Funktion f entspricht, sondern auch höhere Ableitungen besitzen kann. Im einfachsten Fall kann man eine zusätzliche 4. Ableitung im Ursprung annehmen.

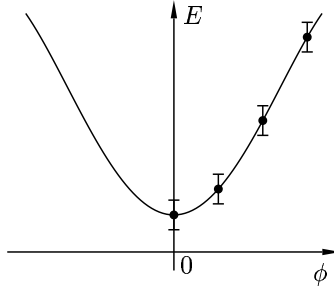


Abbildung 27: Ausgehend von wenigen Punkten einer Kurve soll die Krümmung an der Symmetrieachse $\phi = 0$ numerisch bestimmt werden.

$$E_s(\phi) = a_s + \frac{1}{2}c_s\phi^2 + \frac{1}{24}e_s\phi^4 \quad (96)$$

Allerdings würde die numerische Berechnung nicht exakt diese Werte für $E(\phi)$ liefern (selbst wenn die Kurve exakt mit diesem Polynom 4. Grades übereinstimmen würde), da man numerische Fehler berücksichtigen muß. Um dies zu beachten, kann man eine Gaußverteilung der Breite σ für die numerisch bestimmten $E(\phi)$ um $E_s(\phi)$ annehmen.

$$P(E, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{(E - E_s(\phi))^2}{\sigma^2} \right\} \quad (97)$$

Damit läßt sich die Wahrscheinlichkeit $P(c)$ ermitteln, mit der die Krümmung c bestimmt wird. Als Parameter gehen nur noch die Breite der Wahrscheinlichkeitsverteilung der vorgegebenen Punkte σ , die Größe der angesetzten 4. Ableitung e_c , der Punktabstand h sowie die verwendeten Wichtungen α_1 und α_2 ein.

$$P(c) = \int_{-\infty}^{\infty} dE_0 \int_{-\infty}^{\infty} dE_h \int_{-\infty}^{\infty} dE_{2h} \int_{-\infty}^{\infty} dE_{3h} P(E_0, 0) P(E_h, h) \\ \times P(E_{2h}, 2h) P(E_{3h}, 3h) \delta \left\{ c - \frac{E_0 B_0 + E_h B_1 + E_{2h} B_2 + E_{3h} B_3}{h^2(1 + 25\alpha_1 + 145\alpha_2 + 25\alpha_1\alpha_2)} \right\} \quad (98)$$

Durch Lösen der Integrale erhält man folgenden Ausdruck

$$P(c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_c} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{(c_s - c + \tau)^2}{\sigma_c^2} \right\} \quad (99)$$

mit

$$\sigma_c = \frac{\sqrt{B_0^2 + B_1^2 + B_2^2 + B_3^2}}{h^2(1 + 25\alpha_1 + 145\alpha_2 + 25\alpha_1\alpha_2)}, \\ \tau = \frac{1}{12} e_c h^2 \frac{1 + 109\alpha_1 + 325\alpha_1\alpha_2 + 1369\alpha_2}{1 + 25\alpha_1 + 25\alpha_1\alpha_2 + 145\alpha_2}.$$

Für die 2. Ableitung entsteht eine gaußförmige Wahrscheinlichkeitsverteilung der Breite σ_c , die um τ vom tatsächlichen Wert c_s verschoben ist. Die 2. Ableitung ist besonders gut bestimmbar, wenn die Größen σ_c und τ klein sind. Insbesondere kann man die Summe S aus den Quadraten von σ_c und τ betrachten.

$$S = \sigma_c^2 + \tau^2 \quad (100)$$

Man sollte α_1 und α_2 so wählen, daß S minimal ist. Damit entstehen die Gleichungen

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha_1} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial \alpha_2} = 0. \quad (101)$$

Die Lösungen für optimale α_1 und α_2 lauten

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{48\sigma^2 + 1007e_s^2h^8}{48\sigma^2 + 1909e_s^2h^8}, \\ \alpha_2 &= \frac{8\sigma^2 - 3e_s^2h^8}{8\sigma^2 + 79e_s^2h^8}. \end{aligned} \quad (102)$$

Man beachte, daß bei sehr großen 4. Ableitungen kleine negative Werte für α_2 auftreten können. Das ist in genau diesem Fall auch sinnvoll.

