
Chaos im Festkörper: Phasenraum- & Zufallsmatrixmethoden

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
der Mathematisch–Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Augsburg vorgelegt

von

André Wobst



Augsburg, 4. Juni 2003

Erstberichterstatter: Prof. Dr. Gert-Ludwig Ingold
Zweitberichterstatter: Privatdozent Dr. Karl-Heinz Höck
Tag der mündlichen Prüfung: 9. 7. 2003

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Einteilchenmodelle ungeordneter Systeme	5
2.1	Das Anderson-Modell	5
2.1.1	Einführung des Modells	5
2.1.2	Ein-Parameter-Skalentheorie	7
2.1.3	Diffusiver Bereich und Niveaustatistik	10
2.2	Das Aubry-André-Modell	12
2.2.1	Unterschiede gegenüber dem Anderson-Modell	12
2.2.2	Ein verwandtes Modell: Das Harper-Modell	15
2.2.3	Dualitätstransformation	15
2.2.4	Lokalisierungsübergang	17
2.2.5	Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen	18
3	Phasenraummethoden	21
3.1	Phasenraumverteilungen	21
3.1.1	Wigner-Funktion	22
3.1.2	Husimi-Funktion	25
3.2	Lokalisierungsmaße	28
3.2.1	Inverse Besetzungszahl im Phasenraum	29
3.2.2	Inverse Besetzungszahl im Orts- und Impulsraum	30
4	Phasenraumanalyse ungeordneter Systeme	33
4.1	Visualisierung des Phasenraumverhaltens	33
4.2	Inverse Besetzungszahl im Phasenraum	37
4.3	Inverse Besetzungszahl im Orts- und Impulsraum	39
4.4	Verknüpfung zwischen den verschiedenen Besetzungsmaßen	42
4.4.1	Zwei-Zustands-Modell	42
4.4.2	Mittleres Verhalten der Besetzungsmaße	48
4.4.3	Spezielle Zustände	51
4.5	Anderson-Modell in zwei und drei Dimensionen	53
4.6	Skalierungsverhalten	61
4.7	Zwei wechselwirkende Teilchen	67

5	Zufallsmatrixmodell für wechselwirkende Vielteilchensysteme	73
5.1	Zufallsmatrizen	74
5.2	Zweiteilchenwechselwirkung	76
5.2.1	Mittelwerte	77
5.2.2	Fluktuationen in orthogonalen Zweiteilchenensembles	77
5.2.3	Fluktuationen in unitären Zweiteilchenensembles	79
6	Statistik der Coulomb-Blockade in Quantenpunkten	81
6.1	Coulomb-Blockade in Quantenpunkten	82
6.2	Abstandsstatistik der Leitfähigkeitsspitzen	84
6.3	Leitfähigkeitsstatistik der Leitfähigkeitsspitzen	87
7	Zusammenfassung	95

1 Einleitung

Die Festkörperphysik bildet seit vielen Jahrzehnten einen Schwerpunkt physikalischer Untersuchungen in experimenteller wie auch theoretischer Hinsicht. Der rasante technologische Fortschritt der letzten Jahrzehnte ist in erheblichem Maße ein Resultat dieser Bemühungen. In zahlreichen aktuellen Experimenten zeichnen sich immer wieder Meilensteine für die zukünftige Entwicklung ab. Dabei ist ein theoretisches Verständnis, das beispielsweise zur Extraktion wesentlicher physikalischer Befunde und ihrer systematischen Erfassung beiträgt oder die Vorhersage von Parameterabhängigkeiten und nutzbaren Effekten erlaubt, in der Regel unabdingbar. In diesem Zusammenhang ist die Entwicklung und Anwendung möglichst einfacher Modelle und geeigneter Methoden, anhand derer die physikalisch wesentlichen Punkte herausgearbeitet werden können, entscheidend. In dieser numerisch orientierten Arbeit werden dazu Phasenraum- und Zufallsmatrixmethoden herangezogen.

Eine prinzipiell und insbesondere auch für viele Anwendungen sehr bedeutende Eigenschaft von Festkörpern ist die elektrische Leitfähigkeit. Von besonderem Interesse sind dabei sogenannte Metall-Isolator-Übergänge, bei denen die elektrische Leitfähigkeit als Funktion intrinsischer oder äußerer Parameter im Sinne eines Phasenübergangs zwischen metallischem und isolierendem Verhalten wechselt.

Eine Möglichkeit, dass trotz der Existenz nicht atomar gebundener Elektronen isolierendes Verhalten im Festkörper auftritt, wird im Rahmen des Anderson-Modells diskutiert [1]. Dazu wird Unordnung im System als Ursache einer Lokalisierung der Ladungsträger betrachtet und gleichzeitig die Wechselwirkung zwischen den Elektronen ignoriert. Diese Beschreibung ist in vielen Fällen äußerst erfolgreich [2]. Gerade in jüngster Zeit hat dieses Problem aber wieder erheblich an Interesse gewonnen [3], da neue experimentelle Befunde prinzipielle Abweichungen von den Vorhersagen des Anderson-Modells aufzeigen, beispielsweise metallisches Verhalten in zwei Dimensionen [4]. Das bedeutet, dass die Vereinfachungen, die in dem Modell vorgenommen wurden, bisweilen zu rigoros sind. Ein wahrscheinlicher Grund ist die Vernachlässigung der Wechselwirkung der Ladungsträger untereinander, deren Einbeziehung die theoretische Behandlung allerdings erheblich erschwert. Hier stellt sich natürlich auch die Frage nach methodisch neuen Herangehensweisen.

In dieser Arbeit soll der insbesondere bei chaotischen Problemen in der klassischen Mechanik und Semiklassik häufig eingesetzte Phasenraum auf Metall-Isolator-Übergänge und diffusiven Transport in ungeordneten Systemen übertragen werden [5, 6, 7]. Anhand numerischer Untersuchungen lassen sich dabei neue Einblicke in die Mechanismen von Lokalisierung beziehungsweise Delokalisierung in ungeordneten

1 Einleitung

Systemen gewinnen, die bereits ohne Berücksichtigung einer Wechselwirkung zwischen den Teilchen diskutiert werden können [8, 9, 10, 11, 12, 13]. In einer Dimension ist der dann zweidimensionale Phasenraum graphisch darstellbar. Neben dem Anderson-Modell wird hierbei auch das Aubry-André-Modell [14, 15] herangezogen, in dem bereits in einer Dimension ein Phasenübergang stattfindet [16]. Dagegen ruft im Anderson-Modell in einer und in zwei Dimensionen bereits eine beliebig kleine Unordnung eine Lokalisierung aller Zustände bei hinreichender Systemgröße hervor. Erst ab drei Dimensionen entsteht einen Bereich mit metallischer Leitfähigkeit [17, 18, 19].

Trotz der bei einer Phasenraumanalyse im Vergleich zum ursprünglichen Problem verdoppelten Dimensionalität ist es gleichzeitig eine Stärke des Phasenraums, dass darin Orts- und Impulsinformationen gleichzeitig erfasst werden. Insbesondere ist diese Beschreibung geeignet, um sowohl lokalisierte Zustände im Impulsraum, wie sie bei der Bewegung freier Teilchen auftreten, als auch Lokalisierung im Ortsraum bei starker Unordnung zu erfassen. Aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation können die konjugierten Variablen Ort und Impuls jedoch nicht gleichzeitig scharf bestimmt sein. Es stellt sich nun heraus, dass diese quantenmechanische Eigenschaft zu einer physikalisch sehr interessanten Sichtweise bezüglich des Auftretens von Metall-Isolator-Übergängen führt, die sich im Phasenraum deutlich offenbart. In der Orts- und Impulsdarstellung der Zustände, bei denen die jeweils konjugierte Koordinate nur indirekt enthalten ist, ist die gleichzeitige Berücksichtigung von Orts- und Impulsinformation hingegen nicht direkt gegeben.

In der darauffolgenden Anwendung der Phasenraummethoden auf wechselwirkende Probleme werden die numerischen Untersuchungen allerdings durch die zur Verfügung stehende Rechenleistung eingeschränkt, so dass nur kleine Systemgrößen und Teilchenzahlen betrachtet werden können. Die Analyse wird dabei Grenzen in der physikalischen Relevanz von Delokalisierungseffekten [3] aufzeigen, die im Rahmen solcher Modelle auftreten.

Überaus interessante Perspektiven für numerische Untersuchungen wechselwirkender Probleme ergeben sich aber im Rahmen von Zufallsmatrixmodellen [20]. In diesem Zugang sind nämlich zahlreiche Eigenschaften von Energiespektren und Wellenfunktionen bereits für sehr kleine Systemgrößen universell. Dabei werden die physikalischen Details der Probleme abgesehen von gewissen Symmetrieeigenschaften komplett vernachlässigt. Um nun den Einfluss einer Wechselwirkung zwischen Teilchen zu studieren, wird ein Einteilchen-Zufallsmatrixmodell um eine geeignete Wechselwirkung ergänzt [21, 22]. Damit ergibt sich ein gut handhabbares Modell, das im Rahmen dieser Arbeit für statistische Analysen von Leitfähigkeitsspitzen der Coulomb-Blockade in Quantenpunkten eingesetzt wird [23, 24, 25]. Neben einer schlüssigen Erklärung [21, 22, 26] verschiedener experimenteller Ergebnisse [27, 28, 29, 30] zeigen sich dabei zahlreiche Perspektiven für zukünftige Untersuchungen.

Im folgenden Kapitel werden zunächst Einteilchenmodelle ungeordneter Systeme eingeführt. Danach wird die Methode des Phasenraums im Rahmen der Quanten-

mechanik erläutert und geeignete Untersuchungsmethoden für ungeordnete Systeme vorgeschlagen. Das Potential dieser Herangehensweise wird im vierten Kapitel zunächst anhand von Einteilchenmodellen studiert. Anschließend wird auch der Fall zweier wechselwirkender Teilchen diskutiert. Im fünften Kapitel wird schließlich ein Zufallsmatrixmodell mit Wechselwirkung besprochen, das im sechsten Kapitel zur statistischen Untersuchung von Leitfähigkeitsspitzen der Coulomb-Blockade in Quantenpunkten verwendet wird.

2 Einteilchenmodelle ungeordneter Systeme

In diesem Kapitel werden ausgewählte Einteilchenmodelle für die Beschreibung quantenmechanischer Teilchen in ungeordneten oder quasi-ungeordneten Systemen eingeführt. Unter Berücksichtigung der Statistik der Teilchen ist damit auch der Fall vieler, jedoch untereinander nicht wechselwirkender Teilchen enthalten. Die nachfolgend verwandte Schreibweise der zweiten Quantisierung erlaubt diese Mehrteilcheninterpretation explizit.

2.1 Das Anderson-Modell

2.1.1 Einführung des Modells

Im Jahre 1958 diskutierte Anderson ein Modell für ungeordnete quantenmechanische Systeme [1]. Eine etwas modifizierte Version des in dieser Arbeit vorgestellten Modells hat sich in den darauf folgenden Jahrzehnten als ein überaus fundamentales Modell der theoretischen Festkörperphysik herausgestellt[2] und wird seither in der Literatur als Anderson-Modell bezeichnet¹. Die Idee des Modells ist, ein ungeordnetes System mittels eines Zufallspotentials zu beschreiben. Zusammen mit der kinetischen Energie entsteht nun ein interessantes und grundlegendes Modell. Im Folgenden sollen die einzelnen Bestandteile dieses Modells kurz besprochen werden.

Die kinetische Energie auf einem Gitter wird in Ortsdarstellung durch so genannte Hüpfprozesse beschrieben. Die Hüpfsterme entstehen bei der Diskretisierung der kinetischen Energie auf einem Gitter mit der Gitterlänge a mittels Differenzenquotienten. Nach einer geeigneten Verschiebung der Energieskala bleiben dabei nur Kopplungen benachbarter Gitterplätze übrig und man erhält für die kinetische Energie:

$$T = -t \sum_{\langle m,n \rangle} c_m^\dagger c_n \quad (2.1)$$

Die c_n^\dagger und c_n sind Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren auf einem Gitterplatz n . Die Anzahl der Gitterplätze mag zunächst endlich oder auch unendlich sein. Die Schreibweise $\langle m,n \rangle$ kennzeichnet die Summation über benachbarte

¹Es sei angemerkt, dass es aus einer anderen Arbeit Andersons [31] ein zweites Modell gibt, das in der Literatur ebenso als Anderson-Modell bezeichnet wird. Dort wird die Lokalisierung magnetischer Zustände an einer einzelnen Störstelle diskutiert.

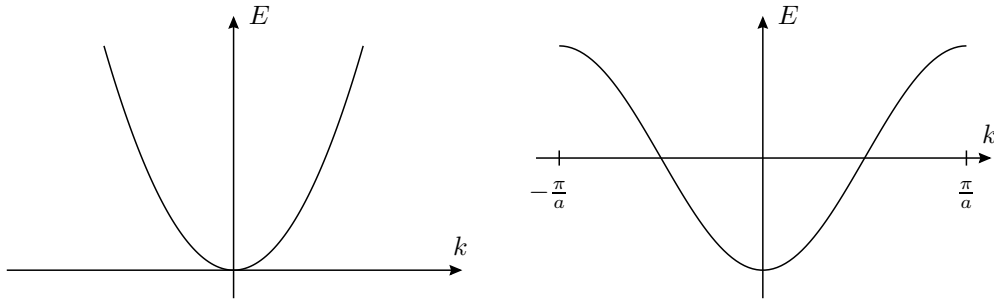


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Dispersionsrelation eines freien Teilchens in einer Dimension im Kontinuum (links) und auf einem Gitter (rechts).

Gitterplätze, wodurch in dieser Summe mehrere Raumrichtungen mit berücksichtigt werden. Schließlich ist die Wahl des Vorfaktors t nur ein Skalierungsfaktor für die Energieskala. Es ist üblich $t = 1$ anzusetzen. Dabei sollte beachtet werden, dass eine Änderung der Größe des betrachteten Gitters keine Verbesserung der Auflösung des diskreten Modells bedeutet, sondern direkt die Systemgröße ändert, denn die Gitterlänge a wurde bei diesem Schritt in der Energieskala absorbiert.

In Abbildung 2.1 ist die Dispersionsrelation eines freien Teilchens in einer Dimension im Kontinuum und auf einem Gitter schematisch gegenübergestellt. In beiden Fällen sind die Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung ebene Wellen der Form $\psi(x) \sim \exp(ikx)$, wobei k die Wellenzahl angibt. Erwartungsgemäß ist die Übereinstimmung zwischen kontinuierlichem und diskretem Modell sehr gut für kleine Energien, das heißt also auch für kleine Impulse p und somit kleine Wellenzahlen k . Diese sehr gute Übereinstimmung sieht natürlich ab von der explizit erzeugten Verschiebung der Energieskala bei der Diskretisierung.

Völlig anders sieht die Situation freilich für hohe Energien aus. Im Kontinuum kann der Impuls p , die Wellenzahl k und somit auch die Energie beliebig hohe Werte annehmen. In einem diskreten Modell ist die Wellenzahl hingegen betragsmäßig durch π/a beschränkt, da höhere Oszillationen auf einem Gitter nicht aufgelöst werden können². Die Einschränkung in der Energie ergibt sich auch direkt aufgrund der Endlichkeit des Hilbert-Raumes auf einem ebenso endlichen Gitter. Die Dispersionsrelation wird dabei kosinus-förmig. Das somit entstandene Energie-„band“ ist aber ein durchaus erwünschter Effekt bei der Modellierung eines Festkörpers, da dort aufgrund der Gitterperiodizität ebenfalls Energiebänder auftreten.

Eine weitere Auswirkung bei endlicher Systemgröße ist in Abbildung 2.1 gar nicht dargestellt, nämlich die Wellenzahlquantisierung aufgrund von Randbedingungen. Das ist beispielsweise für periodische Randbedingungen der Fall, bei denen die Systemgröße L in der entsprechenden Raumdimension ein Vielfaches i der Periode

²Die Beschränkung der Wellenzahl erfolgt analog zum so genannten „sampling theorem“ [32], bei welchem jedoch Effekte durch endliche Zeitauflösung betrachtet werden.

der ebenen Wellen $2\pi/k$ sein muss, so dass gilt:

$$k_i = \frac{2\pi}{L}i \quad (2.2)$$

Neben der Ganzzahligkeit von i kann hier beispielsweise $-L/2 < i \leq L/2$ gefordert werden. Man muss sich für den Wellenzahlindex i auf ein Intervall der Länge L beschränken, denn ein Hinzufügen von Vielfachen von 2π zur Wellenzahl ändert die ebenen Wellen bezüglich des Gitters nicht. Zur Verdeutlichung der Diskretisierung der Wellenzahl k wurde der Index i explizit mitgeschrieben.

Die kinetische Energie auf einem Gitter allein ist natürlich wenig spektakulär und ebenso wenig spezifisch für das Anderson-Modell. Bei diesem geht es vielmehr darum, den Einfluss von Unordnung auf ein quantenmechanisches Problem zu studieren. Diese Unordnung wird im Anderson-Modell durch ein Zufallspotential v_n auf den einzelnen Gitterplätzen n modelliert:

$$V = W \sum_n v_n c_n^\dagger c_n \quad (2.3)$$

Die Zufallszahlen v_n werden im Anderson-Modell untereinander unkorreliert gewählt. Des weiteren ist es üblich, für die Zufallszahlen v_n eine Kastenverteilung über das Intervall $[-1/2; 1/2]$ zu verwenden, so dass jede Zahl in diesem Intervall mit der selben Wahrscheinlichkeit auftritt. Die Wahl dieser besonderen Verteilung ist lediglich Konvention – das Modell verhält sich für andere unkorrelierte kontinuierliche Zufallsverteilungen ganz ähnlich. Der Vorfaktor W gibt die Unordnungsstärke an.

Der Hamilton-Operator des Anderson-Modells lautet somit:

$$H = T + V = -t \sum_{\langle m,n \rangle} c_m^\dagger c_n + W \sum_n v_n c_n^\dagger c_n \quad (2.4)$$

Dieses Modell soll später im Kontext dieser Arbeit eingesetzt werden. Zuerst ist nun aber ein guter Zeitpunkt, einige historische und in Zusammenhang mit dieser Arbeit besonders bedeutende Erkenntnisse über das Anderson-Modell genauer zu diskutieren.

2.1.2 Ein-Parameter-Skalentheorie

Zunächst war Anderson in der schon zitierten Arbeit [1] auf der Suche nach einem Modell, dass zu Lokalisierung der Energieeigenfunktionen im Ortsraum führt. Diese so genannte Anderson-Lokalisierung, an einem Beispiel dargestellt in Abbildung 2.2, wird charakterisiert durch einen exponentiellen Abfall der Wellenfunktion auf der Skala der dazu eingeführten Lokalisierungslänge ξ . Neben dem Unordnungsterm (2.3) betrachtete Anderson dabei einen Hüpfterm auf dem eindimensionalen Gitter, der jedoch nicht nur nächste Nachbarn koppelt, sondern mit

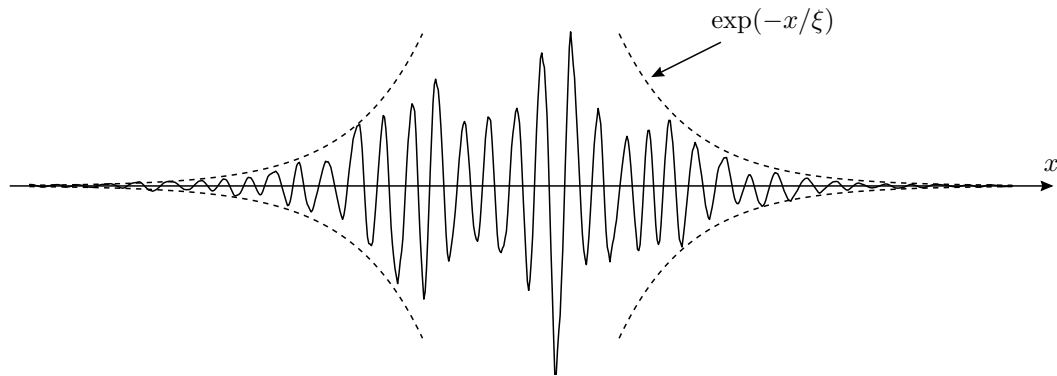


Abbildung 2.2: Darstellung der Lokalisierung einer Wellenfunktion im Ortsraum. Die Größe ξ gibt die Lokalisierungslänge an. Sie ist durch den exponentiellen Abfall der Wellenfunktion bestimmt.

dem Abstand der Gitterplätze $|r|$ mit mindestens $|r|^{-3}$ abfallen sollte. Anderson konnte nun zeigen, dass im Fall kleiner Hüpfamplitude im Verhältnis zur Unordnungsstärke Lokalisierung ähnlich Abbildung 2.2 auftritt. Mott und Twose haben etwas später bewiesen [33], dass diese Lokalisierung ein generelles Phänomen im Anderson-Modell (2.4) in einer Dimension ist. Das ist nur an die Bedingung geknüpft, dass die Unordnungsstärke ungleich Null ist und die Systemgröße groß genug gewählt wird. Dieses Verhalten war zunächst so nicht erwartet worden, denn es bedeutet ja, dass ein beliebig kleines Unordnungspotential auch für energetisch sehr viel höher liegende Zustände (bezüglich der Unordnung) bereits zur Lokalisierung in einer Dimension führt. Ursache bildet die Überlagerung der Rückstreuungseffekte vieler kleiner Potentialwälle.

Nachdem nunmehr eine theoretische Modellierung für das Auftreten lokalisierter Zustände in ungeordneten Festkörpern vorhanden war, stellte sich sehr schnell die Frage, unter welchen Bedingungen genau solch eine Lokalisierung überhaupt stattfindet. Das ist auch von experimentellem Interesse, da die Lokalisierung der Quantenzustände zur Unterdrückung des Leitwerts bei vernachlässigbarer thermischer Anregung führt. In der schon zitierten Arbeit [33] konnte beispielsweise nur der eindimensionale Fall behandelt werden, was die Autoren selbst als unbefriedigend einstufen. Erst erheblich später erzielten Abrahams und andere [17] eine für beliebige Dimensionen gültige Analyse im Rahmen einer Ein-Parameter-Skalentheorie. Es stellte sich heraus, dass die logarithmische Ableitung

$$\beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (2.5)$$

eine Funktion nur eines Parameters, nämlich des Leitwerts g ist. Die Autoren konnten zeigen, dass diese Funktion $\beta(g)$ qualitativ das in Abbildung 2.3 gezeigte Verhalten aufweist. Gleichzeitig gibt diese Skalenfunktion gemäß ihrer Definition an, wie sich der Leitwert g bei Veränderung der Systemgröße L verhält. Das Vorzei-

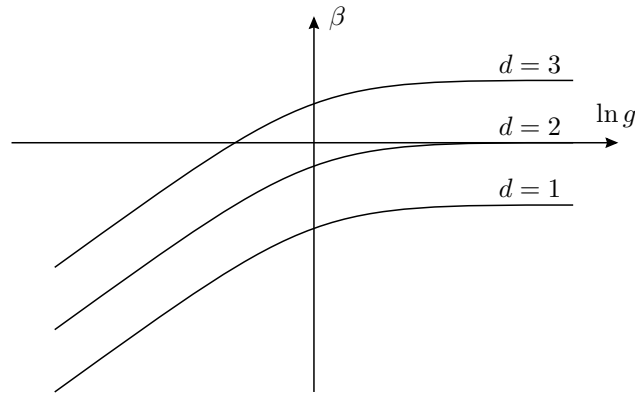


Abbildung 2.3: Qualitatives Verhalten der Skalenfunktion $\beta(g)$ in unterschiedlichen Dimensionen d gemäß der Ein-Parameter-Skalentheorie [17].

chen der Skalenfunktion $\beta(g)$ bestimmt, wie sich der Leitwert beim Übergang zu makroskopischen Proben fortsetzt. Während der Leitwert für negative $\beta(g)$ mit zunehmender Systemgröße L immer weiter abnimmt, steigt er im Fall positiver Werte für $\beta(g)$ mit der Systemgröße an. Das Vorzeichen von $\beta(g)$ legt demnach fest, ob makroskopisch metallisches oder isolierendes Verhalten vorliegt.

Neben der bloßen Existenz der Skalenfunktion $\beta(g)$ ist es natürlich auch entscheidend, das qualitative Verhalten insbesondere hinsichtlich des Vorfaktors zu ermitteln. Aufgrund der großen Bedeutung insbesondere auch im Rahmen dieser Arbeit soll eine anschauliche Erklärung für das Verhalten der Skalenfunktion im Folgenden kurz vorgeführt werden. Eine zusammenfassende Übersicht mit rigoroseren Darstellungen ist beispielsweise in [18] enthalten.

Der Grenzfall großer Leitfähigkeit ist durch einen ohmschen Leiter gegeben. Im eindimensionalen Fall ist der Leitwert dann umgekehrt proportional zur Systemgröße L . Für $d = 2$ ist der Leitwert einer Probe hingegen konstant, weil neben der Länge auch die Breite variiert wird. In drei Dimensionen ergibt sich sogar eine Proportionalität des Leitwerts mit der Systemgröße, da die Fläche hier quadratisch mit der Systemgröße steigt, die Länge jedoch nach wie vor linear. Also ergibt sich im Grenzfall metallischer Leitfähigkeit

$$g(L) \sim L^{d-2}. \quad (2.6)$$

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

$$\beta(g) = d - 2. \quad (2.7)$$

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

$$g(L) \sim \exp(-L/\xi) \quad (2.8)$$

und somit

$$\beta(g) = \ln g + \text{const.} \quad (2.9)$$

Unter der Annahme, dass die Skalenfunktion stetig und monoton ist [18], ergibt sich allein im dreidimensionalen Fall (sowie für höhere Dimensionen) für große Leitfähigkeiten ein positiver Wert für die Skalenfunktion $\beta(g)$. Das heißt insbesondere, dass in einer und zwei Dimensionen bei beliebig geringer aber endlicher Unordnung stets lokalisierte Zustände vorliegen, sofern nur das betrachtete System genügend groß gewählt wird. In drei Dimensionen existiert hingegen eine kritische Leitfähigkeit. Unterhalb dieser Schwelle tritt Lokalisierung der Zustände für hinreichend große Systeme auf, während oberhalb der Schwelle die Zustände auch für beliebig große Systeme räumlich delokalisiert bleiben. Diese kritische Leitfähigkeit definiert damit einen Phasenübergang des Systems.

Im Anderson-Modell findet man diesen Phasenübergang als Funktion der Unordnungsstärke W wieder. Für Zustände in der Bandmitte wurde die kritische Unordnungsstärke numerisch erstmals von MacKinnon und Kramer [19] bestimmt. Dieser so genannte Anderson-Metall-Isolator-Übergang tritt bei einer Unordnungsstärke von $W_c \approx 16.5$ auf. Für Zustände an den Rändern des Bandes tritt die Lokalisierung schon bei geringerer Unordnungsstärke auf, denn in Richtung zu den Bandrändern hin werden die Zustände zunehmend aus Ortsraum-Eigenfunktionen zusammengesetzt, die entsprechend tief in nicht zu weit entfernten Potentialmulden liegen. In dem Zusammenhang kann somit auch ein Metall-Isolator-Übergang beobachtet werden, der nicht durch Variation der Unordnungsstärke entsteht, sondern durch Verschieben der Fermikante im Spektrum. Dies ist experimentell sehr viel einfacher beobachtbar und führt zu Beweglichkeitskanten [34] im Energiespektrum.

2.1.3 Diffusiver Bereich und Niveaustatistik

Die delokalisierten Zustände bei nicht zu geringer Unordnung, die man im Anderson-Modell beobachten kann, sind aber keineswegs durch rein ballistisches Verhalten gekennzeichnet. Ballistisches Verhalten bedeutet, dass Wellenpakete ungestreut durch das System propagieren können. Im Gegensatz dazu findet man ab dem zweidimensionalen Fall einen Unordnungsbereich, in dem die Wellenpakete immer wieder gestreut werden, dabei aber noch nicht lokalisieren. Der Abstand der Streuprozesse wird durch die mittlere freie Weglänge l charakterisiert. Es ist klar, dass diese mittlere freie Weglänge kleiner als die Lokalisierungslänge sein muss, denn das Auftreten der Streuprozesse ist auch die Ursache für Lokalisierung. Es gilt also stets $l < \xi$. Im eindimensionalen Fall führt die Streuung aber auch gleichzeitig zwingend zur Lokalisierung, denn die Streueffekte wirken hierbei immer zwangsläufig rückstreuend. Die mittlere freie Weglänge und die Lokalisierungslänge sind damit von gleicher Größenordnung und skalieren als Funktion der Unordnungsstärke gleich.

Viel interessanter ist der Fall von Dimensionen größer als Eins. Dort ergibt sich die Möglichkeit diffusiven Verhaltens, bei der die mittlere freie Weglänge klein ge-

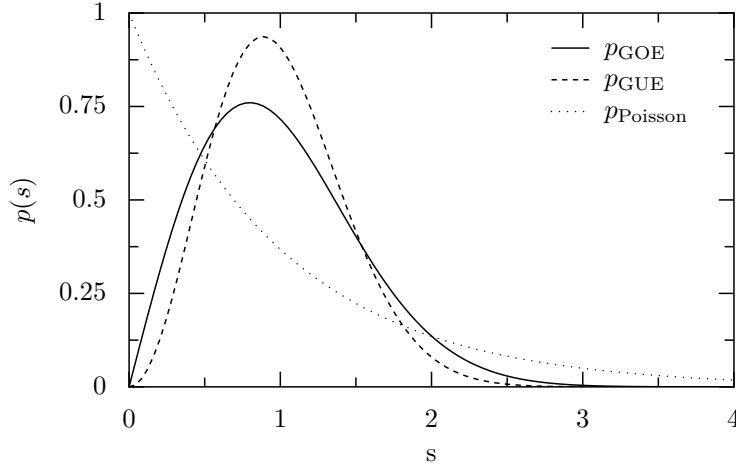


Abbildung 2.4: Beispiele für Wahrscheinlichkeitsverteilungen $p(s)$ der Abstände s benachbarter Energieniveaus.

gen die Lokalisierungslänge ist. Bevor zunehmende Unordnung zu einer Lokalisierung auf einer betrachteten Längenskala führt, wird also zunächst bei kleinerer Unordnungsstärke ballistischer Transport durch Streuprozesse unterbunden und statt dessen diffusiver Transport erreicht. Dieser diffusive Transport wurde zunächst an seinen Auswirkungen auf das Energiespektrum beobachtet und diskutiert. Sowohl analytische wie auch numerische Studien [35, 36] zeigen, dass die Energiespektren in diesem Fall weitgehend denen von Zufallsmatrizen [20] entsprechen. Prominentestes Beispiel ist dabei die Verteilung $p(s)$ der Abstände s zwischen benachbarten Niveaus im Spektrum. Die Niveauabstände s werden dabei üblicherweise dimensionslos in Einheiten des mittleren Niveauabstands Δ angegeben.

Für das Anderson-Modell ohne Spin und ohne Magnetfeld (2.4) ergibt sich im diffusiven Bereich die Wigner-Verteilung für Zufallsmatrizen der Symmetrieklasse des Gaußschen Orthogonalen Ensembles (GOE). Diese Symmetrieklassen bezeichnen dabei die Invarianz des Matrizen-Ensembles unter gewissen Transformationen, in diesem Fall orthogonalen Transformationen. An dieser Stelle sind keine weiteren Details notwendig, es sei aber darauf hingewiesen, dass bei der Einführung von Wechselwirkungen im Rahmen eines Zufallsmatrixmodells in Kapitel 5 solche Symmetrieüberlegungen detaillierter dargestellt werden. Beim Gaußschen Orthogonalen Ensemble ergibt sich für die Niveauabstandstatistik:

$$p_{\text{GOE}}(s) = \frac{\pi}{2} s \exp \left\{ -\frac{\pi}{4} s^2 \right\}. \quad (2.10)$$

Im Fall mit Magnetfeld, der später in dieser Arbeit von Bedeutung sein wird, ergibt sich im diffusiven Bereich hingegen ein Zufallsmatrixverhalten aus der Symmetrieklasse des Gaußschen Unitären Ensembles (GUE), nämlich

$$p_{\text{GUE}}(s) = \frac{32}{\pi^2} s^2 \exp \left\{ -\frac{4}{\pi} s^2 \right\}. \quad (2.11)$$

Beide Verteilungen sind in Abbildung 2.4 dargestellt. Bemerkenswert ist, dass keine energetischen Entartungen von Zuständen auftreten, denn es gilt $p_{\text{GOE/GUE}}(0) = 0$. Man nennt diesen Effekt Niveauabstoßung, die ein Ergebnis der vielfältigen Kopplung aller Zustände in der Basis der zugrundeliegenden Zufallsmatrix ist.

Im diffusiven Bereich des Anderson-Modells ist die Niveauabstoßung ein Zeichen dafür, dass sich benachbarte Zustände räumlich überlappen, was insbesondere bedeutet, dass die Zustände räumlich überhaupt ausgedehnt sind. Liegen hingegen aufgrund starker Unordnung lokalisierte Zustände vor, entspricht die Abstandsstatistik einer Poisson-Statistik

$$p_{\text{Poisson}} = \exp(-s). \quad (2.12)$$

Die Ursache für diese Verteilung ist, dass lokalisierte Zustände eine Energie besitzen, die allein durch die Potentialstruktur im Lokalisierungsbereich bestimmt ist. Nicht überlappende, lokalisierte Zustände besitzen deshalb eine voneinander unabhängige Energie, denn die Potentialstruktur im Anderson-Modell ist räumlich unkorreliert gewählt. Vernachlässigt man die im Vergleich zur Gesamtzahl der Zustände geringe Anzahl von sich gegenseitig noch überlappenden Zuständen ergibt sich ein Spektrum, das durch unabhängige Zufallszahlen gegeben ist. Die Abstandsstatistik ist in diesem Fall eine Poisson-Statistik, bei der insbesondere keine Niveauabstoßung mehr zu beobachten ist.

Schließlich soll noch kurz erwähnt werden, dass auch im ballistischen Bereich in regulären Geometrien keine Niveauabstoßung beobachtet wird. Es entsteht eine nicht-universelle Niveaustatistik, die beim Anderson-Modell durch die Summe der Energien der in den Zuständen angeregten Moden in den einzelnen Raumrichtungen bestimmt ist.

2.2 Das Aubry-André-Modell

2.2.1 Unterschiede gegenüber dem Anderson-Modell

Das bereits vorgestellte Anderson-Modell (2.4) hat den Nachteil, dass ein Phasenübergang erst in drei Dimensionen beobachtet werden kann. Für Phasenraumuntersuchungen ist das recht störend, da der Phasenraum eines d -dimensionalen Systems $2d$ -dimensional ist. Das bedeutet, dass man den Phasenraum im Grunde nur für eindimensionale Systeme gut graphisch darstellen kann. Somit stellt sich die Frage nach einem Modell, das sehr ähnlich zum Anderson-Modell ist, aber bereits in einer Dimension einen Phasenübergang zeigt.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird dazu das Aubry-André-Modell verwendet [14]. Der Hamilton-Operator dieses Modells lautet:

$$H = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1}) + \lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} \cos(2\pi\beta n) c_n^\dagger c_n \quad (2.13)$$

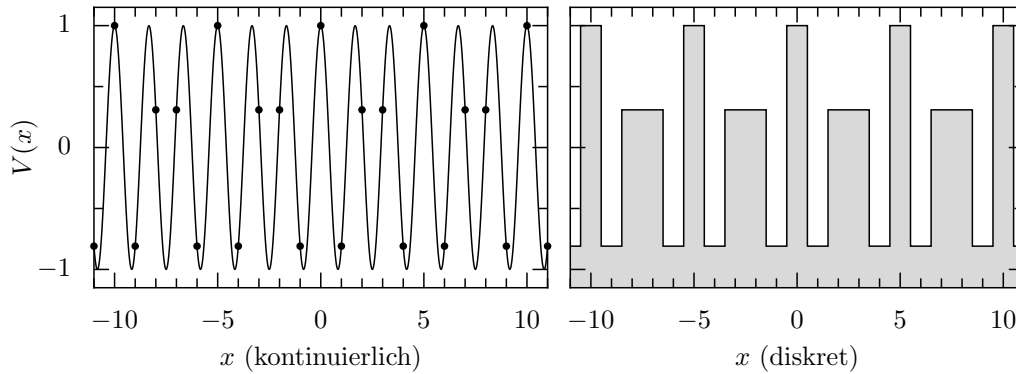


Abbildung 2.5: Gittereffekte bei der Auswertung eines cosinus-förmigen Potentials $V(x)$ mit rationalem Inkommensurabilitätsparameter $\beta = 3/5$.

Gegenüber dem Anderson-Modell fällt zunächst die Einschränkung auf eine Dimension auf. Damit lässt sich der Term für die kinetische Energie (erste Summe) explizit schreiben, wobei die Systemgröße auf unendlich gesetzt wurde. Bis auf das Vorzeichen und den per Konvention in der Regel sowieso auf Eins gesetzten Vorfaktor t unterscheidet sich die erste Summe in (2.13) somit nicht von der kinetischen Energie im Anderson-Modell (2.1).

Gravierend sind hingegen die Änderungen an der potentiellen Energie, der zweiten Summe in (2.13). Statt Zufallszahlen wie beim Anderson-Modell wird nun eine periodische Funktion verwendet, um das Potential auf den Gitterplätzen zu erzeugen. Die Periode des Potentials lautet $1/\beta$, wobei die Konstante β Inkommensurabilitätsparameter genannt wird. Nun würde eine periodische Funktion auf dem Gitter ein recht unspektakuläres Modell zur Folge haben, denn dann lassen sich die Zustände in Bloch-Wellen entwickeln. Ein solches Modell wäre im Kapitel über ungeordnete Systeme auch völlig fehl am Platz. Ein möglicher Ausweg ist, dass die Periodizität des Potentials auf dem Gitter groß oder sogar unendlich werden kann. Die ursprüngliche Periode des Potentials $1/\beta$ muss nämlich keine natürliche Zahl sein und wird somit bezüglich des Gitters nicht beobachtet. Für eine rationale Zahl tritt aber ein entsprechend Vielfaches dieser Periode auf dem Gitter als ganzzahlige Periode auf. Ein Beispiel für die rationale Zahl $\beta = 3/5 = 0.6$ ist in Abbildung 2.5 gezeigt. Die Bruchdarstellung der rationalen Zahl gibt bereits an, dass in diesem Beispiel innerhalb von fünf Gitterplätzen genau drei ganze Perioden des Potentials liegen.

Für irrationale Zahlen β entsteht jedoch gar keine ganzzahlige Periode. Man spricht dann von einem so genannten quasiperiodischen Potential, das einem zufälligen Potential in vielerlei Hinsicht mehr ähnelt, als einem periodischen Potential. Der bereits visuell fundamentale Unterschied gegenüber einem rationalen Wert für β ist am Beispiel $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0.618$ in Abbildung 2.6 dargestellt. Dieser Wert für β , der Kehrwert des Goldenen Schnittes $(\sqrt{5} + 1)/2$, stellt seit der Arbeit von Kohmoto [16] die kanonische Wahl dar. Es stellte sich nämlich heraus,

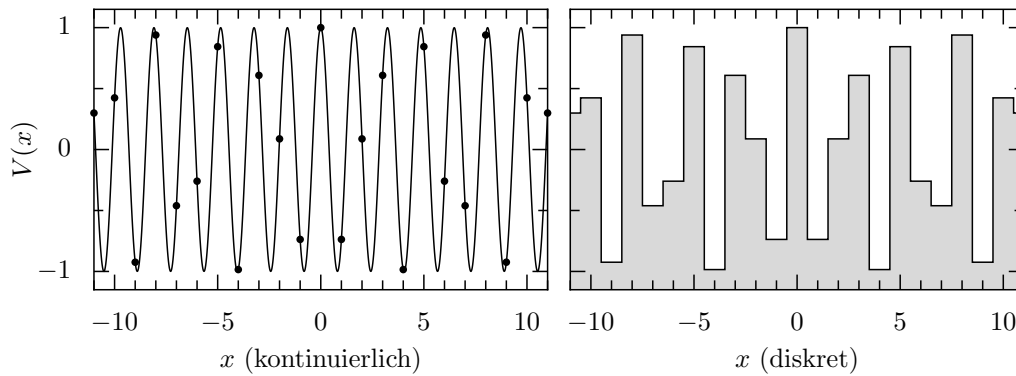


Abbildung 2.6: Gittereffekte bei der Auswertung eines cosinus-förmigen Potentials $V(x)$ mit rationalem Inkommensurabilitätsparameter $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2 \approx 0.618$.

dass man für dieses β sehr leicht eine Folge rationaler Zahlen β_i mit zugehörigen endlichen Systemgrößen L_i generieren kann, die im Grenzfall großer Systeme das Aubry-André-Modell reproduziert. Das bedeutet zunächst, dass die Folge β_i gegen β konvergiert. Um eine solche Folge zu erzeugen, ist die Kettenbruchdarstellung von β hilfreich:

$$\beta = \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}} \quad (2.14)$$

Bricht man diese Entwicklung nach dem i -ten Pluszeichen ab, erhält man gerade den Quotienten zweier aufeinander folgender Fibonacci-Zahlen L_{i-1}/L_i . Die Fibonacci-Zahlen lassen sich mittels der folgenden rekursiven Vorschrift generieren:

$$L_{i+1} = L_i + L_{i-1} \quad \text{mit den Anfangswerten} \quad L_0 = L_1 = 1 \quad (2.15)$$

Aufeinander folgende Fibonacci-Zahlen sind dabei stets teilerfremd, was sich leicht zeigen lässt: Hätten zwei aufeinander folgende Fibonacci-Zahlen einen gemeinsamen Teiler, dann müssten in Folge der rekursiven Bildungsvorschrift alle Fibonacci-Zahlen diesen gemeinsamen Teiler aufweisen. Das ist jedoch nicht der Fall, wie anhand der ersten zwei Fibonacci-Zahlen klar wird, die beide nur den trivialen Teiler Eins besitzen.

Damit die Periode des Potentials nun genau der Systemgröße entspricht, verwendet man für ein System der Größe L_i den Inkommensurabilitätsparameter

$$\beta_i = L_{i-1}/L_i. \quad (2.16)$$

Für endliche Systemgrößen ist damit eine optimale Wahl für die Approximation des Aubry-André-Modells gefunden. Zusammen mit periodischen Randbedingungen eignet sich diese Darstellung hervorragend zur numerischen Analyse von Phasenübergängen. Gegenüber dem Anderson-Modell ist hervorzuheben, dass hier be-

reits in einer Dimension ein Phasenübergang als Funktion der Potentialstärke λ beobachtet werden kann. Bevor diese Eigenschaft im Kontext der Arbeit untersucht wird, ist nun aber zunächst ein guter Zeitpunkt gekommen, einige bekannte Eigenschaften des Aubry-André-Modells genauer zu besprechen.

2.2.2 Ein verwandtes Modell: Das Harper-Modell

Im Aubry-André-Modell steht der Einfluss der Potentialstärke, die durch den Parameter λ bestimmt ist, im Vordergrund. Der Hamilton-Operator (2.13) taucht historisch gesehen aber schon erheblich vor der Arbeit von Aubry und André [14] auf. Bereits 1955 diskutierte Harper [15] die Energieniveauverteilung der Leitungselektronen von Metallen in zwei Dimensionen unter dem Einfluß eines senkrecht zur Ebene stehenden Magnetfelds. Das kontinuierliche Problem kann zunächst durch die Einführung von Wannier-Funktionen diskretisiert werden, die an den Atomrümpfen eines zweidimensionalen Gitters lokalisiert sind. Ferner lassen sich die Wellenfunktionen bei geeigneter Eichung des Magnetfelds in einer neuen Basis entwickeln, bei der eine der beiden Raumrichtungen vollständig durch Bloch-Wellen beschrieben wird. Effektiv entsteht so ein eindimensionales Problem, dessen Hamilton-Operator der Gleichung (2.13) entspricht. Allerdings ist dabei der Wert des Parameters λ auf 2 festgelegt und β nimmt die Bedeutung des Magnetfelds in Einheiten des Flußquantums pro Einheitszelle des zweidimensionalen Gitters an.

Im so genannten Harper-Modell ist demnach nicht die Abhängigkeit von der Potentialstärke von physikalischem Interesse, sondern das Verhalten des Modells (2.13) als Funktion des Inkommensurabilitätsparameters β . Es stellt sich heraus, dass die Rationalität bzw. Irrationalität des Parameters β entscheidenden Einfluss auf die Struktur des Energieniveauspektrums für $\lambda = 2$ hat. Im zugrundeliegenden physikalischen Modell bedeutet dieser Unterschied, ob sich die Phase der Wellenfunktion bei Einschluss einer endlichen Anzahl von Einheitszellen periodisch schließen lässt oder nicht. Hofstadter zeigte [37], dass bereits infinitesimale Änderungen des Parameters β und damit auch nur infinitesimale Änderungen der Lage der Energieniveaus bereits un stetige Änderungen der Fraktalitätseigenschaften des Spektrums zur Folge haben. Die Niveaustuktur und auch die Zustände selbst werden genau für irrationale β und $\lambda = 2$ multifraktal [38, 39]. Multifraktalität und der damit in direktem Zusammenhang stehende Begriff des Chaos ist dabei eine Frage nach Selbstähnlichkeit, ob also im Fall des Energiespektrums ein Ausschnitt aus dem Spektrum strukturell wieder dem Spektrum selbst entspricht.

2.2.3 Dualitätstransformation

Eine zentrale Eigenschaft des Aubry-André-Modells ist durch die so genannte Dualitätstransformation gegeben, die bereits in der schon zitierten Arbeit von Aubry und André [14] ausführlich diskutiert wurde. Der komplette Satz von Eigenzuständen des Modells für eine gegebene Potentialstärke lässt sich demnach zu ei-

nem anderen kompletten Satz von Eigenzuständen umtransformieren, die Lösungen für eine andere Potentialstärke sind³. Ein wesentlicher Teil der Dualitätstransformation ist durch die Fourier-Transformation gegeben. Diese verknüpft die Ortsdarstellung einer Wellenfunktion $\psi(n)$ mit ihrer Impulsdarstellung $\tilde{\psi}(k_i)$. Auf einem endlichen Gitter der Länge L ist die Wellenzahlen gemäß Gleichung (2.2) mit ganzzahligen i diskretisiert. Die Fourier-Transformation und die zugehörige Rücktransformation lauten dann:

$$\tilde{\psi}(k_i) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=1}^L \exp(-i k_i n) \psi(n) \quad \text{und} \quad (2.17a)$$

$$\psi(n) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{i=1}^L \exp(i k_i n) \tilde{\psi}(k_i). \quad (2.17b)$$

Nun soll die Wellenfunktion ψ eine Lösung des Aubry-André-Modells sein. Damit erfüllt ψ insbesondere die Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung:

$$\psi(n+1) + \psi(n-1) + \lambda \cos(2\pi\beta n)\psi(n) - E\psi(n) = 0. \quad (2.18)$$

Der Inkommensurabilitätsparameter β sei dabei für die endliche Systemgröße L durch den Bruch L^*/L approximiert, wobei L^* und L aufeinander folgende Fibonacci-Zahlen sein sollen. Nun wird eine Permutation \mathcal{P} eingeführt mittels:

$$\mathcal{P}(i) = iL^* \bmod L. \quad (2.19)$$

Die Teilerfremdheit von L^* und L garantiert, dass die Permutation \mathcal{P} eine Liste von L aufeinander folgenden ganzen Zahlen auf eben wieder eine solche Liste von Zahlen bijektiv abbildet. Eine Verschiebung der Zahlen auf ein anderes Intervall der Länge L soll aufgrund der periodischen Fortsetzung des Problems stets implizit möglich sein.