Setzt man diese Lösungen für α_1 und α_2 in σ_c , τ und S ein, erhält man eine Abschätzung für die tyischen Fehler. Als einziger freier Parameter tritt dann nur noch h auf. Man kann also noch das Minimum von $S(h)$ suchen und erhält

$$h = 2^{1/4}799477^{-1/8}(177337 - 451\sqrt{99145})^{1/8} \left(\frac{\sigma}{e_s}\right)^{1/4} \approx 0,805 \left(\frac{\sigma}{e_s}\right)^{1/4}. \quad (103)$$

Es war allerdings gefordert, daß h zu Beginn festgelegt werden muß. Man kann die letzte Formel also nur zur Abschätzung der Größe von h verwenden.

Außerdem wird e_s für die Berechnung der Wichtungparameter (wie auch σ , das jedoch bekannt sei) benötigt. Für die Abschätzung von e_s kann man ein gerades Polynom 4. Grades verwenden.

$$f_4(\phi) = a_4 + \frac{1}{2}c_4\phi^2 + \frac{1}{24}e_4\phi^4 \quad (104)$$

Man bestimmt analog zu oben die Summe der Fehlerquadrate Δ_4 , wobei jedoch keine Wichtung eingeführt wird.

$$\Delta_4 = (E(0) - f_4(0))^2 + (E(h) - f_4(h))^2 + (E(2h) - f_4(2h))^2 + (E(3h) - f_4(3h))^2 \quad (105)$$

Die Minimierung von Δ_4 führt zu dem Gleichungssystem

$$\frac{\partial \Delta_4}{\partial a_4} = 0, \quad \frac{\partial \Delta_4}{\partial c_4} = 0, \quad \frac{\partial \Delta_4}{\partial e_4} = 0. \quad (106)$$

Die Lösung e_4 wird als Näherung für e_s verwendet:

$$e_s \approx e_4 = \frac{1}{181h^4}(96E(3h) - 214E(2h) - 8E(h) + 126E(0)). \quad (107)$$

Nun kann man das Verfahren zusammensetzen. Es besteht aus folgenden Schritten:

- Berechnung von vier Punkten der Kurve $E(0)$, $E(h)$, $E(2h)$ und $E(3h)$
- näherungsweise Bestimmung der 4. Ableitung nach (Formel 107)

- Berechnung der günstigsten Wichtungparameter α_1 und α_2 gemäß (102)
- Bestimmung der 2. Ableitung mittels Formel (95)

Vor dem Einsatz sollte der Einfluß der Parameter h und σ an möglichst realitätsnahen Kurvenbeispielen, für die das Verfahren angewendet werden soll, getestet werden. Insbesondere ist sicherzustellen, daß eine Variation von h um den später eingesetzten Wert, keine erhebliche Auswirkung auf die ermittelten Krümmungen hat.

Literatur

- [1] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Kapitel 8: *Electron Levels in a Periodic Potential* (Saunders College, Fort Worth, 1976).
- [2] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [3] N. F. Mott, Phil. Mag. **19**, 835 (1969).
- [4] N. F. Mott, E. A. Davis, *Electronic processes in non-crystalline materials*, Abschnitt 6.4.3: *Temperature dependence of the d.c. conductivity* (Clarendon Press, Oxford, 1979).
- [5] J. T. Edwards, D. J. Thouless, J. Phys. C **5**, 807 (1972).
- [6] D. J. Thouless, Phys. Rep. **13**, 93 (1974).
- [7] R. Kubo, Can. Journ. Phys. **34**, 1274 (1956).
- [8] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum Press, New York, 1990).
- [9] E. Akkermans, G. Montambaux, Phys. Rev. Lett. **68**, 642 (1992).
- [10] A. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [11] P. A. Lee, T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).
- [12] N. F. Mott, Phil. Mag. **17**, 1259 (1968).
- [13] B. Kramer, A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).
- [14] C. W. Beenakker, Rev. Mod. Phys. **69**, 731 (1997).
- [15] M. L. Mehta, *Random matrices* (Academic Press, Boston, 1991).
- [16] B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides, H. B. Shore, Phys. Rev. B **47**, 11487 (1993).
- [17] D. Braun, G. Montambaux, M. Pascaud, Phys. Rev. Lett. **81**, 1062 (1998).
- [18] J. Zakrzewski, D. Delande, Phys. Rev. E **47**, 1650 (1993).
- [19] C. M. Canali, C. Basu, W. Stephan, V. E. Kravtsov, Phys. Rev. B **54**, 1431 (1996).
- [20] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963).
- [21] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London **A 276**, 238 (1963).
- [22] T. Giamarchi, H. J. Schulz, Phys. Rev. B **37**, 325 (1988).
- [23] L. P. Levy, G. Dolan, J. Dunsmuir, H. Bouchiat, Phys. Rev. Lett. **64**, 2074 (1990).
- [24] V. Chandrasekhar, R. A. Webb, M. J. Brady, M. B. Ketchen, W. J. Galager, A. Kleinsasser, Phys. Rev. Lett. **67**, 3578 (1991).