Durch Einsetzen der Transformation (2.17b) lässt sich unter Verwendung der Permutation (2.19) zeigen, dass die Fouriertransformierte $\tilde{\psi}(k_i)$ die folgende Gleichung erfüllt:

$$\tilde{\psi}(k_{\mathcal{P}(i+1)}) + \tilde{\psi}(k_{\mathcal{P}(i-1)}) + \frac{4}{\lambda} \cos(2\pi\beta i) \tilde{\psi}(k_{\mathcal{P}(i)}) - \frac{2E}{\lambda} \tilde{\psi}(k_{\mathcal{P}(i)}) = 0. \quad (2.20)$$

Diese Gleichung ist genau wieder die Schrödinger-Gleichung des Aubry-André-Modells in Ortsdarstellung, allerdings zu einer anderen Energie $2E/\lambda$ und Potentialstärke $4/\lambda$. Außerdem tritt statt der ursprünglichen Wellenfunktion im Ortsraum deren Fourier-Transformierte auf, wobei die Indizierung durch die Permutation \mathcal{P} durcheinander gebracht wurde. In Abbildung 2.7 ist diese Eigenschaft des Aubry-

³Im Fall der Selbstdualität am Dualitätspunkt $\lambda = 2$ wird der Satz von Eigenzuständen auf sich selbst abgebildet.

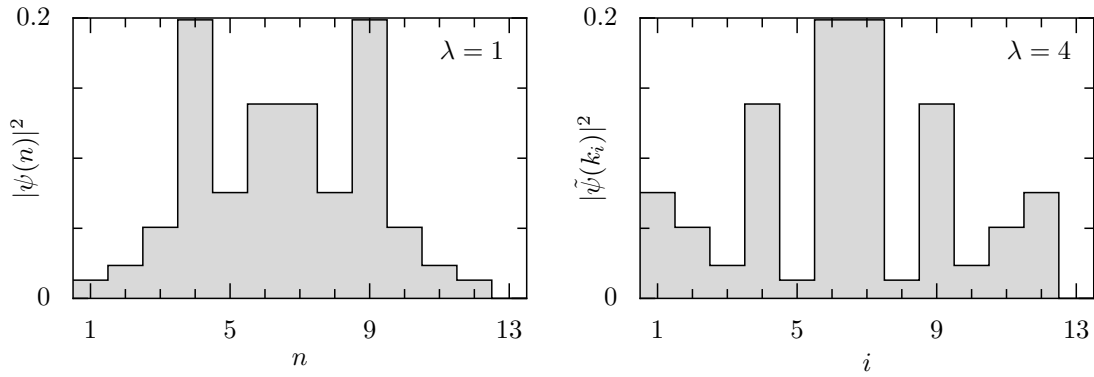


Abbildung 2.7: Wellenfunktionen für den Grundzustand des Aubry-André-Modells für die endliche Systemgröße $L = 13$ mit $\beta = 8/13$. Links ist die Wellenfunktion im Ortsraum für $\lambda = 1$ gezeigt, während rechts die Wellenfunktion im Impulsraum für $\lambda = 4$ dargestellt ist. Die abgebildeten Funktionen lassen sich gemäß der Dualitätstransformation durch die Permutation (2.19) ineinander überführen.

André-Modells an einem Beispiel dargestellt.

Übrigens lässt sich die Dualitätstransformation auch in der physikalischen Ableitung des Harper-Modells wiederfinden. Dabei wird ja eine der ursprünglich zwei Raumdimensionen durch geeignete Eichung des Magnetfelds und einen Basiswechsel eliminiert. Wählt man statt der einen Raumdimension die genau andere Raumdimension aus, wird effektiv die Dualitätstransformation ausgeführt. Allerdings findet die Dualitätstransformation hierbei lediglich am Punkt der Selbstdualität $\lambda = 2$ statt, auf den das Harper-Modell in seiner ursprünglichen Formulierung beschränkt ist.

2.2.4 Lokalisierungsübergang

Aus der Dualitätstransformation lassen sich bereits einige Eigenschaften des Aubry-André-Modells folgern. Beispielsweise kann man vom Verhalten des Modells bei $\lambda = 0$ ausgehen. Dieser Grenzfall entspricht gerade der freien Bewegung eines Teilchens in einem eindimensionalen Gitter. Die Lösungen sind somit ebene Wellen mit den Wellenzahlen k_i gemäß Gleichung (2.2). Während die ebenen Wellen in Ortsdarstellung über das gesamte System ausgedehnt sind, sind sie im Impulsraum genau bei der entsprechenden Wellenzahl lokalisiert. Wendet man nun die Dualitätstransformation an, die im vorherigen Abschnitt besprochen wurde, wird aus der Lokalisierung im Impulsraum für $\lambda = 0$ eine Lokalisierung im Ortsraum im Grenzfall $\lambda \rightarrow \infty$. Die Permutation (2.19) sorgt zudem dafür, dass ursprünglich benachbarte Zustände im Impulsraum im allgemeinen weit entfernt in den Ortsraum abgebildet werden. Hier wirkt sich die Quasiperiodizität des Potentials aus. Diese Eigenschaft ist für die Lokalisierung erheblich, denn sie stellt sicher, dass energetisch ursprünglich nah beieinander liegende Bloch-Wellen nicht nur durch die Transformation der Energie zu $2E/\lambda$ energetisch voneinander getrennt werden, sondern

gleichzeitig auch noch räumlich separieren. Energetisch benachbarte Bloch-Wellen sind – abgesehen vom Vorzeichen – in einer Dimension nämlich auch benachbart im Impuls, wie aus der Dispersionsrelation in Abbildung 2.1 hervorgeht.

Tatsächlich setzt sich diese Eigenschaft auch zu endlichen Werten von λ fort. Für $\lambda < 2$ findet man bei ausreichend großen Systemen stets Lokalisierung im Impulsraum und in Einklang mit der Dualitätstransformation tritt für $\lambda > 2$ entsprechend Lokalisierung im Ortsraum auf. Der Selbstdualitätspunkt $\lambda = 2$ ist somit gleichzeitig die kritische Potentialstärke, bei der ein Metall-Isolator-Übergang stattfindet. Allerdings ist die Existenz eines Phasenübergangs nicht direkt aus der Dualität ersichtlich. Beispielsweise wäre es genauso gut denkbar, dass der Übergang von delokalisierten zu lokalisierten Zuständen im Ortsraum kontinuierlich als Funktion der Potentialstärke λ stattfindet.

Zunächst hatten Aubry und André bereits in [14] die Vermutung aufgestellt, dass für jedes irrationale β ein Metall-Isolator-Übergang auftritt. Schon kurze Zeit später wurden jedoch Gegenbeispiele angegeben [40], die belegen, dass Irrationalität nicht hinreichend ist. Erst viele Jahre später konnte schließlich Jitomirskaya eine hinreichende Bedingung für β angeben [41], die das Auftreten des Metall-Isolator-Übergangs im Aubry-André-Modell zur Folge hat. Demnach muss β nicht nur irrational, sondern sogar diophantin sein, was ein Maß für die Abweichung von rationalen Approximationen im Vergleich zu den dazu notwendigen Nennern bedeutet. Für diophantine Zahlen ist eine gute Approximation nur mit großen Nennern möglich, was im Gegensatz dazu bei Liouville-Zahlen nicht der Fall ist. Zudem ergibt sich auch eine Einschränkung hinsichtlich der Phase des Potentials, die in der Gleichung (2.13) Null gewählt ist. Details sind in [41] ausgeführt, hier aber nicht weiter von Interesse. An dieser Stelle ist hingegen wichtig, dass der von Kohmoto [16] eingeführte Wert $\beta = (\sqrt{5} - 1)/2$ diophantin ist⁴ und in diesem Fall ein Metall-Isolator-Übergang im Aubry-André-Modell bei $\lambda = 2$ beobachtet werden kann.

2.2.5 Symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen

Die Symmetrie des cosinus-Potentials $\cos(x) = \cos(-x)$ lässt sich insbesondere für die numerische Behandlung des Problems ausnutzen, indem der Lösungsraum für die Wellenfunktionen vollständig in symmetrische und antisymmetrische Funktionen im Ortsraum zerlegt werden kann. In der Tat hat bereits Thouless [42] diese Zerlegung, die in Tabelle 2.1 zusammengefasst ist, in Zusammenhang mit der Diskussion von Eigenschaften des Energiespektrums angegeben und ausgenutzt. Um die Schreibweise zu vereinfachen, enthält die Ortsbasis in Tabelle 2.1 auch den

⁴Aufgrund der herausragenden Kettenbruchdarstellung mit Koeffizienten Eins in jeder Bruchebene stellt dieses β die optimale diophantine Zahl dar, aber im Sinne der Konvergenzeigenschaften rationaler Brüche lassen sich beliebig viele andere diophantine Zahlen finden. Tatsächlich sind die meisten irrationalen Zahlen diophantin. Andererseits liegen die Liouville-Zahlen dicht in der Menge der irrationalen Zahlen.

symmetrische Wellenfunktionen: $\psi(n) = \psi(-n)$ antisymmetrische Wellenfunktionen: $\psi(n) = -\psi(-n)$

ungerade L : $L = 2l + 1$

$$\psi_s(n) = \begin{cases} \psi(n)/\sqrt{2} & n = 0 \\ \psi(n) & 1 \leq n \leq l \end{cases}$$

$$\psi_a(n) = \begin{cases} \psi(n) = 0 & n = 0 \\ \psi(n) & 1 \leq n \leq l \end{cases}$$

 $l + 1$ unabhängige Gleichungen ($2 \leq n < l$): l unabhängige Gleichungen ($1 \leq n < l$):

$$\begin{aligned} \lambda \psi_s(0) + \sqrt{2} \psi_s(1) &= E \psi_s(0) \\ \sqrt{2} \psi_s(0) + \lambda \cos(2\pi\beta) \psi_s(1) + \psi_s(2) &= E \psi_s(1) \\ \psi_s(n-1) + \lambda \cos(2\pi\beta n) \psi_s(n) + \psi_s(n+1) &= E \psi_s(n) \\ \psi_s(l-1) + [\lambda \cos(2\pi\beta l) + 1] \psi_s(l) &= E \psi_s(l) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_a(n-1) + \lambda \cos(2\pi\beta n) \psi_a(n) + \psi_a(n+1) &= E \psi_a(n) \\ \psi_a(l-1) + [\lambda \cos(2\pi\beta l) - 1] \psi_a(l) &= E \psi_a(l) \end{aligned}$$

gerade L : $L = 2l$

$$\psi_s(n) = \begin{cases} \psi(n)/\sqrt{2} & n = 0 \text{ oder } n = l \\ \psi(n) & 1 \leq n \leq l-1 \end{cases}$$

$$\psi_a(n) = \begin{cases} \psi(n) = 0 & n = 0 \text{ oder } n = l \\ \psi(n) & 1 \leq n \leq l-1 \end{cases}$$

 $l + 1$ unabhängige Gleichungen ($2 \leq n < l - 1$): $l - 1$ unabhängige Gleichungen ($1 \leq n < l$):

$$\begin{aligned} \lambda \psi_s(0) + \sqrt{2} \psi_s(1) &= E \psi_s(0) \\ \sqrt{2} \psi_s(0) + \lambda \cos(2\pi\beta) \psi_s(1) + \psi_s(2) &= E \psi_s(1) \\ \psi_s(n-1) + \lambda \cos(2\pi\beta n) \psi_s(n) + \psi_s(n+1) &= E \psi_s(n) \\ \psi_s(l-2) + \lambda \cos(2\pi\beta(l-1)) \psi_s(l-1) + \sqrt{2} \psi_s(l) &= E \psi_s(l-1) \\ \sqrt{2} \psi_s(l-1) + \lambda \cos(2\pi\beta l) \psi_s(l) &= E \psi_s(l) \end{aligned}$$

$$\psi_a(n-1) + \lambda \cos(2\pi\beta n) \psi_a(n) + \psi_a(n+1) = E \psi_a(n)$$

Tabelle 2.1: Übersicht über die symmetrischen und antisymmetrischen Lösungen des Aubry-André-Modells. Die Schrödinger-Gleichung des Modells im Ortsraum (2.18) zerfällt durch Einsetzen der Symmetriebedingungen vollständig in Schrödinger-Gleichungen für symmetrische und antisymmetrische Wellenfunktionen.

Symmetriepunkt $n = 0$ des Potentials. Der Übergang zur bisherigen Schreibweise ist durch die periodische Fortsetzung mit der Systemgröße L gegeben.

Eine interessante Beobachtung ist, dass bei der Zerlegung des Hamilton-Operators nach symmetrischen und antisymmetrischen Ortsraum-Wellenfunktionen die periodischen Randbedingungen in der Zerlegung selbst absorbiert werden. Als Nebenwirkungen treten Faktoren $\sqrt{2}$ an ausgezeichneten Positionen der Wellenfunktion und den Hüpfmatrixelementen auf. Während solche Einträge zuvor auch in den von der Diagonale entfernten Eckpositionen auftraten, besitzen die verbleibenden hermiteschen Matrizen der Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung nunmehr jedoch Tridiagonalform. Diese Matrixform lässt sich erheblich effizienter numerisch diagonalisieren, was die Behandlung größerer Systeme ermöglicht. Das ist insbesondere für die Analyse von Phasenübergängen sehr hilfreich, denn dabei ist der Grenzfall unendlicher Systemgröße von entscheidender Bedeutung.

3 Phasenraummethoden

Die im vergangenen Kapitel vorgestellten Einteilchenmodelle sind nach langjähriger Forschung in vielerlei Hinsicht wohlverstanden. Das bedeutet andererseits aber auch, dass diese Modelle überaus geeignet sind, um neue Untersuchungsmethoden für Lokalisierungseffekte zu studieren. Die Diskussion von Lokalisierung und Metall-Isolator-Übergängen selbst ist nach wie vor ein zentraler Forschungsschwerpunkt in der theoretischen Festkörperphysik. Von großem Interesse ist beispielsweise die Untersuchung wechselwirkender Teilchen in ungeordneten Systemen. Dieser Punkt wird später in der Arbeit aufgegriffen.

3.1 Phasenraumverteilungen

Zunächst sollen Phasenraumkonzepte zur Analyse von Lokalisierungsphänomenen eingeführt werden. Die methodische Einführung bezieht sich dabei vor allem auf die Anwendung in der Festkörperphysik, in der diese Herangehensweise bisher wenig etabliert ist. Andernorts, beispielsweise in der semiklassischen Beschreibung, haben sich Phasenraummethoden bereits seit Jahrzehnten bewährt. Das ist auch verständlich, ist doch in diesem Gebiet der Bezug zur klassischen Physik viel größer. Eben dort, in der klassischen Physik, können Trajektorien im Phasenraum beispielsweise hervorragend genutzt werden, um chaotisches und reguläres Verhalten voneinander zu unterscheiden.

In einer quantenmechanischen Beschreibung ist nun aber der Welle-Teilchen-Dualismus inhärent, was eine Phasenraumbehandlung im klassischen Sinne verhindert. Einem quantenmechanischen Teilchen kann man keinen Punkt im Phasenraum zuordnen. Die beiden konjugierten Größen Ort und Impuls lassen sich in der Quantenmechanik nicht gleichzeitig genau festlegen, wie die Heisenbergsche Unschärferelation besagt. Diese lautet für eine Ortskoordinate x und die zugehörige Wellenzahl $k = p/\hbar$:

$$\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}. \quad (3.1)$$

Nun ist eine Phasenraumbeschreibung eines Metall-Isolator-Übergangs dennoch auch in der Quantenmechanik durchaus attraktiv. Im Fall stark lokalisierter Zustände im Ortsraum beispielsweise ist der Impuls entsprechend unbestimmt. Gleiches gilt umgekehrt für lokalisierte Zustände im Impulsraum. In diesem Sinne ist die Heisenbergsche Unschärferelation nichts als eine Eigenschaft der Fourier-Transformation (2.17). Studiert man nun ein Modell, welches als Funktion eines

Parameters einen Wechsel von lokalisierten Zuständen im Impulsraum zu lokalisierten Zuständen im Ortsraum vollführt, ist eine symmetrische Erfassung von Orts- und Impulseigenschaften wünschenswert. In der Orts- oder Impulsdarstellung der Wellenfunktion wird jedoch immer nur eine der beiden konjugierten Variablen direkt erfasst, während die andere Größe zwar stets implizit durch eine Fourier-Transformation zugänglich ist, was jedoch in der Regel genau eine asymmetrische Erfassung der Größen zur Folge hat. Im Phasenraum ergibt sich hingegen die Chance, Orts- und Impulskoordinaten gleichberechtigt zu behandeln. Eine ähnlich symmetrische Behandlung könnte man auch erreichen, indem man die Orts- und Impulsdarstellung gleichzeitig in eine Analyse einbezieht. Inwiefern solch ein Vorgehen dem einer Phasenraumanalyse nahekommt, wird im Rahmen dieser Arbeit auch diskutiert werden.

3.1.1 Wigner-Funktion

In einem d -dimensionalen quantenmechanischen Problem sind die Zustände des Systems bereits vollständig durch d dimensionale Wellenfunktionen bestimmt. Der Phasenraum in diesem Problem ist aber $2d$ -dimensional, weshalb Phasenraumfunktionen redundante Informationen tragen müssen und außerdem verschiedene Definitionen möglich sind [7]. Bestimmte Phasenraumverteilungen zeichnen sich aber durch entsprechend zusätzliche Eigenschaften aus. Eine schöne Einführung in dieses Gebiet gibt Dittrich in [43].

Eine herausragende Phasenraumfunktion ist die Wigner-Funktion [5]. In einer Dimension ergibt sie sich aus der Wellenfunktion in Ortsdarstellung $\psi(x)$ gemäß:

$$W(x, k) = \int d\tilde{x} \exp(ik\tilde{x}) \psi^*\left(x + \frac{\tilde{x}}{2}\right) \psi\left(x - \frac{\tilde{x}}{2}\right). \quad (3.2)$$

Die Integration deutet bereits an, dass hier zunächst ein kontinuierliches, räumlich unendlich ausgedehntes Problem betrachtet werden soll. Die Annahme eines kontinuierlichen Problems ermöglicht es, Terme wie $\tilde{x}/2$ zu schreiben, ohne an dieser Stelle die Approximation auf ein Gitter zu berücksichtigen. Ähnliches gilt für die spätere Einschränkung auf ein endliches, periodisch fortgesetztes Problem mit einer entsprechenden Diskretisierung im Impulsraum gemäß (2.2). Diese Approximationen sind in der Tat nicht unproblematisch, was später in diesem Kapitel noch aufgegriffen wird.

Zunächst ist festzustellen, dass die Wigner-Funktion stets reell ist, wie eine Substitution von \tilde{x} nach $-\tilde{x}$ in Gleichung 3.2 direkt zeigt. Anhand der Definition der Wigner-Funktion kann man zudem leicht nachrechnen, dass sich diese Funktion ideal eignet, um beliebige Momente des Orts- und Impulsoperators zu bestimmen. Im Fall des Ortsoperators kann man die Impulsintegration einfach ausführen:

$$\int \frac{dx dk}{2\pi} x^n W(x, k) = \int dx x^n |\psi(x)|^2. \quad (3.3)$$

Für den Impulsoperator könnte man die letzte Rechnung ebenso in Ortsdarstellung ausführen. Andererseits ist es eine gute Gelegenheit, die Symmetrie des Problems zu zeigen. Bereits die Definition der Wigner-Funktion sieht in Impulsdarstellung ganz analog zu (3.2) aus:

$$W(x, k) = \int \frac{d\tilde{k}}{2\pi} \exp(i\tilde{k}x) \tilde{\psi}^* \left(k - \frac{\tilde{k}}{2} \right) \tilde{\psi} \left(k + \frac{\tilde{k}}{2} \right). \quad (3.4)$$

Diese Darstellung erhält man aus (3.2), indem man eine kontinuierliche Version der Fourier-Transformation (2.17) verwendet. Damit ergibt sich analog zu (3.3) für den Impulsoperator:

$$\int \frac{dx dk}{2\pi} k^n W(x, k) = \int dk k^n |\tilde{\psi}(k)|^2. \quad (3.5)$$

Man kann mittels der Wigner-Funktion sogar Erwartungswerte von beliebigen anderen Operatoren berechnen, die beispielsweise Orts- und Impulsoperatoren gleichzeitig enthalten. Hierbei muss dann die so genannte Weyl-Ordnung [44] bei der Sortierung der Operatoren angewandt werden. Bestimmt man den Erwartungswert von Diracschen δ -Funktionen in Ort und Impuls, ergeben sich direkt Formeln zur Extraktion der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten:

$$\int \frac{dk}{2\pi} W(x, k) = |\psi(x)|^2 \quad \text{und} \quad (3.6a)$$

$$\int dx W(x, k) = |\tilde{\psi}(k)|^2. \quad (3.6b)$$

Darüber hinaus ist es recht instruktiv, ein paar Beispiele für Wigner-Funktionen zu berechnen. Vollständig lokalisierte Zustände, im kontinuierlichen Fall beschrieben durch eine δ -Funktion in der Orts- oder Impulskoordinate, führen zu δ -förmigen Streifen in der Wigner-Funktion, wobei geeignete Darstellungen der δ -Funktion zur Auswertung der Integrale herangezogen werden müssen.

Ein in der Anwendung interessanter Fall ergibt sich durch Überlagerung zweier ebener Wellen mit den Wellenzahlen $-k_0$ und k_0 . Solche Zustände ergeben sich sowohl im Anderson-Modell wie auch im Harper-Modell für verschwindende Potentialstärke. Die Überlagerung der beiden ebenen Wellen zu gleichen Teilen entsteht beispielsweise aus der Forderung nach reellen Wellenfunktionen. Abgesehen von Phasenfaktoren ergibt sich dann:

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\delta(k - k_0) + \delta(k + k_0)]. \quad (3.7)$$

Die zugehörige Wigner-Funktion lautet:

$$W(x, k) = \frac{1}{2} [\delta(k - k_0) + \delta(k + k_0)] + \delta(k) \cos(2k_0x) \quad (3.8)$$

Neben den beiden δ -Funktionen bei $-k_0$ und k_0 taucht hier ein dritter, oszillierender

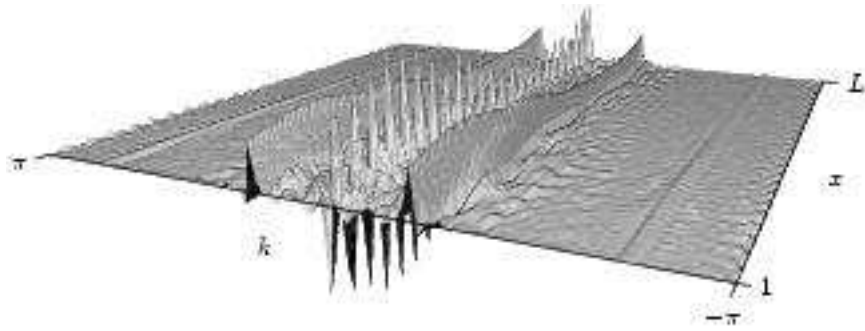


Abbildung 3.1: Beispiel der Wigner-Funktion anhand eines Zustands im eindimensionalen Anderson-Modell bei einer für die Systemgröße $L = 101$ geringen Unordnungsstärke $W = 0.5$.

Term auf. Obwohl die Ergebnisse (3.3) und (3.5) eine Interpretation der Wigner-Funktion als Phasenraumdichte nahelegen, ist die Wigner-Funktion im Allgemeinen nicht positiv und stark oszillierend. Diese Eigenschaften sind Ausdruck quantenmechanischer Kohärenz und verschwinden im klassischen Grenzfall. In diesem Zusammenhang sei auch angemerkt, dass die Wigner-Funktion zwar eine vollständige Lokalisierung in Orts- und im Impulsrichtung mit δ -förmigen Streifen ermöglicht, aber keine gleichzeitige δ -förmige Lokalisierung im Ortsraum und im Impulsraum möglich ist, die im Widerspruch zur Heisenbergschen Unschärferelation steht.

In Abbildung 3.1 ist die Wigner-Funktion für einen Zustand im eindimensionalen periodisch fortgesetzten Anderson-Modell bei geringer Unordnungsstärke gezeigt. Das Integral (3.2) wurde dazu auf eine Periode des Problems beschränkt und die Integration durch eine Summe auf dem Gitter approximiert. Man erkennt in der Abbildung noch deutlich Streifen bei zwei festen Impulsen $-k_0$ und k_0 sowie ein oszillierendes Verhalten für $k = 0$. Dieses Verhalten gemäß (3.8) stabilisiert sich für geringere Unordnungsstärke mehr und mehr.