- [25] U. Eckern, P. Schwab, *Adv. Phys.* **44**, 387 (1995).
- [26] *Correlated Fermions and Transport in Mesoscopic Systems*, edited by T. Martin, G. Montambaux, J. Trân Thanh Vân (Editions Frontières, Gif-sur-Yvette, 1996).
- [27] D. L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2067 (1994).
- [28] O. N. Dorokhov, *Sov. Phys. JETP* **71**, 360 (1990).
- [29] Y. Imry, *Europhys. Lett.* **30**, 405 (1995).
- [30] K. Frahm, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard, D. Weinmann, *Europhys. Lett.* **31**, 169 (1995).
- [31] D. Weinmann, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard, K. Frahm, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1598 (1995).
- [32] F. von Oppen, T. Wettig, J. Müller, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 491 (1996).
- [33] D. Weinmann, J.-L. Pichard, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1556 (1996).
- [34] S. N. Evangelou, S.-J. Xiong, E. N. Economou, *Phys. Rev. B* **54**, 8469 (1996).
- [35] R. A. Römer, M. Schreiber, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 515 (1997).
- [36] K. Frahm, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard, D. Weinmann, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4889 (1997).
- [37] R. A. Römer, M. Schreiber, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 4890 (1997).
- [38] O. Halfpap, Diplomarbeit, Universität Hamburg (1996).
- [39] O. Halfpap, A. MacKinnon, B. Kramer, *Solid State Commun.* **107**, 379 (1998).
- [40] E. Akkermans, J.-L. Pichard, *Eur. Phys. J. B* **1**, 223 (1998).
- [41] A. Wobst, D. Weinmann, TIP IV, cond-mat/9806138, erscheint in *Eur. Phys. J. B*.
- [42] X. Waintal, J.-L. Pichard, TIP I, cond-mat/9706258, erscheint in *Eur. Phys. J. B*.
- [43] X. Waintal, D. Weinmann, J.-L. Pichard, TIP II, cond-mat/9801134, erscheint in *Eur. Phys. J. B*.
- [44] S. De Toro Arias, X. Waintal, J.-L. Pichard, TIP III, cond-mat/9806258, eingereicht bei *Eur. Phys. J. B*.
- [45] D. Brinkmann, J. E. Golub, S. W. Koch, P. Thomas, K. Maschke, I. Varga, Vorabdruck (1998).
- [46] D. Weinmann, J.-L. Pichard, Y. Imry, *J. Phys. I (France)* **7**, 1559 (1997).
- [47] S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, M. D'Iorio, *Phys. Rev. B* **50**, 8039 (1994).