Neben dem Einfluß der Unordnung erkennt man in Abbildung 3.1 bereits einige Artefakte aufgrund der Approximation auf einem Gitter, die für größere k_0 , also Zustände mit größerer Energie, zunehmen. Gemeint sind die zwei Streifen bei $k = -\pi + k_0$ und $k = \pi - k_0$ sowie das oszillierende Verhalten an den Rändern $k = -\pi$ und $k = \pi$. Der stark oszillierende Integrand in (3.2) wird genau an den genannten Stellen besonders ungünstig auf dem Gitter gerastert, so dass ein völlig anderes Verhalten gegenüber dem kontinuierlichen Fall entsteht. Eine gewisse Abhilfe schafft die Näherung der Wellenfunktion zwischen zwei Gitterplätzen durch Mittelung der Werte an den angrenzenden Gitterplätzen. Dieses Vorgehen verringert die Artefakte aber nur für kleine k_0 . Im Allgemeinen ist die Behandlung von Wigner-Funktionen auf einem Gitter aber aufgrund der starken Oszillationen beispielsweise im Integranden von (3.2), aber auch in der Wigner-Funktion selbst überaus problematisch. Selbst für die sehr einfache Wellenfunktion (3.7) treten die besprochenen qualitativen Unterschiede bei der Gitterapproximation gegenüber dem analytischen Resultat (3.8) auf.

3.1.2 Husimi-Funktion

Eine alternative Phasenraumverteilung ist durch die Husimi-Funktion [6] oder Q-Funktion [45] gegeben. Sie kann aus der Wigner-Funktion bestimmt werden durch:

$$\rho(x, k) = \int \frac{d\tilde{x} d\tilde{k}}{2\pi} \exp \left[-\frac{(x - \tilde{x})^2}{2\sigma^2} - 2\sigma^2(k - \tilde{k})^2 \right] W(\tilde{x}, \tilde{k}). \quad (3.9)$$

Die dabei ausgeführte Gaußsche Verschmierung durch den Parameter σ eliminiert die starken Oszillationen der Wigner-Funktion. Dennoch verliert man dabei keine Information, denn die Transformation lässt sich invertieren:

$$W(x, k) = \int \frac{d\lambda d\kappa}{2\pi} \frac{d\tilde{x} d\tilde{k}}{2\pi} \exp \left[\frac{\lambda^2}{8\sigma^2} + \frac{\sigma^2 \kappa^2}{2} - i\kappa(x - \tilde{x}) - i(k - \tilde{k})\lambda \right] \rho(\tilde{x}, \tilde{k}). \quad (3.10)$$

Die Integrationen über den Ort λ und die Wellenzahl κ darf zunächst nicht ausgeführt werden, denn das Integral ist nur durch den asymptotischen Abfall der Husimi-Funktion wohldefiniert. Dazu muss zuerst die Integration in \tilde{x} und \tilde{k} ausgeführt werden.

Die Gaußsche Verschmierung, die in Gleichung (3.9) ausgeführt wurde, verhindert, dass die Husimi-Funktion im Phasenraum stärker lokalisiert als dies durch die Heisenbergsche Unschärferelation erlaubt wird. Im Ergebnis ist die Husimi-Funktion niemals negativ. Das lässt sich beispielsweise dadurch zeigen, dass man die Definition der Wigner-Funktion (3.2) in Gleichung (3.9) einsetzt. Die Husimi-Funktion wird dann nämlich durch ein Betragsquadrat bestimmt:

$$\rho(x, k) = \left| \int d\tilde{x} \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{(x - \tilde{x})^2}{4\sigma^2} - ik\tilde{x} \right] \psi(\tilde{x}) \right|^2 \quad (3.11)$$

Dem Integral ist direkt ersichtlich, dass es als eine Projektion der Wellenfunktion auf einen gauß-förmigen Zustand im Ortsraum interpretiert werden kann. Eine Gauß-Kurve wird nun durch Fourier-Transformation wieder in eine Gauß-Kurve abgebildet und erfüllt dabei genau den Fall der Gleichheit in der Heisenbergschen Unschärferelation (3.1). Es handelt sich deshalb um einen Zustand minimaler Unschärfe, der mit $|x, k\rangle$ bezeichnet werden soll. Für die Husimi-Funktion kann man somit schreiben:

$$\rho(x, k) = |\langle x, k | \psi \rangle|^2. \quad (3.12)$$

Die Orts- und Impulsdarstellung des Zustands $|x, k\rangle$ lauten

$$\langle \tilde{x} | x, k \rangle = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/4} \exp \left[-\frac{(x - \tilde{x})^2}{4\sigma^2} + ik\tilde{x} \right] \quad \text{und} \quad (3.13a)$$

$$\langle \tilde{k} | x, k \rangle = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left[-\sigma^2(k - \tilde{k})^2 + i(k - \tilde{k})x \right], \quad (3.13b)$$

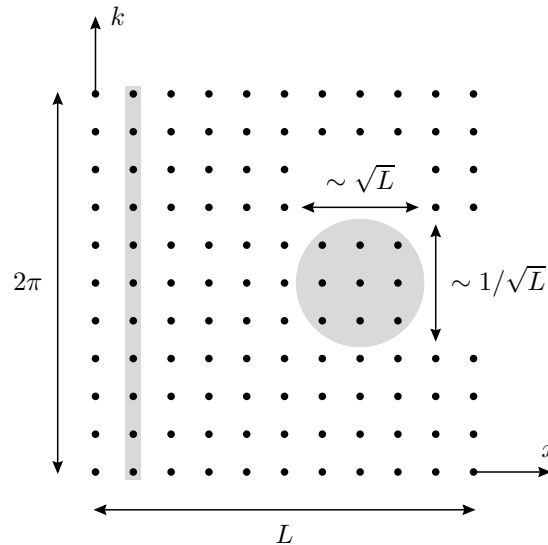


Abbildung 3.2: Visualisierung der endlichen Auflösung im Phasenraum in Einklang mit der Heisenbergschen Unschärferelation (3.1). Der grau schattierte Kreis illustriert den optimalen Fall im Sinne einer gleichberechtigten Behandlung von Orts- und Impulsordinate. Die Ortsdarstellung einer Wellenfunktion entspricht dem ebenfalls schematisch dargestellten Streifen, bei dem die konjugierte Koordinate Impuls nurmehr komplett implizit enthalten ist.

womit die eigentliche Bedeutung der Bezeichnung $|x, k\rangle$ deutlich wird. Der Zustand ist nämlich um den Punkt (x, k) im Phasenraum zentriert. Die Variable σ , die bereits in Gleichung (3.9) eingeführt wurde, bestimmt die endliche Auflösung in Orts- und Impulsrichtung. Es gilt $\Delta x = \sigma$ und $\Delta k = 1/2\sigma$.

Damit die Auflösung für ein endliches System der Größe L auf ein Gitter in beiden Phasenraumrichtungen gleich ist, muss $\Delta x/L = \Delta k/2\pi$ gelten. Daraus folgt sofort $\sigma = \sqrt{L/4\pi}$. Abbildung 3.2 illustriert diese Wahl. Sie ist optimal in dem Sinne, dass Ort und Impuls bezüglich der auf einem Gitter zur Verfügung stehenden Auflösung gleich behandelt werden. Zwar nimmt bei zunehmender Systemgröße L die Auflösung im Phasenraum bezüglich der Gitterpunkte selbst ab, aber gleichzeitig wird die relative Auflösung bezogen auf die Gesamtgröße des Gitters immer besser. Auch andere Skalierungen $\sigma \sim L^\nu$ mit $0 < \nu < 1$ zeigen eine zunehmend bessere Auflösung in allen Phasenraumrichtungen für $L \rightarrow \infty$, allerdings bei ungünstiger Wahl erst für entsprechend große Systeme. Außer der Motivation, eine möglichst symmetrische Darstellung zu verwenden, ist es somit auch für die numerische Behandlung zweckmässig, den oben vorgeschlagenen Wert $\sigma = \sqrt{L/4\pi}$, also insbesondere $\nu = 1/2$, zu verwenden.

Es ist recht instruktiv, nochmals explizit den Vergleich mit der Orts- oder Impulsdarstellung einer Wellenfunktion anzustellen. Während die Husimi-Funktion die Wellenfunktion auf einen kohärenten Zustand $|x_0, k_0\rangle$ projiziert und dabei Orts- und Impulsinformationen mit endlicher Auflösung generiert, wird in der Orts-

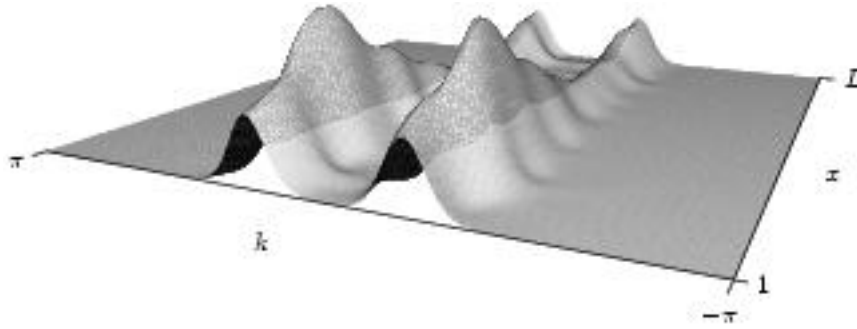


Abbildung 3.3: Beispiel der Husimi-Funktion anhand eines Zustands im eindimensionalen Anderson Modell bei geringer Unordnungsstärke. Es ist der selbe Zustand wie in Abbildung 3.1 dargestellt.

oder Impulsdarstellung der Wellenfunktion jeweils nur eine der Phasenraumrichtung vollständig aufgelöst. In Einklang mit der Heisenbergschen Unschärferelation geht das zu Lasten der jeweils komplementären Koordinate, die nur implizit in solch einer Darstellung enthalten ist. Anschaulich entspricht die Wellenfunktion in Orts- oder Impulsdarstellung demnach einer Projektion auf Streifen im Phasenraum, wie dies schematisch für eine Ortsraumposition in Abbildung 3.2 angedeutet ist.

Um die Ausführungen zu kompletieren, sollen nun auch noch Beispiele für Husimi-Funktionen betrachtet werden, für die zuvor bereits die Wigner-Funktion diskutiert wurde. Für vollständig lokalisierte Zustände im Orts und Impulsraum bildet die Husimi-Funktion gauß-förmige Streifen, da bei der Faltung eines Zustands minimaler Unschärfe $|x, k\rangle$ mit einer δ -Funktion die Gauß-Kurve erhalten bleibt. Die Breite der Streifen ist dabei wiederum durch σ im Ortsraum und $1/2\sigma$ im Impulsraum gegeben.

Interessanter wird der Fall eines bei zwei Wellenzahlen $-k_0$ und k_0 lokalisierten Zustands (3.7). Für die Husimi-Funktion ergibt sich in diesem Fall:

$$\rho(x, k) = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \exp[-2\sigma^2(k - k_0)^2] + \exp[-2\sigma^2(k + k_0)^2] + 2 \exp[-2\sigma^2(k^2 + k_0^2)] \cos(2k_0 x) \right\}. \quad (3.14)$$

Im Vergleich zur Wigner-Funktion (3.8) sind die Oszillationen bei $k = 0$ durch die Gaußsche Verschmierung exponentiell unterdrückt. Zudem ist die Funktion niemals negativ und überall differenzierbar – es treten keine δ -Funktionen mehr auf.

In Abbildung 3.3 ist die Husimi-Funktion für den selben Zustand dargestellt, von dem zuvor die Wigner-Funktion in Abbildung 3.1 gezeigt wurde. Die Husimi-Funktion wurde hierbei nicht aus der Wigner-Funktion gemäß (3.9) bestimmt, sondern mittels (3.11) direkt aus der Wellenfunktion. Dadurch werden die Probleme bei der Approximation des Problems auf einem Gitter, wie sie bei der Wigner-Funktion diskutiert wurden, umgangen. Insbesondere ist es möglich, für den Zustand (3.7) das analytische Verhalten (3.14) zu reproduzieren. Allein bei der Approximation

von Gauß-Integralen durch Summen auf einem Gitter in (3.11) treten gewisse Fehler durch die Diskretisierung sowie das Abschneiden der exponentiell abfallenden Gauß-Kurven für endliche Probleme auf. Für $\sigma = \sqrt{L/4\pi}$ sind diese Fehler aber bereits bei einer Systemgröße $L = 12$ deutlich unterhalb 1% und fallen exponentiell mit L sehr schnell weiter ab. In der folgenden Arbeit werden Daten ab $L = 14$ verwandt, wofür die Gitterapproximation bereits hinreichend gut ist.

Obwohl die Husimi-Funktion niemals negativ wird, treten sehr wohl Nullstellen auf. Es stellt sich heraus, dass diese Husimi-Nullstellen bei der semiklassischen Behandlung von Problemen große Bedeutung besitzen. Sind die Nullstellen eines Quantenzustands ungeordnet über den ganzen Phasenraum verteilt, ist die zugehörige klassische Dynamik chaotisch [46, 47]. Dagegen lassen Nullstellen, die auf regelmäßigen Linien angeordnet sind, auf integrable klassische Dynamik schließen. Darüber hinaus ist die Husimi-Funktion bereits vollständig durch die Lage ihrer Nullstellen bestimmt. Die Weierstrass-Hadamard-Faktorisierung beschreibt die Husimi-Funktion als Produkt ihrer Nullstellen [46], wobei in dieser Arbeit eine etwas andere Definition der Husimi-Funktion verwandt wird, die nur für $L \gg \sigma$ mit der hier diskutierten Variante übereinstimmt.

Bei der Approximation der Husimi-Funktion auf einem Gitter werden die Nullstellen nur näherungsweise erreicht. Auch wenn die Husimi-Nullstellen in der folgenden Arbeit nicht weiter von Bedeutung sein werden, sei hier aber trotzdem auf die Abbildung auf der Titelseite hingewiesen. Im Vergleich zu Abbildung 3.3 wurde dort zusätzlich die Phase der komplexen Zahl in einer Farb- beziehungsweise Graustufenskala kodiert, die sich bei der Projektion der Wellenfunktion auf den kohärenten Zustand $|x, k\rangle$ ergibt. Interessanterweise ist diese Phase nicht translationsinvariant, die Husimi-Funktion selbst hingegen schon. Ist ein Punkt in dieser Darstellung der Husimi-Funktion von einer Phase von 2π umschlossen, ist eine Nullstelle zweifelsfrei identifiziert.

3.2 Lokalisierungsmaße

Der Vereinfachung der Schreibweise halber wurde bei der Einführung der Phasenraumgrößen bisher stets nur der eindimensionale Fall behandelt. Tatsächlich lassen sich die zuvor angegebenen Formeln aber auch in höherdimensionale Räume verallgemeinern. Abgesehen von der Anpassung der Vorfaktoren sind lediglich die angegebenen Integrale auf entsprechend höherdimensionale Räume umzuschreiben. Die bisher auftretenden Produkte zwischen skalaren Größen werden durch Skalarprodukte ersetzt. Allerdings ist ein weiterer Effekt bei der Behandlung höherdimensionaler Probleme, dass sich der Phasenraum nicht mehr einfach darstellen lässt. Neben der visuellen Behandlung des Lokalisierungsphänomens im Phasenraum wird deshalb eine quantitative Analyse notwendig, die die erhebliche Datenintensität einer vollen Phasenraumverteilung reduziert. Dazu sollen Lokalisierungsmaße diskutiert werden.

3.2.1 Inverse Besetzungszahl im Phasenraum

Da die Husimi-Funktion niemals negativ wird, können viele der Konzepte aus der klassischen Phasenraumanalyse auf das quantenmechanische Problem übertragen werden. Eine Möglichkeit stellt dabei die so genannte Wehrl-Entropie dar:

$$S = - \int \frac{dx dk}{2\pi} \rho(x, k) \ln[\rho(x, k)]. \quad (3.15)$$

Diese wurde beispielsweise bereits verwandt, um die Phasenraumeigenschaften eines getriebenen Rotors zu diskutieren [48]. Das Modell eines getriebenen Rotors kann seinerseits auf ein eindimensionales Anderson-Modell abgebildet werden [49], was ursprünglich eine Motivation für das direkte Studium des Anderson-Modells im Phasenraum dargestellt hat [8]. Allerdings sind die Phasenräume, die sich beim getriebenen Rotor ergeben und die des damit in Verbindung gebrachten Anderson-Modells von verschiedenen Koordinaten aufgespannt.

Die Verwendung der Wehrl-Entropie zur Analyse des Phasenraums ergibt aber eine recht komplizierte Struktur in Bezug auf die Husimi-Funktion. Insbesondere lassen sich die Mehrfachintegrale nicht zusammenfassen, wenn man die Definition der Husimi-Funktion auf der Grundlage der Wellenfunktion gemäß (3.11) einsetzt. Das bedeutet wiederum, dass man zur Berechnung der Wehrl-Entropie eines Zustands zunächst die volle Husimi-Funktion ermitteln muss.

Eine Abhilfe schafft die Linearisierung von $\ln x$ durch $1 - x$. Da die Husimi-Funktion selbst normiert ist, bleibt als relevanter Term das Integral:

$$P = \int \frac{dx dk}{2\pi} [\rho(x, k)]^2. \quad (3.16)$$

Die Größe P wird Inverse Besetzungszahl im Phasenraum genannt. Mittels Gleichung (3.11) ergibt sich nun [9, 50, 51]:

$$P = \frac{1}{8\sqrt{\pi}\sigma} \int du \left| \int dv \psi\left(\frac{u-v}{2}\right) \psi\left(\frac{u+v}{2}\right) \exp\left(-\frac{v^2}{8\sigma^2}\right) \right|^2 \quad (3.17)$$

Es sollte angemerkt werden, dass hierbei für endliche Systemgrößen nochmals eine Approximation durch Abschneiden exponentiell abfallender Gauß-Kurven durchgeführt wird. Deshalb unterscheiden sich die Ergebnisse nach (3.16) und (3.17) auf einem Gitter geringfügig. Ähnlich wie die bereits diskutierten Abweichungen in der Husimi-Funktion durch die Gitterapproximation selbst werden auch diese Unterschiede mit zunehmender Systemgröße exponentiell klein und sind im Rahmen der hier angestellten Betrachtungen für Systemgrößen ab $L = 14$ nicht mehr von Bedeutung.

Erheblich größer ist natürlich der Unterschied zwischen der Wehrl-Entropie S und ihrer linearisierten Version P , auch wenn sie sich in ihrem qualitativen Verhalten zunächst gleichen [52, 53]. Tatsächlich kann man die Unterschiede im Detail

diskutieren [54, 55], aber im Rahmen dieser Arbeit spielen diese Überlegungen eine untergeordnete Rolle. Viel entscheidender ist die enorme Vereinfachung, die sich durch die Linearisierung ergibt, da sie die Betrachtung größerer Systeme ermöglicht, was im Fall dieser Arbeit überhaupt erst ermöglicht, den Anderson-Übergang in drei Dimensionen zu untersuchen.

3.2.2 Inverse Besetzungszahl im Orts- und Impulsraum

Es bleibt noch die Frage, warum die zuvor eingeführte Größe P als Inverse Besetzungszahl bezeichnet wird. Das ergibt sich aufgrund der Analogie zur bekannten Inversen Besetzungszahl [2] im Ortsraum. Diese ist definiert durch:

$$P_x = \int dx |\psi(x)|^4. \quad (3.18)$$

Eine analoge Größe lässt sich auch im Impulsraum definieren:

$$P_k = \int \frac{dk}{2\pi} |\tilde{\psi}(k)|^4. \quad (3.19)$$

Diese Besetzungszahlen geben an, wie verteilt ein Zustand in der entsprechenden Basis ist. Vollständig lokalisierte Zustände in dieser gewählten Basis besitzen eine Inverse Besetzungszahl von Eins. Für vollständig delokalisierte, konstante Zustände tritt in endlichen Hilbert-Räumen das Inverse der Basisgröße auf, in unendlich-dimensionalen Hilbert-Räumen entsprechend Null. Die zur Inversen Besetzungszahl reziproke Größe, also die Besetzungszahl selbst, gibt somit im wahrsten Sinne des Wortes eine Anzahl von besetzten Basiszuständen an, wie sich an weiteren Beispielen mit gleichmässiger Besetzung einiger Gitterplätze weiter diskutieren lässt. Der Begriff der Besetzung wird dabei immer im Sinne des Betragsquadrats der Projektion der Wellenfunktion auf die Basiszustände verstanden – in der Darstellung der Wellenfunktion in dieser Basis also durch das Betragsquadrat der Wellenfunktion. Damit wird auch die ungleichmässige Besetzung von Basiszuständen erfasst, so dass beispielsweise ein weniger stark besetzter Basiszustand einen kleineren Beitrag im Rahmen der Besetzung eines gegebenen Zustands liefert.

Das Konzept der Inversen Besetzungszahl ist insbesondere im Ortsraum schon seit Jahrzehnten wohl etabliert. An dieser Größe lässt sich nämlich bereits untersuchen, ob ein Zustand lokalisiert oder delokalisiert ist [2]. Darüber hinaus ist die Inverse Besetzungszahl im Ortsraum P_x auch als Rückkehrwahrscheinlichkeit bei diffusiver Dynamik interpretierbar [56]. Dies folgt direkt durch Auswertung der Greensfunktion für die Rückkehr eines Teilchens nach unendlicher Zeit im Mittel über alle Gitterplätze, wobei dann auch automatisch eine Mittelung der inversen Besetzungszahl über alle Zustände erfolgt.

Bereits zu Beginn dieses Kapitels wurde die Symmetrie zwischen Ortsraum und Impulsraum bei der Diskussion von Lokalisierungsübergängen in ungeordneten Sys-

temen motiviert. Daher ist die analoge Einführung der Inversen Besetzungszahl im Impulsraum P_k nur konsequent. Genauso gut kann aber statt der Projektion auf eine Basis auch die Projektion auf die Zustände minimaler Unschärfe im Phasenraum $|x, k\rangle$ als Grundlage einer Inversen Besetzungszahl genutzt werden. In der Tat offenbart Gleichung (3.16) gemeinsam mit (3.12) diese Analogie. Aufgrund der Normierung der Husimi-Funktion würde einem Punkt im Phasenraum somit eine Besetzungszahl $P = 1$ entsprechen. Dieser Fall ist aber mit der Heisenbergschen Unschärferelation unvereinbar. Berechnet man die Inverse Besetzungszahl eines Zustands minimaler Unschärfe, entsteht unabhängig der Systemgröße L und dem gaußschen Verschmierungsparameter σ der Wert $P = 1/2$. Eine stärkere Lokalisierung kann in der Husimi-Funktion nicht auftreten.

Vollständig lokalisierte Zustände im Orts- oder Impulsraum, zu denen gaußförmige Streifen der Husimi-Funktion gehören, führen hingegen zu dem Wert $P = 1/\sqrt{L}$. Die Symmetrie zwischen Ort und Impuls ist eine Folge der Wahl $\sigma = \sqrt{L}/4\pi$, die sich aus der Forderung nach identischer relativer Auflösung in Orts- und Impulsrichtung ergeben hat. Für zwei ausreichend separierte Streifen gemäß (3.14) entsteht ganz entsprechend der Interpretation als Inverse Besetzungszahl der Wert $P = 1/2\sqrt{L}$.

Im Rahmen einer Störungstheorie werden die Eigenschaften der Inversen Besetzungszahlen in den verschiedenen Räumen später noch detaillierter zueinander in Beziehung gesetzt. Zunächst ist nun aber ein guter Zeitpunkt gekommen, mit der Phasenraumanalyse der ungeordneten Systeme im Detail zu beginnen.

4 Phasenraumanalyse ungeordneter Systeme

In den vorherigen Kapiteln wurden Modelle und Methoden angegeben, die eine neuartige Analyse von Metall-Isolator-Übergängen in ungeordneten Festkörpern erlauben. Diese Untersuchungen sollen mit eindimensionalen Modellen beginnen, in denen es möglich ist, den Phasenraum vollständig darzustellen. Durch den Vergleich eines Modells ohne Phasenübergang mit einem Modell, das einen solchen Phasenübergang zeigt, können dabei bereits interessante Effekte beobachtet werden, die Phasenraumkonzepte im Studium von Metall-Isolator-Übergängen offen legen [8, 9, 10, 11, 12, 13, 57]. Diese visuelle Erfahrung kann mit der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum effizient quantitativ erfasst werden, was mit einer störungstheoretischen Betrachtung fundiert wird [13]. Damit ergibt sich die Möglichkeit, höherdimensionale [9] und auch wechselwirkende Probleme zu diskutieren.