-
- [48] S. V. Kravchenko, W. E. Mason, G. E. Bowker, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, M. D'Iorio, Phys. Rev. B **51**, 7038 (1995).
- [49] S. V. Kravchenko, D. Simonian, M. P. Sarachik, W. Mason, J. E. Furneaux, Phys. Rev. Lett. **77**, 4938 (1996).
- [50] D. Popović, A. B. Fowler, S. Washburn, Phys. Rev. Lett. **79**, 1543 (1997).
- [51] D. Popović, S. Washburn, Phys. Rev. B **56**, R10048 (1997).
- [52] Y. Hanein, U. Meirav, D. Shahar, C. C. Li, D. C. Tsui, H. Shtrikman, Phys. Rev. Lett. **80**, 1288 (1998).
- [53] M. Y. Simmons, A. R. Hamilton, M. Pepper, E. H. Linfield, P. D. Rose, D. A. Ritchie, A. K. Savchenko, T. G. Griffiths, Phys. Rev. Lett. **80**, 1292 (1998).
- [54] M. Ortuño, E. Cuevas, cond-mat/9808104.
- [55] P. Jacquod, D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **75**, 3501 (1995).
- [56] F. von Oppen, T. Wettig, Europhys. Lett. **32**, 741 (1995).
- [57] K. Życzkowski, L. Molinari, F. M. Izrailev, J. Phys. I (France) **4**, 1469 (1994).
- [58] M. Titov, D. Braun, Y. V. Fyodorov, J. Phys. A **30**, L339 (1997).
- [59] D. Braun, G. Montambaux, Phys. Rev. B **50**, 7776 (1994).
- [60] Y. V. Fyodorov, H.-J. Sommers, Phys. Rev. E **51**, R2719 (1995)
- [61] F. von Oppen, Phys. Rev. E **51**, 2647 (1995).
- [62] D. Braun, E. Hofstetter, A. MacKinnon, G. Montambaux, Phys. Rev. B **55**, 7557 (1997).
- [63] J. K. Cullum, R. A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations Vol. I & II* (Birkhäuser, Boston, 1985).
- [64] I. V. Ponomarev, P. G. Silvestrov, Phys. Rev. B **56**, 3742 (1997).
- [65] P. Schmitteckert, R. A. Jalabert, D. Weinmann, J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **81**, 2308 (1998).
- [66] T. Vojta, F. Epperlein, M. Schreiber, cond-mat/9806194 (1998).



Danksagung

Ich möchte die Gelegenheit nutzen, mich bei allen ganz herzlich zu bedanken, die mich während meines Studiums und bei der Anfertigung meiner Diplomarbeit begleitet haben und mir hilfreich zur Seite standen.

An zweifellos erster Stelle stehen dabei meine Eltern und mein Bruder, die mich stets in allen Belangen unterstützt haben und mir gleichzeitig aber ein sehr eigenständiges Studienleben ermöglichten.

Ganz herzlich bedanken möchte ich mich bei Herrn Prof. Ingold, der das Thema dieser Arbeit gestellt hat und die Betreuung übernahm. Seine überaus freundliche, nette und offene Art hat eine ausgesprochen zwanglose Zusammenarbeit zur Folge gehabt, bei der ich mich sehr wohlgeföhlt habe.

Herrn Prof. Hänggi danke ich für die Aufnahme in seinen Lehrstuhl während meiner Diplomarbeit. Das freundschaftliche Klima zwischen den Mitarbeitern und Diplomanden, das ich dort erlebt habe, war eine außerordentlich wohltuende Erfahrung.

Bei Herrn Prof. Kampf möchte ich mich dafür bedanken, daß er die Erstellung des Zweitgutachtens übernommen hat.

Ein besonderer Dank geböhrt Dr. Dietmar Weinmann, der durch seine engagierte, lehrreiche und in jeglicher Hinsicht beispielhafte Betreuung ganz entscheidend dazu beigetragen hat, daß ich sehr viel Freude bei der Beschäftigung mit meiner Diplomarbeit hatte. Vor allem seine Motivation zur selbständigen Arbeit und gleichzeitig aber die ständige Bereitschaft, mich bei Problemen in den zahlreichen Diskussionen nach allen Kräften zu unterstützen, empfand ich als überaus angenehm.

Eine besondere Erwähnung verdienen auch die Herren Sigmund Kohler und Ralf Utermann, denen ich viele Tips im Umgang mit den Unix-Rechnern verdanke. Auch erinnere ich mich gern an so manchen gemeinsamen Skatabend (an manchen aber auch weniger gern ...).

Außerdem danke ich dem Rechenzentrum der Universität Augsburg und vor allem Herrn Markus Zahn, der mir als einem der ersten Nutzer den Zugang zu dem vor noch nicht einmal einem Jahr angeschafften Parallelrechner IBM SP ermöglichte und mir bei Problemen immer mit Rat und Tat zur Seite stand.

Schließlich danke ich dem Leibnitz-Rechenzentrum in München, auf dessen Parallelrechner IBM SP2 ich einen wesentlichen Teil der Berechnungen ausgeführt habe.



Erklärung

Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbständig und unter ausschließlicher Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel verfaßt zu haben.

.....

Augsburg, 4. August 2003