4.1 Visualisierung des Phasenraumverhaltens

Da der Phasenraum eines d -dimensionalen Einteilchenproblems $2d$ -dimensional ist, sind graphische Darstellungen des kompletten Phasenraums nur bei eindimensionalen Problemen möglich. Bereits bei der Einführung der Wigner-Funktion und der Husimi-Funktion im vorherigen Kapitel wurden in den Abbildungen 3.1 und 3.3 Beispiele für einen Zustand im eindimensionalen Anderson-Modell gezeigt. Die Husimi-Funktion ist dabei besonders einfach deutbar, da sie gemäß (3.12) den Betragsquadraten der Projektionen des Zustands auf Zustände minimaler Unschärfe im Phasenraum entspricht. Im Vergleich zur Wigner-Funktion ist die Husimi-Funktion deshalb niemals negativ und weist auch keine großen Oszillationen aufgrund von Interferenzen auf.

Allerdings ist eine dreidimensionale Darstellung der Husimi-Funktion wie in Abbildung 3.3 nicht optimal, denn durch die Perspektive werden Teile der Funktion verdeckt und ein möglichst quantitatives Erfassen der Daten erschwert. Besser ist eine unverzerrte zweidimensionale Darstellung des Phasenraums selbst und Kodierung der Husimi-Funktion in einer Farb- beziehungsweise Graustufenskala. Abbildung 4.1 zeigt die gleichen Daten aus Abbildung 3.3 in dieser Form. Es sollte beachtet werden, dass die rechts in Abbildung 4.1 angegebene Skala deutlich nicht-linear in den Funktionswerten der Husimi-Funktion ist, was durch die Verwendung

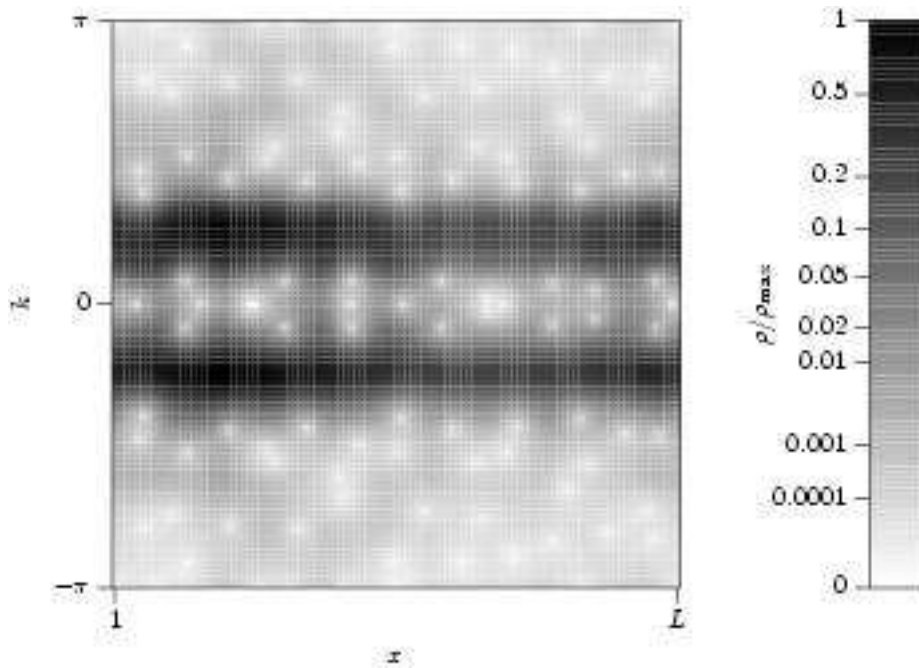


Abbildung 4.1: Beispiel der Husimi-Funktion anhand eines Zustands im eindimensionalen Anderson-Modell bei geringer Unordnungsstärke. Es wurden die selben Daten wie in Abbildung 3.3 dargestellt.

einer fünften Wurzel erreicht wurde. Dadurch werden Feinheiten in der Struktur der Husimi-Funktion erheblich besser sichtbar.

Die Abbildung 4.1 deutet auf eine Symmetrie der Husimi-Funktion bezüglich der $k = 0$ -Achse hin. Diese Symmetrie ergibt sich für alle Wellenfunktionen, die abgesehen von einer globalen komplexen Phase rein reell sind. Eben diese Eigenschaft ist für die Energieeigenzustände des Anderson-Modells ohne Magnetfeld und des Aubry-André-Modells gegeben, da die auftretenden Hamilton-Operatoren reell sind. Statt des vollen Phasenraumes genügt es deshalb, die Abbildungen der Husimi-Funktion auf nichtnegative Wellenzahlen zu beschränken, da sich der andere Teil des Phasenraumes durch die Spiegelsymmetrie $\rho(x, k) = \rho(x, -k)$ ergibt.

In Abbildung 4.2 sind Husimi-Funktionen des eindimensionalen Anderson-Modells und des Aubry-André-Modells für unterschiedliche Potentialstärken gegenübergestellt. Die Farb- beziehungsweise Graustufenskala wurde wie in Abbildung 4.1 gewählt, wobei über alle Teilbilder hinweg einheitlich der insgesamt maximal aufgetretene Wert für ρ_{\max} verwendet wurde. Dieser hat sich für die dargestellten Fälle im eindimensionalen Anderson-Modell bei $W = 1.6$ ergeben, wo gleichzeitig die Lokalisierung im Phasenraum am stärksten ist. Doch bevor das Verhalten für mittlere Potentialstärke behandelt wird, ist es sinnvoll, die leichter verständlichen Grenzfälle geringer und hoher Potentialstärke zu diskutieren.

Wie bereits bei der Motivation der Phasenraumuntersuchungen angedeutet wurde, besteht eine Stärke von Phasenraummethoden darin, dass gleichzeitig Orts-

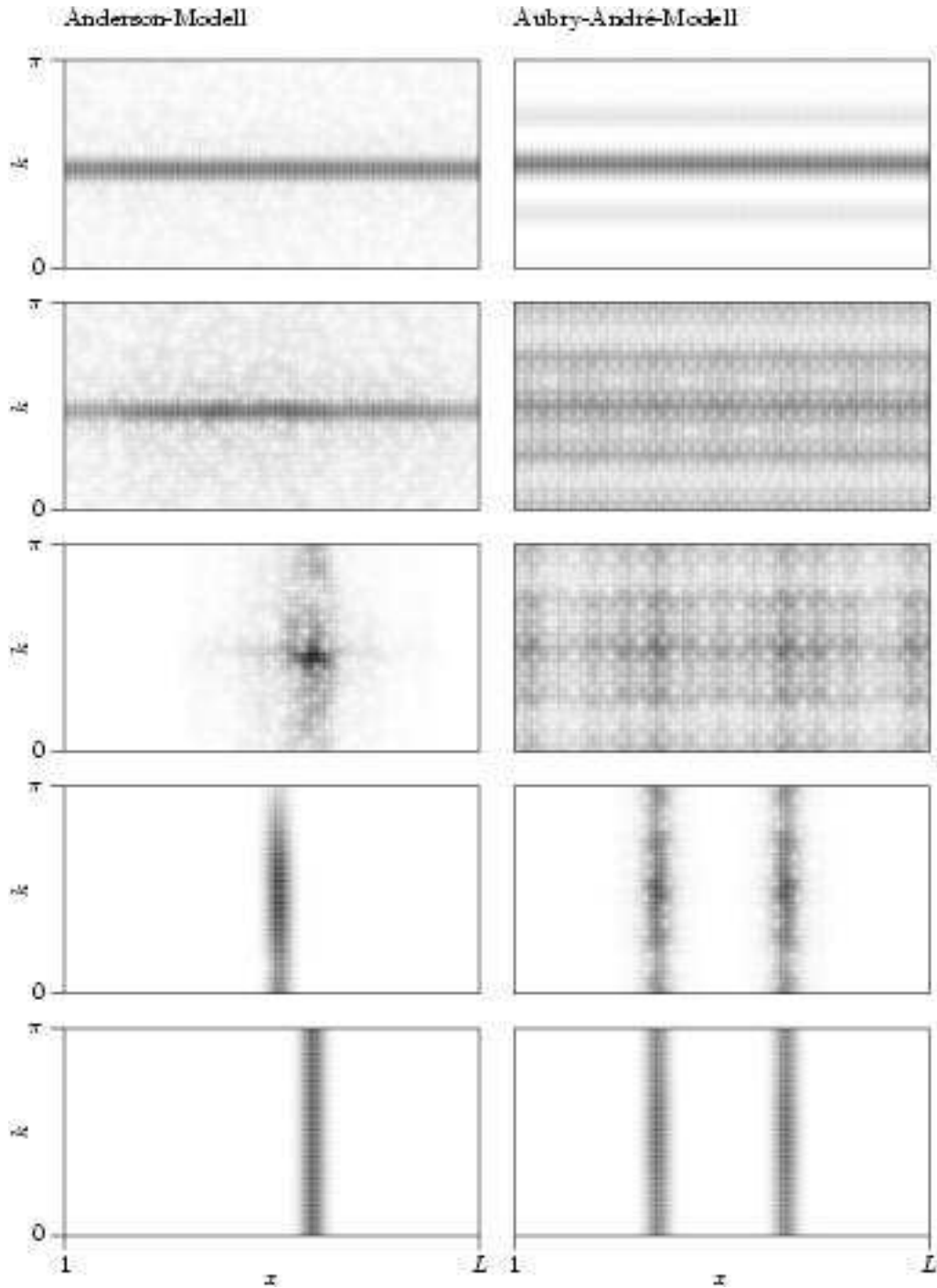


Abbildung 4.2: Beispiele für Husimi-Funktionen im eindimensionalen Anderson-Modell (links) und im Aubry-André-Modell (rechts) für einen Zustand aus der Bandmitte bei einer Systemgröße von $L = 987$. Im Anderson-Modell wurden die Unordnungsstärken $W = 0.05, 0.3, 1.6, 8, 25$ gewählt, im Aubry-André-Modell lauten die verwendeten Potentialstärken $\lambda = 0.05, 1.8, 2, 2.2, 4$ (jeweils von oben nach unten).

und Impulsinformationen ausgewertet werden. Somit lässt sich der Übergang von lokalisierten Zuständen bei festen Impulsen im Fall ballistischer Bewegung hin zu im Ort lokalisierten Zuständen beobachten, wie sie für große Unordnungspotentiale auftreten. Genau dieses Verhalten findet sich übereinstimmend sowohl im Anderson-Modell wie auch im Aubry-André-Modell für entsprechend kleine beziehungsweise große Potentialstärken. Dort treten Streifen im Phasenraum auf, die die Lokalisierung bei bestimmten Impulsen beziehungsweise Orten angeben, wobei die jeweils konjugierte Koordinate entsprechend unbestimmt ist. Die Breite der Streifen entsteht durch die endliche Auflösung der Husimi-Funktion im Phasenraum, wie es in Zusammenhang mit der Wahl des Parameters σ im vergangenen Kapitel diskutiert wurde. Die Systemgröße L wurde in diesem Zusammenhang gegenüber Abbildung 4.1 um etwa eine Größenordnung vergrößert, damit eine höhere relative Auflösung im Phasenraum erreicht wird.

Im Grenzfall verschwindender Potentialstärke ergeben sich sowohl im eindimensionalen Anderson-Modell wie auch im Aubry-André-Modell zwei horizontale Streifen bei den Wellenzahlen k und $-k$. Die zugehörigen ebenen Wellen sind nämlich aufgrund der Dispersionsrelation entartet, wie in Abbildung 2.1 zu sehen ist. Durch die Forderung reeller Wellenfunktionen werden diese beiden ebenen Wellen zu gleichen Teilen überlagert. In Abbildung 4.2 ist dieser Umstand unter Ausnutzung der Spiegelsymmetrie nur nicht explizit dargestellt.

Für große Potentialstärken ergeben sich hingegen nur im Aubry-André-Modell zwei vertikale Streifen aufgrund der Symmetrie des Potentials. Die Zerlegung in Tabelle 2.1 zeigt, dass jede beliebige Energieeigenfunktion zur Klasse der im Ort symmetrischen oder antisymmetrischen Wellenfunktionen gehört, wobei im allgemeinen keine Entartungen auftreten. In Abbildung 4.2 wurde übrigens ein symmetrischer Zustand verwendet, aber antisymmetrische Zustände verhalten sich in diesem Zusammenhang gleich. Abgesehen von dieser Spezialität des Aubry-André-Modells findet im Grenzfall unendlicher Potentialstärke sowohl im Anderson-Modell wie auch im Aubry-André-Modell vollständige Lokalisierung der Zustände auf einzelnen Gitterplätzen statt, so dass im Anderson-Modell ein Streifen auftritt und im Aubry-André-Modell hingegen derer zwei.

Darüber hinaus unterscheiden sich die beiden Modelle in ihrem Phasenraumverhalten für mittlere Potentialstärke aber erheblich. Während im eindimensionalen Anderson-Modell eine Lokalisierung im Phasenraum beobachtet wird, ist im Aubry-André-Modell ein genau gegenläufiger Effekt zu beobachten, nämlich eine Delokalisierung im Phasenraum unterhalb des Dualitätspunktes in der Potentialstärke $\lambda = 2$. Man könnte nun zunächst annehmen, dass diese Beobachtung zufällig aufgrund der speziellen Wahl der Zustände und/oder der Unordnung des Anderson-Modells entstanden ist. Um dies genauer zu studieren, kann man im Grunde viele solche Darstellungen errechnen und auf Gemeinsamkeiten hin untersuchen. Dazu ist es natürlich sinnvoll, Eigenschaften der Husimi-Funktion in geeigneten einzelnen Kenngrößen festzuhalten, die sich viel leichter systematisch untersuchen lassen.

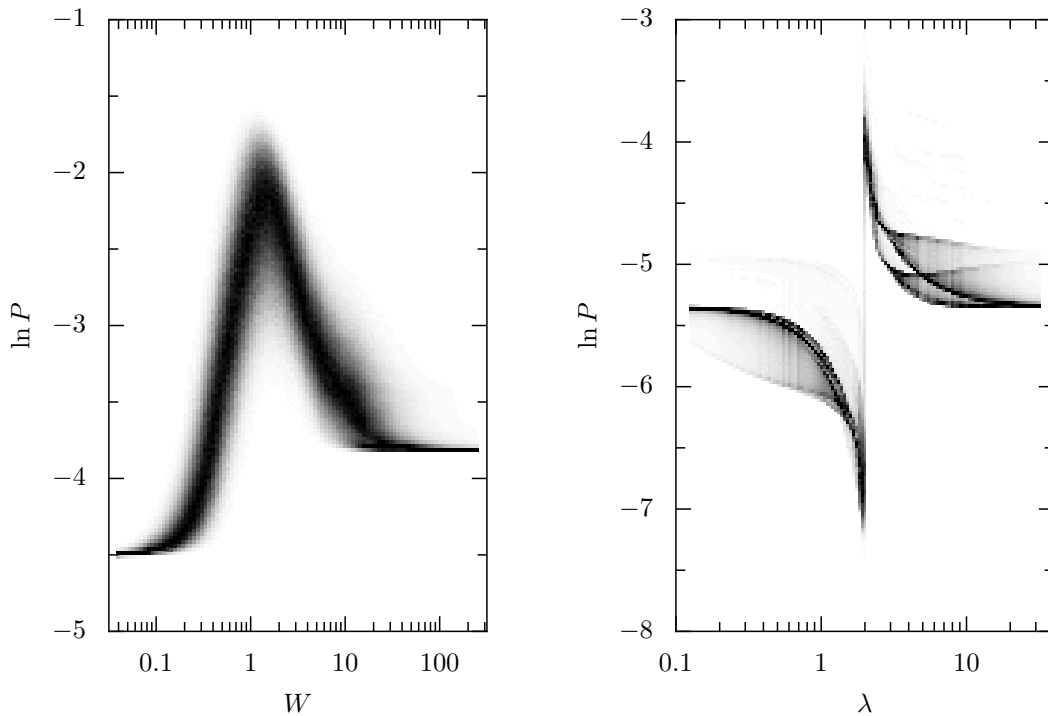


Abbildung 4.3: Graustufen-Darstellung der Verteilungen des Logarithmus der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum P als Funktion der Potentialstärke. Für das eindimensionale Anderson-Modell (links) wurde die Systemgröße $L = 2048$ benutzt. Die Verteilung entstand durch Verwendung der Hälfte aller Energieeigenzustände um die Bandmitte herum sowie 50 verschiedene Unordnungsrealisierungen. Im Aubry-André-Modell (rechts) wurde die Systemgröße $L = 10946$ benutzt. Für die Verteilung wurden hier alle antisymmetrischen Wellenfunktionen verwendet.

4.2 Inverse Besetzungszahl im Phasenraum

Abbildung 4.3 zeigt Verteilungen der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum P als Funktion der Potentialstärke. Wie bei der Einführung dieser Größe im vorigen Kapitel diskutiert wurde, stellt sie ein Maß für die Besetzung des Phasenraums dar. Große Inverse Besetzungszahlen entsprechen dabei einer flächenmäßig kleinen Ausdehnung des Zustands im Phasenraum. Um die große Dynamik der Besetzungszahlen besser wiederzugeben, werden in diesem Zusammenhang logarithmische Darstellungen verwendet.

Die Verteilungen, die in Abbildung 4.3 zu sehen sind, wurden durch Mittelung über verschiedene Zustände erzeugt, um ein generelles Bild des Verhaltens der Energieeigenzustände zu bekommen. Im Anderson-Modell ergibt sich die Gelegenheit, verschiedene Unordnungsrealisierungen zu verwenden, um nicht von Eigenheiten einer speziellen Realisierung irre geleitet zu werden. Zudem bietet sich die Verwendung verschiedener Energieeigenzustände aus der selben Unordnungsrealisierung an, wodurch sich der numerischen Aufwand der Diagonalisierung erheblich besser

ausnutzen lässt. Dabei ist allerdings zu beachten, dass sich die Lokalisierungseigenschaften im Anderson-Modell als Funktion der Position im Energiespektrum ändern. Dieser Sachverhalt wurde bereits bei der Einführung des Anderson-Modells angesprochen. Als Konsequenz muss man sich bei der Auswahl der Zustände, die für die Auswertung hinzugezogen werden, genügend stark einschränken, damit sich die Lokalisierungseigenschaften der betrachteten Zustände noch ausreichend gut ähneln. Am besten wird das in der Bandmitte erreicht, so dass dort ein recht großer Bereich von Zuständen benutzt werden kann.

Im Aubry-André-Modell ist die Verwendung verschiedener Energieeigenzustände sogar die einzige Möglichkeit, um zu verhindern, dass spezifische Eigenschaften einzelner Zustände zu entsprechend falschen allgemeinen Aussagen uminterpretiert werden. In diesem Fall gibt es nämlich für eine feste Systemgröße nur eine Realisierung des quasiperiodischen Potentials, falls man die Eigenschaften der Quasiperiodizität konstant halten will. Andererseits sind die Lokalisierungseigenschaften des Modells nicht von der Energie der Zustände im Spektrum abhängig, so dass nichts dagegen spricht, hier alle Zustände zu verwenden. Die Abbildung beschränkt sich aber auf alle antisymmetrischen Zustände, da auf die Weise nur der entsprechende Teil-Hamilton-Operator gemäß Tabelle 2.1 diagonalisiert werden muss. Für die symmetrischen Zustände sieht das Bild allerdings ganz ähnlich aus.

Auf den ersten Blick scheinen die beiden Teilbilder von Abbildung 4.3 für die beiden Modelle sehr verschieden. Das liegt in hohem Maße an den Verteilungen, die sehr unterschiedlich breit sind und einen sehr verschiedenen visuellen Eindruck zur Folge haben. Während das Zufallspotential im Anderson-Modell eine große Streuung in den Inversen Besetzungszahlen hervorruft, verhält sich das Aubry-André-Modell aufgrund des analytisch bestimmten Potentials in dieser Hinsicht sehr viel systematischer. Diese Feinheiten werden zu einem späteren Zeitpunkt aufgegriffen, während im Moment neben dem visuellen Eindruck der Verteilungen zunächst vor allem das Verhalten der Mittelwerte diskutiert werden soll. Anhand der Verteilungen kann man in diesem Zusammenhang jedoch insbesondere verifizieren, dass dabei keine Artefakte aufgrund der Mittelwertbildung diskutiert werden, sondern generische Eigenschaften der Zustände zugrunde liegen.

Zunächst seien wieder die Grenzfälle verschwindenden und unendlichen Potentials diskutiert. Hier ist auffällig, dass die Verteilungen sehr schmal werden, was bedeutet, dass P für alle Zustände den selben Wert annimmt. Das folgt unmittelbar aus der schon diskutierten Tatsache, dass die Husimi-Funktion in diesen Grenzfällen durch Streifen im Phasenraum beschrieben wird. Da sich die Lage der Streifen nicht im Besetzungsmaß P niederschlägt, ergibt sich immer derselbe Wert. Dabei sind aber die Fälle zweier Streifen auszunehmen, falls sich diese überlappen. Solche Fälle unterscheiden sich dann in ihrem Besetzungsmaß gegenüber wohlseparierten Streifen. Für zunehmende Systemgröße werden diese Ausnahmen aber immer unbedeutender, weil ihre Anzahl relativ zur Gesamtzahl der Zustände immer kleiner wird. Das liegt daran, dass die Breite der Streifen relativ zur Größe des Phasenraums für zunehmende Systemgröße abnimmt.

Bereits bei Abbildung 4.2 wurde die Anzahl der Streifen aufgrund von Symmetrien im Problem erläutert. Demnach treten beim Aubry-André-Modell sowohl im Fall verschwindender wie auch unendlicher Potentialstärke zwei Streifen auf, im ersten Grenzfall bei bestimmten Wellenzahlen, im zweiten Fall bei bestimmten Orten. Da die Auflösung in diesen beiden Phasenraumrichtungen gleich gewählt wurde, sind auch die Besetzungszahlen für diese Streifen gleich. Im Anderson-Modell tritt hingegen im Grenzfall unendlicher Unordnungsstärke nur ein Streifen auf, während für verschwindende Unordnung wie im Aubry-André-Modell zwei Streifen vorhanden sind. Demnach ist die Besetzung des Phasenraums für große Unordnungsstärke gegenüber dem Fall ohne Unordnung halbiert. Für die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum, die genau diesen Sachverhalt reziprok abbildet, ergibt sich deshalb für das eindimensionale Anderson-Modell im Grenzfall großer Unordnung ein um den Faktor 2 größerer Wert als für verschwindende Unordnung.

Für mittlere Potentialstärken ist der Unterschied zwischen den beiden Modellen hingegen fundamental. Beim Anderson-Modell wird für zunehmende Unordnungsstärke zunächst ein Anwachsen der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum beobachtet. Nach einem Scheitel fällt der Wert anschließend wieder ab. Wie schon Abbildung 4.2 an einem einzelnen Beispiel vermutet ließ, ergibt sich hier offensichtlich generell eine Lokalisierung der Zustände im Phasenraum für mittlere Unordnungsstärke.

Im Aubry-André-Modell ist das Verhalten bei geringer Unordnung dagegen grundverschieden. Zunächst fällt nämlich die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum mit zunehmender Potentialstärke. Darauf folgend ist ein Bereich um den Selbstdualitätspunkt $\lambda = 2$ zu beobachten, in dem die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum sehr schnell zu sehr großen Werten anwächst. Von da an ist das mittlere Verhalten vergleichbar mit dem des Anderson-Modells. Allerdings werden im Aubry-André-Modell gewisse zusätzliche Strukturen in den Verteilungen deutlich, die an späterer Stelle noch aufgegriffen werden. Zunächst soll aber ein direkter Vergleich mit dem Verhalten im Ortsraum und im Impulsraum angestellt werden, denn bisher ist überhaupt nicht klar, ob die Phasenraumanalyse überhaupt zu Erkenntnissen führt, die auf andere und insbesondere einfachere Weise nicht auch schon verfügbar sind.

4.3 Inverse Besetzungszahl im Orts- und Impulsraum

In Abbildung 4.4 ist die Inverse Besetzungszahl im Ortsraum P_x dargestellt, wobei die selbe Auftragung wie in der vorangegangenen Abbildung 4.3 verwendet wurde. Die Abbildung 4.4 zeigt, dass die Inverse Besetzungszahl sowohl im Anderson-Modell wie auch im Aubry-André-Modell bei geringer Unordnungsstärke klein ist und für große Unordnungsstärke maximal wird. Beim Anderson-Modell nähert sich P_x dabei dem Wert Eins an, was die Lokalisierung auf einem einzigen Gitterplatz anzeigt. Im Aubry-André-Modell tritt hingegen an dieser Stelle der Wert $1/2$ auf, was unter Berücksichtigung der Symmetrie des Problems ebenfalls maximaler Lo-

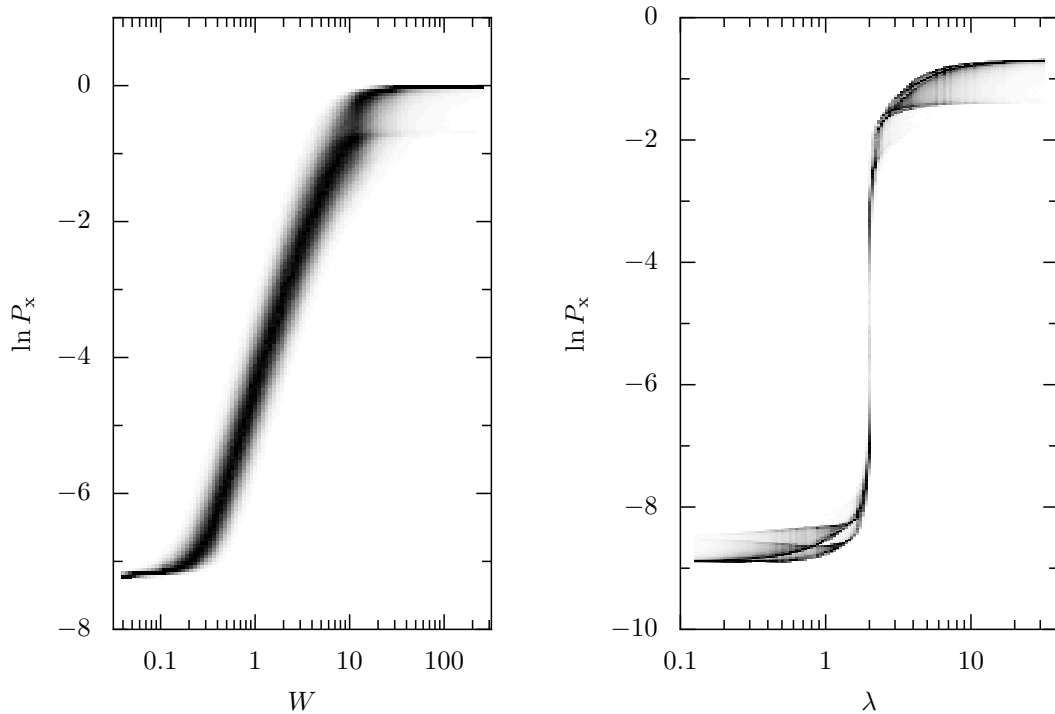


Abbildung 4.4: Graustufen-Darstellung der Verteilungen des Logarithmus der Inversen Besetzungszahl im Ortsraum P_x als Funktion der Potentialstärke. Die Teilbilder für das eindimensionale Anderson-Modell (links) und das Aubry-André-Modell (rechts) wurden aus den selben Energieeigenzuständen erzeugt, die auch in Abbildung 4.3 verwendet wurden.

kalisierung entspricht.

Sieht man allerdings von den Grenzfällen und auch den feineren Strukturen insbesondere in der Verteilung beim Aubry-André-Modell ab, ist dennoch ein augenscheinlich erheblicher Unterschied in Abbildung 4.4 zu beobachten. Der Wechsel von ebenen Wellen hin zu lokalisierten Zuständen verläuft beim eindimensionalen Anderson-Modell ausgesprochen kontinuierlich, während beim Aubry-André-Modell ein sehr viel plötzlicheres Umschlagen des Verhaltens im Bereich um den Punkt der Selbstdualität $\lambda = 2$ zu verzeichnen ist. Das liegt darin begründet, dass das Aubry-André-Modell im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ an dieser Stelle einen Phasenübergang zeigt. Der fundamentale Unterschied zwischen den beiden Modellen, wie er sich im Phasenraum in Abbildung 4.3 ergibt, erscheint jedoch aus dem Ortsraumverhalten allein nicht erklärbar. Deshalb soll zusätzlich noch der Impulsraum herangezogen werden, der in der Phasenraumdarstellung gleichberechtigt zum Ortsraum auftritt.

In Abbildung 4.5 ist die Inverse Besetzungszahl im Impulsraum P_k in einer Auftragung analog zu den Abbildungen 4.3 und 4.4 zu sehen. Der Vergleich mit der Inversen Besetzungszahl im Ortsraum aus Abbildung 4.4 zeigt eindrucksvoll das komplementäre Verhalten zwischen Ortsraum und Impulsraum. Eine vollständige

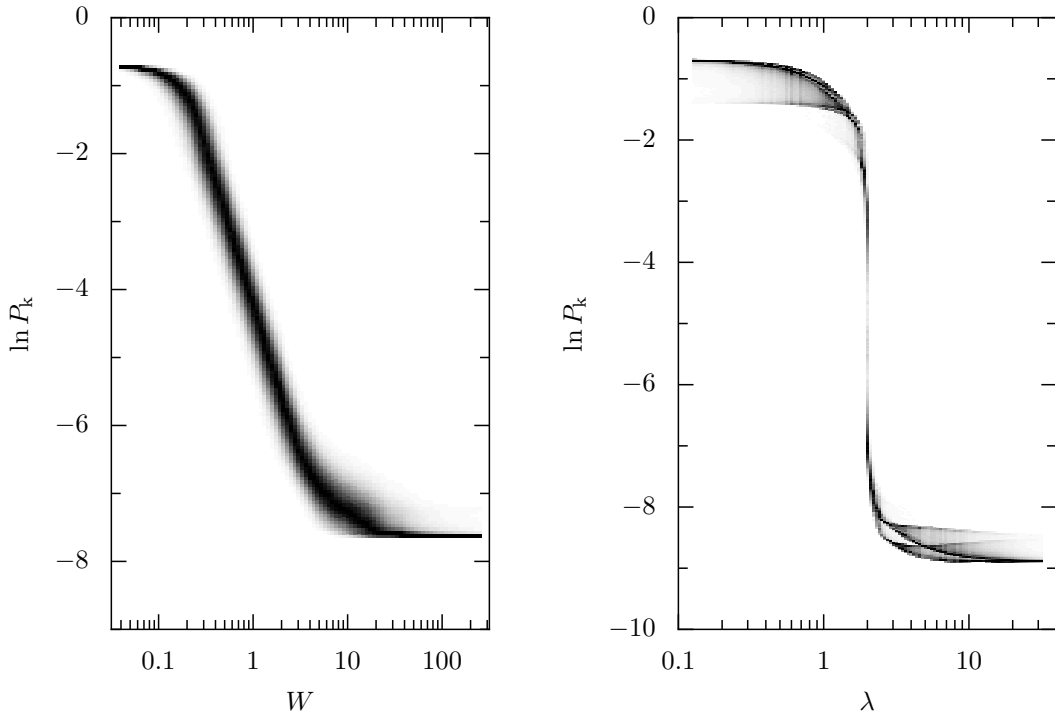


Abbildung 4.5: Graustufen-Darstellung der Verteilungen des Logarithmus der Inversen Besetzungszahl im Impulsraum P_k als Funktion der Potentialstärke. Die Teilbilder für das eindimensionale Anderson-Modell (links) und das Aubry-André-Modell (rechts) wurden aus den selben Energieeigenzuständen erzeugt, die auch in Abbildung 4.3 verwendet wurden.

Lokalisierung in dem einen Raum bedingt eine entsprechende Delokalisierung im anderen Raum. Die Komplementarität ist beim Aubry-André-Modell sogar analytisch in den Inversen Besetzungszahlen im Orts- und Impulsraum. Mittels Dualitätstransformation ergibt sich nämlich für die einzelnen, mit dieser Transformation verknüpften Zustände und somit auch für das Ensemble aller Zustände die folgende Äquivalenz:

$$P_x(\lambda) = P_k(4/\lambda). \quad (4.1)$$

Da in den Abbildungen 4.4 und 4.5 eine logarithmische Achse für die Potentialstärke verwendet wurde, gehen die rechten Teilbilder, die P_x und P_k für das Aubry-André-Modell zeigen, direkt durch Spiegelung am Selbstdualitätspunkt $\lambda = 2$ auseinander hervor.

Nachdem nun auch das Verhalten der Inversen Besetzungszahl im Ortsraum und im Impulsraum angegeben wurde, bietet sich der Vergleich dieser Ergebnisse mit der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum an. Beim eindimensionalen Anderson-Modell erscheint das auf den ersten Blick wenig problematisch. Für geringe Unordnungsstärke könnte man annehmen, dass die Phasenraumbesetzung mit der Besetzung des Ortsraums korreliert ist. Nachdem dann das Maximum der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum erreicht ist, übernimmt die Impulsraumbesetzung diese

dominierende Rolle. Der Mechanismus, der zu dieser Kopplung und dem Wechsel zwischen der dominanten Rolle des Ortsraums und des Impulsraums führt, ist dabei natürlich noch zu klären. Zunächst mag an dieser Einschätzung der Situation verwunderlich sein, dass beispielsweise für starke Unordnung, also Lokalisierung im Ortsraum, ausgerechnet die Impulsraumbesetzung mit der Phasenraumbesetzung korreliert sein soll. Selbiges gilt analog im Fall schwacher Unordnung.

Beim Aubry-André-Modell ist eine plausible Erklärung auf ähnlichem Niveau aber gar nicht erst möglich. Wie bereits begründet wurde, sind die Inversen Besetzungszahlen im Ortsraum und im Impulsraum durch Spiegelsymmetrie um den Selbstdualitätspunkt $\lambda = 2$ miteinander verknüpft. Diese Symmetrie ist im Phasenraum deutlich gebrochen. Die Ursache für diesen Symmetriebruch können die Besetzungszahlen allein nicht liefern. Damit ist es an der Zeit, die Zusammenhänge zwischen den Besetzungszahlen in den verschiedenen Räumen detailliert zu untersuchen.

4.4 Verknüpfung zwischen den verschiedenen Besetzungsmaßen

4.4.1 Zwei-Zustands-Modell

Für eine analytische Erfassung der Besetzungsmaße bietet es sich an, zunächst einen einfachen Grenzfall zu betrachten. Ausgehend von lokalisierten Zuständen auf einzelnen Gitterplätzen soll dazu die Kopplung zweier Gitterplätze betrachtet werden. Für das Anderson-Modell ergibt sich dieser Umstand im Fall großer Potentialstärke, wenn zufällig zwei benachbarte Gitterplätze energetisch nah beieinander liegen. Die Wahrscheinlichkeit, dass dieser Fall eintritt, wird nachher noch zu diskutieren sein. Im Moment sei ein solcher Spezialfall angenommen und der Hilbertraum auf die dieses Zweiniveausystem beschränkt. Der Hamilton-Operator lautet in der Basis der beiden beteiligten Gitterplätze $|i\rangle$ und $|j\rangle$ somit:

$$H_2 = \begin{pmatrix} -\Delta/2 & -1 \\ -1 & \Delta/2 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Die absolute Position auf der Energie ist hierbei nicht von Bedeutung, so dass nur die Energiedifferenz zwischen den beiden Gitterplätzen Δ auftritt. Die Energieskala selbst ist wie beim Anderson-Modell durch den Betrag der Hüpfmatrixelemente $t = 1$ festgelegt, also durch die Nichtdiagonaleinträge von (4.2).

Die Eigenzustände dieses Zwei-Zustands-Modells lassen sich sehr gut durch einen Winkel ϕ parametrisieren für den gelten soll:

$$\tan(2\phi) = \frac{2}{\Delta}. \quad (4.3)$$

Damit ergibt sich für die Eigenzustände:

$$|\psi_1\rangle = \cos \phi |i\rangle - \sin \phi |j\rangle \quad \text{und} \quad (4.4a)$$

$$|\psi_2\rangle = \sin \phi |i\rangle + \cos \phi |j\rangle. \quad (4.4b)$$

Für diese Eigenzustände kann man nun die Inversen Besetzungszahlen im Ortsraum, im Impulsraum und im Phasenraum bestimmen. Dabei sei ein eindimensionales Problem mit Systemgröße L angenommen. Der Abstand zwischen den beiden Gitterplätzen sei $\tilde{a} = j - i$. Im Fall benachbarter Gitterplätze ist $\tilde{a} = a = 1$ entsprechend der Skala, wie sie in Kapitel 2 bei der Einführung der kinetischen Energie auf dem Gitter festgelegt wurde. Es wird sich aber herausstellen, dass der Fall $\tilde{a} \gg 1$ ebenfalls von Interesse ist. Durch Einsetzen der beiden Zustände (4.4) in die Definitionen der Inversen Besetzungszahlen ergibt sich für beide Zustände gleichermaßen:

$$\begin{aligned} P &= \frac{1}{\sqrt{L}} \left[\cos^4 \phi + \sin^4 \phi + 4 \cos^4 \phi \sin^4 \phi \exp\left(-\frac{\tilde{a}^2}{4\sigma^2}\right) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{\Delta^2 + 2 + 4 \exp(-\tilde{a}^2/4\sigma^2)}{\Delta^2 + 4} \end{aligned} \quad (4.5a)$$

$$P_x = \cos^4 \phi + \sin^4 \phi = \frac{\Delta^2 + 2}{\Delta^2 + 4} \quad (4.5b)$$

$$P_k = \frac{1}{L} (1 + 2 \cos^2 \phi \sin^2 \phi) = \frac{1}{L} \frac{\Delta^2 + 6}{\Delta^2 + 4} \quad (4.5c)$$

Dass die Ergebnisse für beide Zustände (4.4) übereinstimmen, ist wenig verwunderlich, denn die beiden Zustände vertauschen abgesehen vom Vorzeichen nur die Rollen der beiden beteiligten Gitterplätze $|i\rangle$ und $|j\rangle$. Zudem sind die Werte, die sich für $\Delta \rightarrow \infty$ ergeben, genau die, die man für einen im Ort lokalisierten Zustand erwartet.

Interessanter ist hingegen der Vergleich der Inversen Besetzungszahlen in den verschiedenen Räumen untereinander. Wenn man von den Vorfaktoren $1/\sqrt{L}$, 1 und $1/L$ in P , P_x und P_k absieht, stellt sich nämlich im Fall $\tilde{a} \ll \sigma$ heraus, dass sich P genau wie P_k verhält. Die exponentiell kleine Korrektur zu dieser Äquivalenz kommt nur aufgrund der Veränderung der Streifenbreite im Phasenraum zustande und lässt sich bei hinreichend großen Systemen komplett vernachlässigen. Gilt hingegen $\tilde{a} \gg \sigma$, nimmt P genau die Form von P_x an. Im Phasenraum besitzt also der Abstand der beiden Gitterplätze entscheidende Bedeutung. Das ist wiederum gar nicht so überraschend, denn der Phasenraum zeichnet sich genau dadurch aus, dass dort nur Strukturen aufgelöst werden können, die groß gegenüber der endlichen Auflösung im Phasenraum sind. Für benachbarte Gitterplätze mit $\tilde{a} = 1$ ist genau das nicht der Fall. Interessanterweise nimmt die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum dann den funktionalen Zusammenhang der Inversen Besetzungszahl im Impulsraum an. Dort führt die Überlagerung der Orts-

wellenfunktionen zweier benachbarter Plätze zu einer langwelligen Oszillation. Die Fourier-Transformation (2.17a) beim Übergang einer Wellenfunktion aus zwei im Ort lokalisierten Anteilen führt nämlich zu einer Überlagerung zweier Oszillationen, bei der die mittlere und die relative Ortskoordinate als Oszillationsparameter auftreten. Die Funktion einer Einhüllenden übernimmt die langsame Oszillation, die beim Zustand (4.4a) in Impulsdarstellung zur Abhängigkeit $\tilde{\psi}(k_i) \sim \sin(k_i \tilde{a}/2)$ führt. Für den Zustand (4.4b) taucht an dieser Stelle statt des Sinus ein Kosinus auf, was die Orthogonalität der beiden Wellenfunktionen widerspiegelt. Diese langwellige Oszillation in Impulsdarstellung lässt sich natürlich im Phasenraum entsprechend wiederfinden. Damit ist auch von der physikalischen Anschauung her klar, warum für $\tilde{a} \ll \sigma$ die Besetzung im Phasenraum von der im Impulsraum dominiert wird. Die wesentliche Zutat stellt die endliche Auflösung des Phasenraums in der Ortskoordinate dar.

Das diskutierte physikalische Bild lässt sich in dieser Form auch genau in Abbildung 4.2 wiederfinden, nämlich am deutlichsten im Fall des Anderson-Modells für Unordnungsstärke $W = 8$ (zweit-unterstes Bild links). Dort ist zu sehen, dass in Impulsrichtung eine langwellige Oszillation auftritt, die genau durch die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum erfasst werden kann. Ausgelöst wird dieses Verhalten durch den eben besprochenen Effekt, dass in erster Ordnung im Hüpfmatrixelement zwei benachbarte Zustände gekoppelt werden, was sich im Phasenraum aber in der Breite des Streifens nur in vernachlässigbarer Weise niederschlägt. Viel substanzieller ist der Impulsraumeffekt dieser Kopplung, der zu einer langwelligen Oszillation führt. Die resultierenden gekoppelten Zustände stellen auf diese Weise insbesondere auch ihre Orthogonalität sicher.

Auch im Aubry-André-Modell findet der Übergang zur Lokalisierung auf einzelnen Gitterplätzen bei hoher Potentialstärke nach dem selben Mechanismus statt, dass nämlich die Ankopplung an benachbarte Gitterplätze aufgrund der energetischen Separation zwischen den Gitterplätzen immer kleiner wird. Die Besetzung des Phasenraums wird in diesem Bereich also ebenso durch die Besetzung des Impulsraums bestimmt.

Mit dieser Erkenntnis kann man nun zur Fragestellung zurückkehren, warum die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum im Aubry-André-Modell die ursprüngliche Symmetrie der Inversen Besetzungszahlen im Orts- und Impulsraum bricht. Es wird sich herausstellen, dass die Ursache dieses Verhaltens auch für den Unterschied zwischen dem eindimensionalen Anderson-Modell und dem Aubry-André-Modell für geringe Potentialstärke verantwortlich ist. Dieses letztgenannte Problem lässt sich aber etwas leichter diskutieren, da hier insbesondere zunächst das eindimensionale Anderson-Modell für kleine Unordnungsstärke behandelt werden kann. Die Übertragung der Ergebnisse aus dem Grenzfall starker Unordnung ist in diesem Fall besonders einfach, da im Wesentlichen nur die Rolle von Orts- und Impulsraum vertauscht ist.

Abbildung 4.2 gibt im Anderson-Modell für die Unordnungsstärke $W = 0.3$ (zweit-oberstes Bild links) bereits einen Hinweis auf den Rollentausch zwischen

Orts- und Impulsraum. Man beobachtet deutlich, dass eine Kontraktion des Streifens in Richtung der Ortskoordinate stattfindet, aber sich die Breite des Streifens in Impulsrichtung kaum ändert. Dabei ist zu beachten, dass die rechts in Abbildung 4.1 gezeigte Skala stark nichtlinear ist. Die kleinen Effekte in etwas größerer Entfernung zum Streifen sind deshalb in dieser Auftragung sehr stark überhöht wiedergegeben, wohingegen der Einfluss auf die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum vernachlässigbar ist. Der wesentliche Effekt, nämlich die Kontraktion in Richtung der Ortskoordinate und die resultierende langgestreckten Form in Impulsrichtung bedeuten analog zu der vorangegangenen Diskussion bei hohen Potentialstärken, dass Impulseigenzustände durch ein schwaches Unordnungspotential im eindimensionalen Anderson-Modell zunächst offensichtlich nur an Zustände mit ähnlichem Impuls ankoppeln. Die Phasenraumkontraktion gibt in diesem Grenzfall somit im wesentlichen die Ortsraumeigenschaften wieder.

Um die Kopplung zwischen verschiedenen Impulszuständen zu verstehen, muss man die Eigenschaften des Potentials studieren, welches die Kopplung verursacht. Beim Anderson-Modell ist dies ein Zufallspotential, das insbesondere keine impuls-spezifischen Eigenschaften zeigt. Im Resultat sind die Matrixelemente zwischen Impulseigenzuständen unabhängig vom Impuls. Die effektive Kopplung zwischen Zuständen mit benachbartem Impuls ist deshalb auch kein Effekt des Potentials selbst, sondern basiert auf der Eigenschaft, dass Zustände, die sich betragsmäßig nur wenig im Impuls unterscheiden, auch energetisch benachbart sind und umgekehrt. Dies ist eine direkte Folge der Dispersionsrelation freier Teilchen in einer Dimension, wie sie in Abbildung 2.1 dargestellt ist.

Für das eindimensionale Anderson-Modell kann man somit den Schluss ziehen, dass bei geringer Unordnung für zunehmende Unordnungsstärke eine Verringerung der Besetzung des Phasenraums aufgrund der Dominanz des Verhaltens im Ortsraum gegeben ist, während bei starker Unordnung eine analoge Verringerung der Besetzung des Phasenraums mit abnehmender Unordnungsstärke durch die Dominanz des Impulsraums stattfindet. Zusammen mit den Grenzfällen freier Teilchen beziehungsweise unendlichem ungeordneten Potential, bei denen vollständige Lokalisierung im Impulsraum beziehungsweise im Ortsraum zu beobachten ist, sind damit die linken Teilbilder der Abbildungen 4.2 bis 4.5 konsistent erklärt. Insbesondere stellt die deutliche Lokalisierung im Phasenraum für mittlere Unordnungsstärke eine logische Folge aus der Analyse der Grenzfälle dar. Der Lokalisierungseffekt wird mit zunehmender Systemgröße immer markanter, wie eine spätere Analyse des Skalierungsverhaltens noch ergeben wird.

Es ist nun aber zunächst naheliegend, eine analoge Betrachtung des Falls geringer Potentialstärke im Aubry-André-Modell anzustellen. Auch hier interessiert demnach die Kopplung von Impulseigenzuständen durch das Potential des Aubry-André-Modells. Abbildung 4.2 zeigt an dieser Stelle aber bereits ein deutlich anderes Bild, als es zuvor für das Anderson-Modell diskutiert wurde. Schon für sehr geringe Potentialstärke (Teilbild rechts oben) treten bereits zusätzliche Streifen schwach hervor, die zu ganz anderen Impulsen gehören, als der einzelne zentrale Streifen,

der die Lösung für freie Teilchen darstellt. Die Ursache ist eine spezielle Eigenschaft des Potentials. Dieses besitzt eine Periodizität, die zwar auf dem Gitter nur in Form einer Quasiperiodizität auftritt, bei der Berechnung von Matrixelementen zwischen Impulseigenzuständen aber dennoch voll zur Geltung kommt. Es ist eine bekannte Eigenschaft periodischer Strukturen, effizient bestimmte Wellenzahlen übertragen zu können, wie es beispielsweise im Rahmen der Festkörperphysik aus Streuexperimenten bekannt ist. Ursache bildet die konstruktive Interferenz durch die periodischen Struktur bei passenden Wellenzahlen. Dadurch kann das quasiperiodische Potential des Aubry-André-Modells einen festen Impulsübertrag realisieren, während Matrixelemente zwischen allen anderen Impulseigenzuständen in Form von destruktiver Interferenz verschwinden.

Diese Eigenschaft des Aubry-André-Modells lässt sich auch im Rahmen der Dualitätstransformation verstehen. Bei hoher Potentialstärke ist die Kopplung auf benachbarte Zustände im Ortsraum beschränkt, weil die kinetische Energie nur direkt benachbarte Gitterplätze koppelt. Wendet man nun die Dualitätstransformation an, wird diese Lösung im Ortsraum zu einer Lösung im Impulsraum für kleine Potentialstärke. Allerdings tritt hierbei eine Permutation auf, so dass die ursprünglich im Ortsraum benachbarten Gitterplätze nachher im Allgemeinen weit voneinander entfernt im Impulsraum liegen. Das entspricht genau dem Impulsübertrag, den das quasiperiodische Gitter zu leisten vermag.

Anhand der Gleichungen (4.5) zeigt sich nun, dass im Fall der Ankopplung weit voneinander entfernter lokalisierter Zustände im Ortsraum, also für $\tilde{a} \gg \sigma$, die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum durch die Inverse Besetzungszahl im Ortsraum dominiert ist. Für geringe Potentialstärke, also im Impuls lokalisierte Zustände, gilt ganz analog die Dominanz der Inversen Besetzungszahl im Impulsraum. Eine Wiederholung der Herleitung mit dem Zwei-Zustands-Modell (4.2) allerdings für Impulseigenzustände ist aber in diesem Zusammenhang unnötig, denn die Überlegungen lassen sich von Ortseigenzuständen direkt auf Impulseigenzustände übertragen. Viel interessanter ist hier nun noch der Gesamtüberblick über das Verhalten des Aubry-André-Modells im Phasenraum für beliebige Potentialstärke und die anschließende Gegenüberstellung mit dem Anderson-Modell.

Wie zuletzt argumentiert wurde, verursacht die starke Kopplung von Impulseigenzuständen bei festem Impulsübertrag durch das quasiperiodische Potential des Aubry-André-Modells eine Dominanz der Besetzung im Impulsraum für die Besetzung des Phasenraums bei geringer Potentialstärke. Gleichzeitig ist diese Dominanz auch für große Potentialstärken zu finden. Da die Inverse Besetzungszahl im Impulsraum für zunehmende Potentialstärke monoton fällt, fällt auch die Inverse Besetzungszahl im Bereich schwachen und starken Potentials. Gleichzeitig sind die Grenzfälle verschwindenden und unendlichen Potentials durch Streifen im Phasenraum gegeben, so dass die Inversen Besetzungszahlen im Phasenraum in diesen Fällen übereinstimmen. Als einzige Lösung bleibt daher, dass die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum für mittlere Potentialstärke zeitweise ansteigt, wie es auch schon in Abbildung 4.3 im Bereich um den Selbstdualitätspunkt $\lambda = 2$

beobachtet wurde.

Im Ergebnis kann man zunächst festhalten, dass der Phasenraum offensichtlich einen überaus geeigneten Rahmen bildet, um Kopplungseigenschaften lokalisierter Zustände zu analysieren, wie sie in den Grenzfällen schwachen und starken Potentials beobachtet werden. Aufgrund der intrinsischen endlichen Auflösung im Phasenraum werden dabei die Orts- und Impulsinformationen anders behandelt, als dies bei der Orts- oder Impulsdarstellung der Wellenfunktion der Fall ist.

In diesem Zusammenhang sei eine aktuelle Untersuchung von Varga und Pipek angesprochen [58], in der ein Zusammenhang zwischen der Orts- und Impulsdarstellung der Wellenfunktion und Besetzungsmaßen im Phasenraum vorgestellt wird. Interessanterweise ist die Essenz, dass die Orts- und Impulsrauminformationen mittels einer gauß-förmigen Verteilung verschmiert werden müssen. Dazu werden die beiden Größen \tilde{P}_x und \tilde{P}_k eingeführt:

$$\begin{aligned}\tilde{P}_x &= \int dx \left| \int \frac{dk}{2\pi} \rho(x, k) \right|^2 \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int dx \left| \int d\tilde{x} \exp\left[-\frac{(x - \tilde{x})^2}{2\sigma^2}\right] |\psi(\tilde{x})|^2 \right|^2 \quad \text{und}\end{aligned}\tag{4.6a}$$

$$\begin{aligned}\tilde{P}_k &= \int \frac{dk}{2\pi} \left| \int dx \rho(x, k) \right|^2 \\ &= \frac{2\sigma^2}{\pi} \int \frac{dk}{2\pi} \left| \int d\tilde{k} \exp\left[-\sigma^2(k - \tilde{k})^2\right] |\tilde{\psi}(\tilde{k})|^2 \right|^2.\end{aligned}\tag{4.6b}$$

Wie in [58] und in Kapitel 3 sei an dieser Stelle nur der eindimensionale Fall angegeben. Die hierbei entstehenden Inversen Besetzungszahlen der geglätteten Wellenfunktionen müssen nun nur miteinander multipliziert werden, um eine Näherung für die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum zu erhalten:

$$P \approx \tilde{P}_x \tilde{P}_k.\tag{4.7}$$

Diese Abschätzung bestätigt die Bedeutung der endlichen Auflösung im Phasenraum, die auf die physikalische Interpretation einen so wesentlichen Einfluss hat, indem zwischen lokalen und nichtlokalen Änderungen unterschieden wird. Es sollte aber auch angemerkt werden, dass die gaußsche Verschmierung (4.6), die Varga und Pipek diskutiert haben, im Vergleich zur Berechnung der Besetzungszahlen für die Orts- und Impulsdarstellung einer Wellenfunktion einen erheblichen numerischen Zusatzaufwand darstellt. Gegenüber der Berechnung der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum nach (3.17) ist kein Vorteil im Aufwand zu verzeichnen. An dieser Stelle ist deshalb das von Varga und Pipek angegebene Verfahren vor allem als Bestätigung der physikalischen Interpretation von Bedeutung und unterstreicht die Relevanz der gaußschen Verschmierung.

4.4.2 Mittleres Verhalten der Besetzungsmaße

Im Rahmen der analytischen Resultate (4.5) aus dem Zwei-Zustands-Modell (4.2) kann man nun auch das Verhalten der Mittelwerte der Inversen Besetzungszahlen in den verschiedenen Räumen für Bereiche schwachen und starken Potentials diskutieren, in denen die Näherung mittels des Zwei-Zustands-Modell gerechtfertigt ist. Die Gültigkeit ist also auf Bereiche beschränkt, in denen die Kopplung nur zweier lokalisierter Zustände relevant ist. Dazu müssen die Ergebnisse (4.5) mit einer entsprechenden Verteilungsfunktion für die Niveauabstände Δ gewichtet werden.

Wie im vorangegangenen Abschnitt soll auch hier zunächst die Diskussion des Anderson-Modells bei großer Unordnung im Vordergrund stehen. In diesem Fall ist die energetische Differenz zwischen Gitterplätzen i und j durch die Differenz der potentiellen Energien V_i und V_j auf den Gitterplätzen bestimmt. Da das Vorzeichen der Energiedifferenz im Rahmen des Zwei-Zustands-Modells keine Rolle spielt, ergibt sich:

$$P_1(\Delta) = N_1 \int_{-W/2}^{W/2} dV_1 \int_{-W/2}^{W/2} dV_2 \delta(\Delta - |V_2 - V_1|) = \frac{2}{W^2} (W - \Delta). \quad (4.8)$$

Die Verteilung $P_1(\Delta)$ ist somit für $0 \leq \Delta \leq W$ definiert und durch geeignete Wahl von N_1 normiert. Für das Zwei-Zustands-Modell ist diese Verteilung aber nicht geeignet, denn in diesem Modell werden nur zwei Plätze aneinander gekoppelt. Tatsächlich sind beispielsweise im Anderson-Modell in einer Dimension an jeden Gitterplatz immer zwei Nachbarplätze angekoppelt. Das Zwei-Zustands-Modell kann jedoch auch in diesem Fall eingesetzt werden, wenn nämlich von den zwei angekoppelten Nachbarn einer energetisch näher liegt. Dann kann man den anderen Nachbarn bei hoher Potentialstärke vernachlässigen, denn dessen Ankopplung an das Zwei-Zustands-Modell wird unbedeutend. Das bedeutet, dass die Wahrscheinlichkeit $P_2(\Delta)$ interessiert, bei der ein benachbarter Gitterplatz den Potentialabstand Δ aufweist und gleichzeitig der zweite benachbarte Gitterplatz einen größeren energetischen Abstand als Δ hat. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_2(\Delta)$ ist somit:

$$P_2(\Delta) = N_2 P_1(\Delta) \int_{\Delta}^W dx P_1(x) = \frac{4}{W^4} (W - \Delta)^3. \quad (4.9)$$

Die Konstante N_2 ist wiederum durch Normierung der Verteilung bestimmt. Das Ergebnis lässt sich übrigens direkt auf den Fall von $2d$ Nachbarn verallgemeinern, wie sie im d -dimensionalen Anderson-Modell auftreten. Das Resultat lautet hierfür:

$$P_{2d}(\Delta) = N_{2d} P_1(\Delta) \left[\int_{\Delta}^W dx P_1(x) \right]^{2d-1} = \frac{4d}{W^{4d}} (W - \Delta)^{4d-1}. \quad (4.10)$$

Ausgehend von diesen Verteilungen können nun Mittelwerte für die Inversen Besetzungszahlen bestimmt werden, indem die Ergebnisse (4.5) mit den Verteilungen

4.4 Verknüpfung zwischen den verschiedenen Besetzungsmaßen

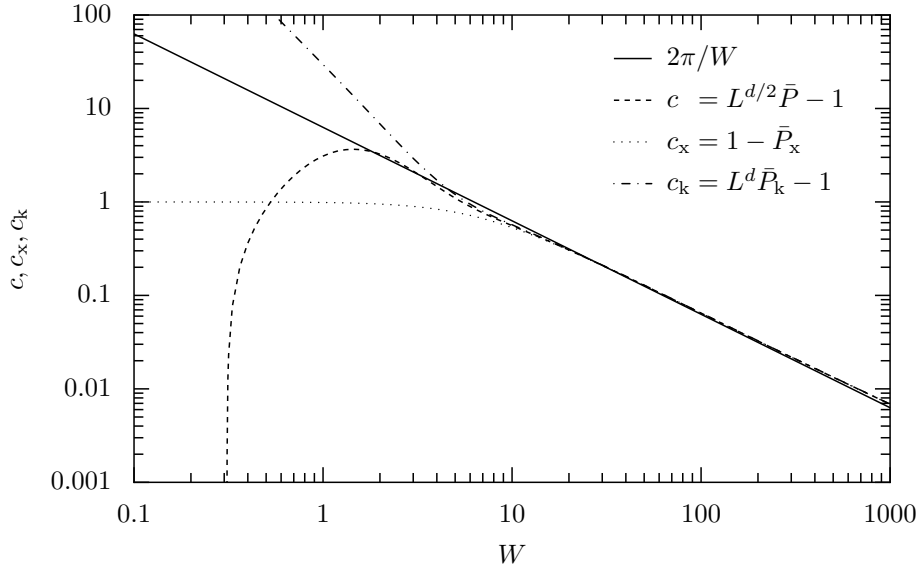


Abbildung 4.6: Vergleich der gemittelten Inversen Besetzungszahlen gemäß dem Zwei-Zustands-Modell (4.11) mit Daten des eindimensionalen Anderson-Modells, die schon in den Abbildungen 4.3 bis 4.5 verwendet wurden.

für Δ gewichtet werden. Man erhält:

$$\bar{P} = \int_0^W d\Delta P_{2d}(\Delta) P(\Delta) \approx L^{-d/2} \left(1 + \frac{2\pi d}{W} [2 \exp(-\tilde{a}/4\sigma^2) - 1] \right) \quad (4.11a)$$

$$\bar{P}_x = \int_0^W d\Delta P_{2d}(\Delta) P_x(\Delta) \approx 1 - \frac{2\pi d}{W} \quad (4.11b)$$

$$\bar{P}_k = \int_0^W d\Delta P_{2d}(\Delta) P_k(\Delta) \approx L^{-d} \left(1 + \frac{2\pi d}{W} \right) \quad (4.11c)$$

Die Integrale lassen sich vollständig lösen, wobei Lösungen in höheren Dimensionen immer mehr Terme enthalten. Für große Unordnungsstärken W interessiert jedoch nur die soeben angegebene niedrigste Ordnung in $1/W$. Es sollte angemerkt werden, dass nicht nur Potenzen in $1/W$ auftreten, sondern auch logarithmische Terme wie beispielsweise $\ln(W)/W^2$.

Die Ergebnisse des Zwei-Zustands-Modells (4.11) stimmen aber bereits in der Näherung (4.11) sehr gut mit dem Verhalten der Mittelwerte der Inversen Besetzungszahlen in den verschiedenen Räumen überein. Dazu wurden die Daten für das eindimensionale Anderson-Modell aus den Abbildungen 4.3 bis 4.5 gemittelt und die Koeffizienten $c = L^{d/2}\bar{P} - 1$, $c_x = 1 - \bar{P}_x$ und $c_k = L^d\bar{P}_k - 1$ bestimmt, die laut (4.11) übereinstimmend auf der Geraden $2\pi d/W$ liegen sollten. Die exponentiell kleine Korrektur, die sich für c gemäß (4.11a) durch die Zunahme der Breite des Streifens im Phasenraum ergibt, wurde hier nicht mehr berücksichtigt, da sie für eine Systemgröße $L = 2048$ völlig irrelevant ist. Abbildung 4.6 zeigt nun diese Koeffizienten c , c_x und c_k gemeinsam mit der Geraden $2\pi d/W$. Die Kurven stimmen

bereits ab Unordnungsstärken $W = 10$ sehr gut überein. Allerdings ist in Abbildung 4.6 für große W eine zunehmende Abweichung sichtbar und insbesondere die Steigung der Geraden $2\pi d/W$ scheint nicht exakt mit den Daten in Übereinstimmung zu liegen. Dabei ist nun zu beachten, daß bei zunehmender Unordnung die spezielle Auswahl der Unordnungsrealisierungen immer wesentlicher wird, da immer weniger beinahe entartete benachbarte Gitterplätze einfließen. Da für die verschiedenen Unordnungsstärken immer die selben Unordnungsrealisierungen verwendet wurden, werden kleine Abweichungen von der Vorhersage immer deutlicher, die aber für eine andere Wahl von Unordnungsrealisierungen jeweils verschieden sind.

Es ist recht erstaunlich, dass die Vorhersage des Zwei-Zustands-Modells für Unordnungsstärken $W \geq 10$ derart gut ist. Betrachtet man insbesondere den Bereich um $W = 10$ in den Verteilungen der Inversen Besetzungszahlen, wie sie in den Abbildungen 4.3 bis 4.5 links zu sehen sind, wird nämlich deutlich, dass die Zustände in diesem Bereich in aller Regel bereits auf mehreren Plätzen delokalisiert sein müssen. Gleichzeitig sieht man in diesem Bereich aber auch eine Häufung bei solchen Inversen Besetzungszahlen, wie sie Zustände bei der Belegung von genau zwei benachbarten Gitterplätze besitzen. Im Rahmen der Diskussion spezieller Zustände wird dieser Effekt nochmals aufgegriffen. Es ist an dieser Stelle zunächst aber recht instruktiv, die Frage nach der Berücksichtigung dreier benachbarter Gitterplätze zu stellen. Die Berechnung der Inversen Besetzungszahlen wird dabei immens verkompliziert. Allerdings lässt sich sehr einfach die Häufigkeit bestimmen, mit der dieser Fall überhaupt von Interesse wird. Im Vergleich zum Zwei-Zustands-Modell muss dazu die Verteilung $\tilde{P}_2(\Delta)$ bestimmt werden, die die Wahrscheinlichkeit angibt, dass ein benachbarter Gitterplatz den Potentialabstand Δ aufweist und gleichzeitig der zweite benachbarte Gitterplatz einen kleineren energetischen Abstand als Δ hat. Analog zu (4.9) gilt also:

$$\tilde{P}_2(\Delta) = \tilde{N}_2 P_1(\Delta) \int_0^\Delta dx P_1(x) = \frac{8}{W^4} \Delta (W - \Delta) (W - \Delta/2). \quad (4.12)$$

Die Verteilung $P_1(\Delta)$ ist somit übrigens die Summe der beiden Verteilungen $P_2(\Delta)$ und $\tilde{P}_2(\Delta)$ bei Anpassung der Normierung. Viel interessanter ist allerdings, dass sich die Verteilung $\tilde{P}_2(\Delta)$ für $W \rightarrow \infty$ und festes Δ dem Wert Null nähert, während $P_2(\Delta)$ in diesem Grenzfall ungleich Null, nämlich sogar maximal wird. Bei einer Integration analog zu (4.11) treten deshalb bei der Kopplung von mehr als zwei benachbarten Gitterplätzen, die beinahe entartet sind, keine Terme der Ordnung $1/W$ auf. Dabei ist entscheidend, dass für die Inversen Besetzungszahlen in den verschiedenen Räumen, die sich bei gleichmässiger Besetzung zweier oder dreier Gitterplätze ergibt, kein erheblicher Unterschied besteht. Beispielsweise ist P_x für zwei Gitterplätze $1/2$ und für drei Gitterplätze $1/3$. Dieser Faktor ist unerheblich im Vergleich zur veränderten Verteilung $P_2(\Delta)$ und $\tilde{P}_2(\Delta)$. Deshalb gibt das Zwei-Zustands-Modell die physikalisch relevanten Prozesse in Ordnung $1/W$ korrekt wieder.

Auch für das Aubry-André-Modell kann man in ganz analoger Weise eine Analyse des Verhaltens bei großer Potentialstärke vornehmen [11]. Dazu sind lediglich die Verteilungen $P_1(\Delta)$ und $P_2(\Delta)$ anzupassen und Vorfaktoren zu ergänzen, die das Auftreten zweier Streifen aufgrund der Potentialgeometrie korrigieren.

Die Dualitätseigenschaft des Aubry-André-Modells bietet darüber hinaus auch die Möglichkeit, den Fall schwachen Potentials mit der selben Methodik zu erfassen. Man kann die Lösungen des Aubry-André-Modells für starkes Potential, die bis auf Faktoren identisch zu (4.11) sind, direkt übertragen, weil im Aubry-André-Modell auch für schwaches Potential ausgewählte im Impulsraum lokalisierte Zustände gekoppelt werden [11]. Dabei vertauschen Ortsraum und Impulsraum ihre Rollen. Wie schon diskutiert wurde, bleibt die Inverse Besetzungszahl des Phasenraums vom Impulsraum dominiert, weil in (4.5a) der Grenzfall der Kopplung entfernter Zustände realisiert wird.

4.4.3 Spezielle Zustände

Neben der Erfassung der Mittelwerte der Inversen Besetzungszahlen im Rahmen des Zwei-Zustands-Modells, ist auch eine zumindest qualitative Diskussion der auftretenden Verteilungen aufschlussreich. Insbesondere im Aubry-André-Modell sind in den Abbildungen 4.3 bis 4.5 deutliche Strukturen zu erkennen. Aber auch beim Anderson-Modell sind etwas abseits vollständiger Lokalisierung im Bereich starker Unordnung gewisse Unregelmässigkeiten zu sehen, so beispielsweise im Ortsraum, bei dem eine Häufung bei $P_x = 0.5$, also $\ln P_x \approx -0.7$ gefunden wird. Dieser Wert tritt im Zwei-Zustands-Modell gerade bei $\Delta = 0$ auf. Auch die Häufungen in P_k und P sind mit dem Zwei-Zustands-Modell bei $\Delta = 0$ vereinbar. Hier tritt offensichtlich also der Effekt zutage, dass bei einer zufälligen nahezu vollständigen Entartung und starker, aber noch nicht zu starker Unordnung, eine Lokalisierung der Zustände auf zwei Gitterplätze beobachtet werden kann, aber nicht darüber hinaus. Entsprechend ist eine gewisse Häufung um diesen Punkt zu verzeichnen.

Für kleine Unordnung ist dieser Effekt im Anderson-Modell übrigens nicht vorhanden, denn dort können potentiell viele andere im Impuls lokalisierte Zustände ankoppeln, wenngleich energetisch benachbarte bevorzugt werden. Dieser komplexere Kopplungsmechanismus verhindert aber, dass sich ähnliche Artefakte einer Zwei-Zustands-Kopplung etablieren.

Beim Aubry-André-Modell ist für große Potentialstärke zunächst im Grunde der selbe Effekt zu beobachten wie beim Anderson-Modell. Am deutlichsten wird das wieder im Ortsraum mit den selben Auswirkungen einer Halbierung der Inversen Besetzungszahl, gegenüber dem Fall unendlichen Potentials. Die Eigenheit des Aubry-André-Modells, dass die vollständige Ortslokalisierung aufgrund der Potentialsymmetrie in Form der Belegung zweier Gitterplätze erfolgt, ist an dieser Stelle nicht erheblich. Nun sind aber noch zwei Dinge hervorstechend. Zunächst ist der Effekt der Halbierung deutlich stärker ausgeprägt. Das ist eine Folge des quasiperiodischen Potentials, denn damit zwei benachbarte Gitterplätze energetisch nah

beieinander liegen, sind bestimmte Phasenbedingungen der zugrundeliegende periodische Funktion zu erfüllen. Es lässt sich leicht analysieren, dass weitere benachbarte Gitterplätze dann energetisch immer weit separiert sein müssen. Somit lässt sich die Zwei-Zustands-Näherung erheblich deutlicher beobachten. Damit wird auch ein zweiter Effekt sichtbar, der im Impulsraum und im Phasenraum zu zusätzlichen Strukturen führt. Im Zwei-Zustands-Modell sind nämlich immer zwei Zustände beteiligt und zunächst gleichberechtigt. Das ist aber eine Idealisierung, denn in Wahrheit besteht immer eine störungstheoretische Ankopplung auch weiterer benachbarter Zustände. Leider lässt sich eine Verallgemeinerung des Zwei-Zustands-Modells in ähnlicher analytischer Form nicht durchführen, weil bereits die Diagonalisierung eines allgemeinen Drei-Zustands-Modells eine sehr viel größere Komplexität erreicht. Allerdings lassen sich natürlich Spezialfälle analysieren. Dabei stellt sich heraus, dass ein symmetrisches Vier-Zustands-Modell, bei dem die Ankopplung zweier entarteter Zustände an zwei weitere, energetisch gleich weit entfernte Zustände, zum Verständnis des Aubry-André-Modells über das Zwei-Zustands-Modell hinaus sehr hilfreich ist. Der Hamilton-Operator in der Basis der betrachteten Zustände lautet:

$$H_4 = \begin{pmatrix} \Delta & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & \Delta \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Dieses Problem lässt sich vollständig lösen, wobei hier nur die zwei Lösungen, die energetisch nahe bei Energie Null liegen, interessieren. In erster Ordnung in Δ lauten diese Zustände in Ortsdarstellung $(1, -\Delta, \mp\Delta, \pm 1)/\sqrt{2\Delta^2 + 2}$, woran man erkennt, dass für $\Delta \gg 1$ wieder der entartete Fall des Zwei-Zustands-Modells reproduziert wird.

Man kann beiden Lösungen des Vier-Zustands-Modells nahe Energie Null nun verwenden, um die Aufspaltung der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum nachzuvollziehen. Es ergibt sich, dass die symmetrische Lösung eine etwas geringere Inverse Besetzungszahl im Phasenraum aufweist, als die antisymmetrische Lösung. Damit ist die Aufspaltung in Abbildung 4.3 und 4.5 als Effekt der Kopplung von Gitterplätzen in höherer Ordnung verstanden.

Abschliessend sei angemerkt, dass die Dualitätstransformation des Aubry-André-Modells dazu führt, dass die Diskussionen spezieller Zustände für große Potentialstärke auf den Fall geringer Unordnungsstärke übertragen werden können, wenn man die Interpretation von Orts- und Impulsraum umkehrt. Im Phasenraum dominieren in der Regel aber wiederum die Impulseigenschaften, weil die Kopplung von im Impuls lokalisierten Zuständen durch das quasiperiodische Potential große Impulse überträgt und die endliche Auflösung im Phasenraum somit ohne Auswirkungen bleibt. Es gibt seltene Ausnahmen, dass bei der Permutation (2.19), die Teil der Dualitätstransformation ist, benachbarte Zustände wieder auf benachbarte Zustände abgebildet werden. Man erkennt in Abbildung 4.3 im Bereich von $\lambda = 1$

schwach, dass einige wenige Zustände Inverse Besetzungszahlen im Phasenraum aufweisen, die oberhalb der generischen Kurve der Maxima der Verteilungen liegen. Diese Zustände zeichnen sich durch erste-Ordnungs-Kopplung benachbarter Impulseigenzustände aus. Höhere Ordnungen der Kopplung zerstören diese speziellen Kopplungsfälle aber. Solche exotischen Zustände sind also nicht nur selten, sondern auch nur in niedrigster Ordnung in der Kopplung zu beobachten.

4.5 Anderson-Modell in zwei und drei Dimensionen

Nachdem nun die vorgestellten eindimensionale Modelle sehr detailliert diskutiert wurden, ist es interessant, das Anderson-Modell auch in höheren Dimensionen zu betrachten. Die Dimensionsabhängigkeit, die sich insbesondere ab dem dreidimensionalen Fall mit dem Auftreten eines Phasenübergangs äußert, sollte Auswirkungen im Phasenraum haben.

Nun lassen sich keine vollständigen Abbildungen des Phasenraums für Probleme erzeugen, die mehr als eindimensional sind, weil bereits für ein zweidimensionales Problem der Phasenraum vierdimensional ist. Allerdings haben die vorangegangenen Untersuchungen der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum gezeigt, dass die Reduktion der enormen Datenmenge, wie sie eine Phasenraumdarstellung bereithält, durchaus wesentliche Informationen herauspräparieren kann, was eher nützlich als einschränkend ist.

Abbildung 4.7 zeigt die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum für das zwei- und dreidimensionale Anderson-Modell. Im Vergleich zum eindimensionalen Fall, in Abbildung 4.3 links dargestellt, zeigt sich ein deutlicher Unterschied, dass nämlich im Fall geringer Unordnungsstärke W die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum mit zunehmender Unordnungsstärke abnimmt. Von der Struktur her ähnelt das Verhalten eher dem des Aubry-André-Modells.

Um nun an den Vergleich zwischen dem Anderson-Modell in einer Dimension und dem Aubry-André-Modell anzuschließen, sollten auch die Inversen Besetzungszahlen im Ortsraum und im Impulsraum hinzugezogen werden. Diese sind in den Abbildungen 4.8 und 4.9 gezeigt. Dabei wird deutlich, daß die Inverse Besetzungszahl im Ortsraum wiederum monoton ansteigend ist, während im Impulsraum ein monoton fallendes Verhalten beobachtet wird. Das ist an sich wenig verwunderlich, treibt doch zunehmende Unordnung das System von der ursprünglichen Lokalisierung im Impulsraum zur Lokalisierung im Ortsraum. In diesem Sinne stimmt das Verhalten auch mit dem in den Abbildungen 4.4 und 4.5 überein. Es stellt sich also umso mehr die Frage, warum in der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum ein so qualitativer Unterschied zwischen dem eindimensionalen Fall des Anderson-Modells und dem Verhalten in zwei und mehr Dimensionen vorliegt. In diesem Zusammenhang liegt es nahe, zunächst wieder auf die Diskussion der Grenzfälle schwacher und starker Unordnung zurückzukommen.

Der Fall starker Unordnung lässt sich dabei erfreulicherweise sehr schnell ab-

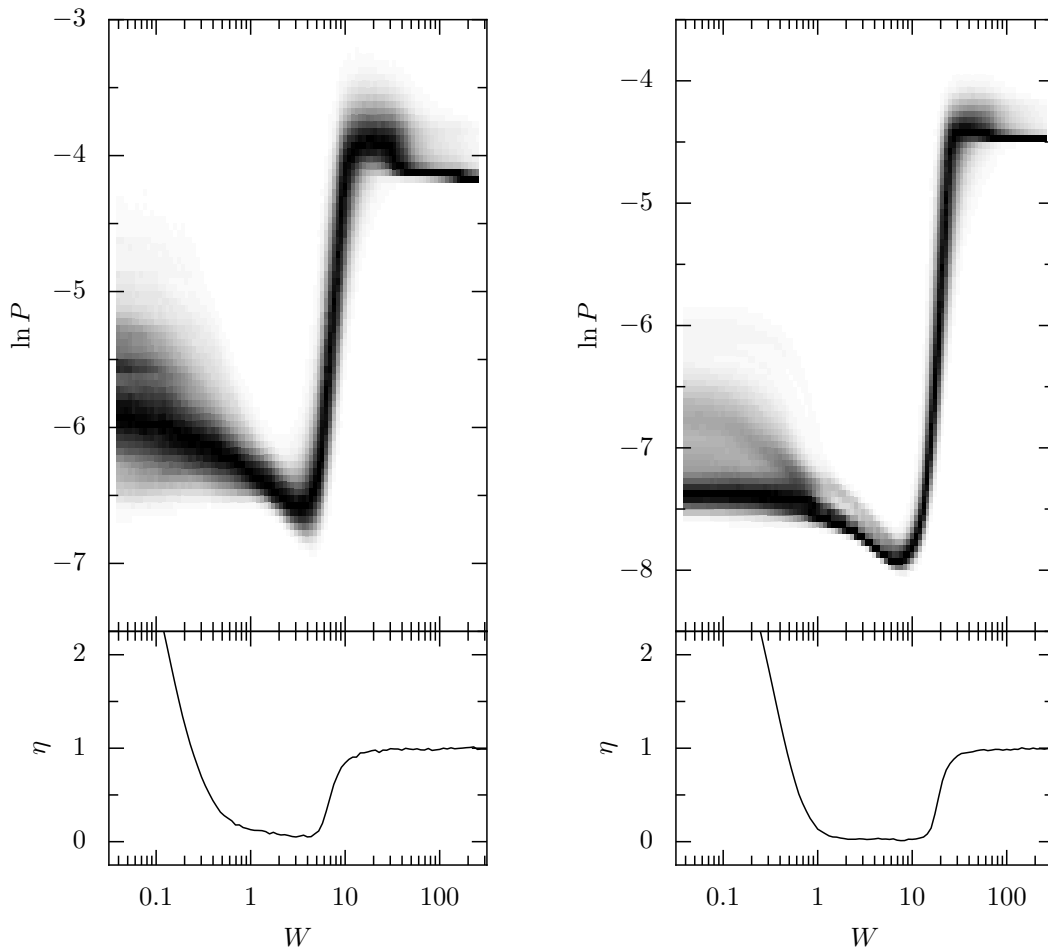


Abbildung 4.7: Der obere Teil der Abbildung zeigt eine Graustufen-Darstellung der Verteilungen des Logarithmus der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum P als Funktion der Potentialstärke W analog zu Abbildung 4.3. Im zweidimensionalen Anderson-Modell (links) wurde die Systemgröße $L \times L = 64 \times 64$ verwendet, im dreidimensionalen Anderson-Modell (rechts) hingegen $L \times L \times L = 20 \times 20 \times 20$. Die Verteilung entstand durch Verwendung der Hälfte aller Energieeigenzustände um die Bandmitte herum sowie 20 verschiedenen Unordnungsrealisierungen. Im unteren Teil der Abbildung ist die später diskutierte Größe η gezeigt, die in (4.18) als Maß für die Energieniveaubstößung im Energiespektrum definiert ist.

handeln, denn bereits in der Diskussion des Zwei-Zustands-Modells wurde mit beachtet, dass die Anzahl benachbarter Gitterplätze von der Dimension des Problems abhängt. Das wirkt sich nämlich nur in den Verteilungen $P_{2d}(\Delta)$ aus, die die Wahrscheinlichkeiten angeben, dass eine beinahe Entartung im Potential zweier benachbarter Gitterplätze bei $2d$ nächsten Nachbarn auftritt. Mit zunehmender Anzahl von Nachbarn wird diese Wahrscheinlichkeit entsprechend größer. Das bedeutet aber keine substantielle Änderung der Ergebnisse des Zwei-Zustands-Modells (4.11) und die Abbildung 4.6 lässt sich genauso für den zwei- und dreidimensionalen Fall des Anderson-Modells erstellen. Verwendet man die Daten aus

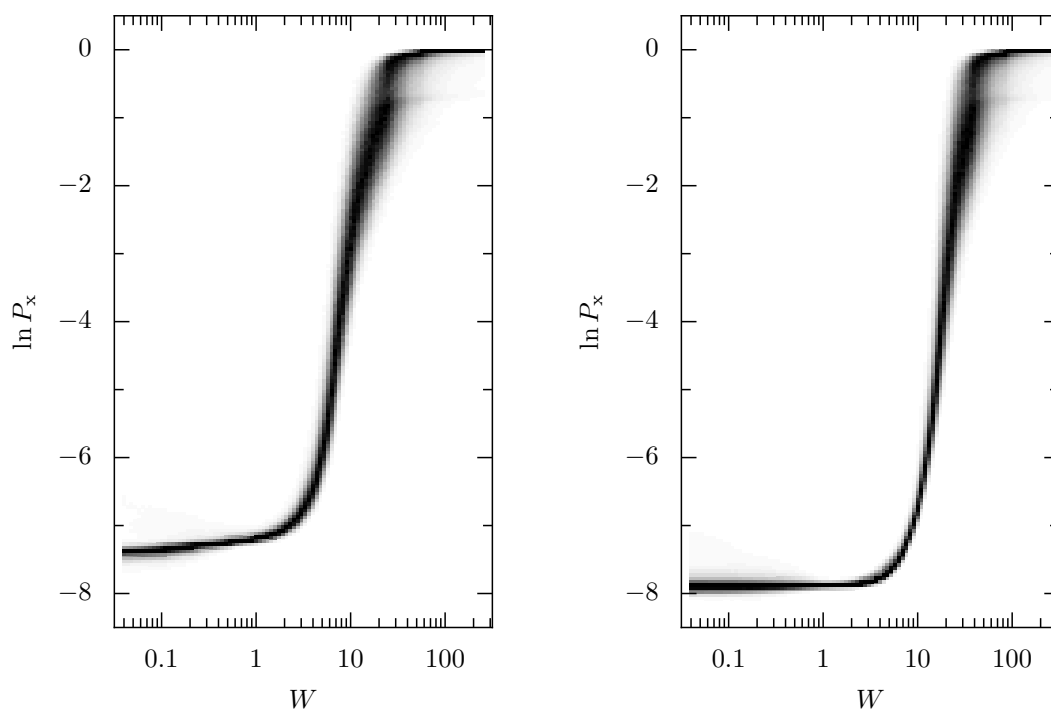


Abbildung 4.8: Graustufen-Darstellung der Verteilungen des Logarithmus der Inversen Besetzungszahl im Ortsraum P_x als Funktion der Unordnungsstärke W analog zu Abbildung 4.4. Die Teilbilder für das zweidimensionale Anderson-Modell (links) und das dreidimensionale Anderson-Modell (rechts) wurden aus den selben Energieeigenzuständen erzeugt, die auch in Abbildung 4.7 verwandt wurden.

Abbildung 4.7 bis 4.9, ergibt sich ein praktisch identisches Bild. Der Bereich bis zu dem das Zwei-Zustands-Modell eine gute Approximation darstellt, verschiebt sich nur zu etwas größeren Unordnungsstärken. Außerdem muß man im Koeffizienten c für die doch erheblich kleineren Systemgrößen die Korrektur der Streifenbreite in Gleichung (4.11a) beachten. Die Näherung der Exponentialfunktion mit Eins wäre insbesondere im dreidimensionalen Fall bei $L = 20$ unangebracht und deutlich zu beobachten.

Für geringe Unordnung ist die Diskussion komplizierter, denn dazu muss zunächst der Fall ohne jegliche Unordnung behandelt werden. Es deutet sich in den Abbildungen 4.7 bis 4.9 bereits an, dass sich dieser Grenzfall von den bisher diskutierten Fällen unterscheidet. Es sind deutlich Verteilungen sichtbar, die endliche Breiten und auch einige weitere Strukturen aufweisen. Die Ursache dafür ist, dass die energetische Entartung von Impulseigenzuständen in höheren Dimensionen mehr als zwei ist. In einer Dimension sind immer nur ebene Wellen mit den Wellenzahlen k und $-k$ entartet und die Forderung reeller Wellenfunktionen führt dazu, dass diese ebenen Wellen zu gleichen Teilen überlagert sind¹. Dadurch bleiben keine Freiheits-

¹Man könnte in diesem Zusammenhang die Forderung nach reellen Wellenfunktionen durchaus fallen lassen, denn dadurch würde sich letztendlich nichts ändern. Sobald ein beliebig schwaches

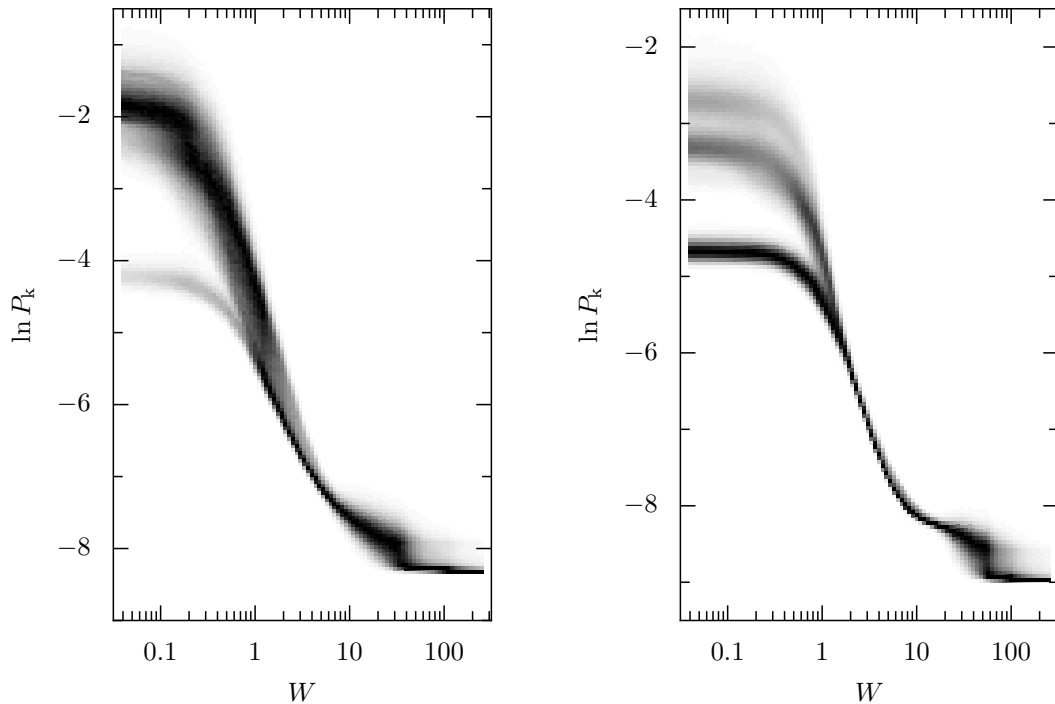


Abbildung 4.9: Graustufen-Darstellung der Verteilungen des Logarithmus der Inversen Besetzungszahl im Impulsraum P_k als Funktion der Unordnungsstärke W analog zu Abbildung 4.5. Die Teilbilder für das zweidimensionale Anderson-Modell (links) und das dreidimensionale Anderson-Modell (rechts) wurden aus den selben Energieeigenzuständen erzeugt, die auch in Abbildung 4.7 verwandt wurden.

grade mehr, die die Besetzungszahlen in den verschiedenen Räumen unbestimmt lassen, sondern es tritt stets gleichverteilte Lokalisierung bei den Wellenzahlen k und $-k$ auf.

In höheren Dimensionen $d \geq 2$ liegt nun keine derart strenge Einschränkung mehr vor, da insbesondere viel höhere Entartungen möglich sind. Der generische Fall in zwei Dimensionen besteht so beispielsweise darin, dass ein Gesamtimpuls $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ zwei verschiedene Wellenzahlen k_x und k_y in den zwei Raumrichtungen hat. Da die Energie eines Zustands im Fall $W = 0$ gemäß $E = -2(\cos k_x + \cos k_y)$ bestimmt ist, gibt es normalerweise 8 Möglichkeiten, diese Energie des Zustands mit Impuls \vec{p} zu erreichen. Man kann nämlich die Vorzeichen von k_x und k_y jeweils getrennt ändern (2^d Möglichkeiten) sowie k_x und k_y vertauschen ($d!$ Möglichkeiten). Welche Linearkombinationen dieser entarteten Zustände dann als Energieeigenzustände bei verschwindendem Potential auftreten, hängt im Sinne einer entarteten Störungstheorie vom Potential selbst ab. Allerdings lassen sich Grenzfälle der möglichen Linearkombinationen diskutieren, die zu extremalen Inversen Besetzungszahlen führen.

Potential vorhanden ist, bilden sich im Rahmen einer entarteten Störungstheorie sofort wieder die Kombinationen aus ebenen Wellen mit den Wellenzahlen k und $-k$ aus, bei denen diese beiden Anteile zu gleichen Teilen überlagert sind.

Zunächst besteht die Möglichkeit, dass möglichst wenige der entarteten Zustände eingehen. Allerdings erfordert der Störoperator zumindest eine Kombination der Zustände mit entgegengesetztem Gesamtimpuls. In Ortsdarstellung entsteht abgesehen von Phasenfaktoren folglich:

$$\psi_{\min}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{2}{L^d}} \cos(\vec{k}\vec{x}). \quad (4.14)$$

Dem entgegengesetzten Fall entspricht die Kombination aller entarteten Zustände zu gleichen Teilen. Für den eben diskutierten Fall generischer Entartung entsteht somit:

$$\psi_{\max}(\vec{x}) = \sqrt{\frac{1}{2^d d! L^d}} \sum_{\mathcal{P}} \exp(i \mathcal{P}(\vec{k}) \vec{x}). \quad (4.15)$$

Die Operationen \mathcal{P} sollen dabei alle Permutationen und alle möglichen Vorzeichenkombinationen in den Komponenten eines Vektors ausführen. Die Summation läuft somit über $2^d d!$ Terme.

Für $d = 1$ sind die beiden Grenzfälle $\psi_{\min}(\vec{x})$ und $\psi_{\max}(\vec{x})$ identisch, aber in höheren Dimensionen ergibt sich ein Unterschied. Dieser lässt sich auch in den Inversen Besetzungszahlen wiederfinden. Am einfachsten ist dies für die Inverse Besetzungszahl im Impulsraum, da ja im Impuls lokalisierte Zustände vorliegen. Für Zustände der Form $\psi_{\min}(\vec{x})$ ergibt sich der Wert $P_{\vec{k}} = 1/2$, während bei $\psi_{\max}(\vec{x})$ alle $2^d d!$ entarteten Zustände gleichmäßig besetzt sind, also $P_{\vec{k}} = 1/2^d d!$ auftritt.

Im Phasenraum werden die im Impuls lokalisierten Zustände zu entsprechenden Streifen führen. In der Mehrzahl der Fälle werden diese Streifen wohlsepariert voneinander sein, da dazu nur die Wellenzahlkomponenten betragsmäßig ausreichend voneinander sowie von 0 und $\pm\pi$ entfernt sein müssen. Für zunehmende Systemgröße ist dieses „ausreichend“ hier öfter erfüllt, da die absolute Breite der Streifen im Phasenraum kleiner wird. Wenn nun diese Streifen wohlsepariert im Phasenraum auftreten, sind die Inversen Besetzungszahlen im Phasenraum mit denen im Impulsraum bis auf den Faktor $L^{-d/2}$ identisch.

Im Gegensatz zum Verhalten im Impuls- und im Phasenraum führt eine gleichmäßige Besetzung aller energetisch entarteten Zustände zu maximaler Inverser Besetzungszahl im Ortsraum. So ergibt sich für diesen Fall in zwei Dimensionen:

$$P_{\mathbf{x}} = \iint_{0 \times 0}^{L \times L} d^2 x [\psi_{\max}(\vec{x})]^4 = \frac{21}{8L^2}. \quad (4.16)$$

Für drei Dimensionen lautet das Ergebnis hingegen:

$$P_{\mathbf{x}} = \iiint_{0 \times 0 \times 0}^{L \times L \times L} d^3 x [\psi_{\max}(\vec{x})]^4 = \frac{61}{16L^3}. \quad (4.17)$$

Für die minimal mögliche Besetzung der entarteten Zustände führt eine analoge Integration zu den Werten $3/2L^2$ beziehungsweise $3/2L^3$ in zwei beziehungsweise

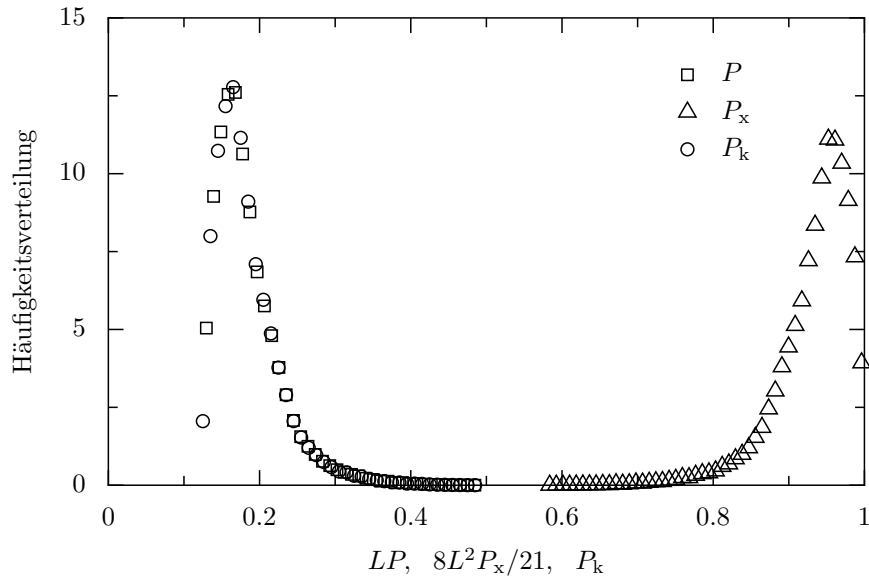


Abbildung 4.10: Verteilung der Inversen Besetzungszahlen im Phasenraum (Quadrate), im Ortsraum (Dreiecke) und im Impulsraum (Kreise) für verschwindende Unordnung $W \rightarrow 0$. Hierfür wurde ein generischer Fall von 8 entarteten Zuständen in zwei Dimensionen mit Wellenzahlkomponenten $k_{x/y} = \pm 5\pi/24$ und $k_{y/x} = \pm 3\pi/4$ bei einer Systemgröße von $L = 48$ verwendet, wo der Überlapp der Streifen in der Husimi-Funktion für die Wellenzahlen k_x und k_y bereits sehr klein ist. Die Verteilungen wurden unter Verwendung aller 8 Zustände sowie 10 000 Unordnungsrealisierungen erzeugt.

drei Dimensionen. Der Faktor $3/2$ entsteht durch die Integration des Kosinus in der Ortsdarstellung der Wellenfunktion und tritt in jeder Dimension auf. Allerdings gibt es für manche Zustände auf einem Gitter bisweilen Abweichungen durch Approximation der Integrale durch Summen.

In Abbildung 4.10 sind nun Häufigkeitsverteilungen der Inversen Besetzungszahlen im Phasen-, Orts- und Impulsraum für den Grenzfall verschwindender Unordnung gezeigt, wie sie im Mittel über viele Unordnungsrealisierungen entstehen. In der Abbildung wurde sich auf den Fall guter Separation von zwei vorgegebenen Wellenzahlen k_x und k_y beschränkt. Die Daten lassen sich sowohl mittels entarteter Störungstheorie wie auch der Diagonalisierung des vollen zweidimensionalen Anderson-Modells für sehr kleine Unordnungsstärke und Selektion der entsprechenden Zustände generieren.

Die Inversen Besetzungszahlen wurden zur besseren Vergleichbarkeit entsprechend dem Ergebnis für Zustände ψ_{\max} skaliert. Dadurch wird deutlich, dass die Inversen Besetzungszahlen im Impuls- und im Phasenraum die gleichen Eigenschaften haben und sich die Inversen Besetzungszahlen im Ortsraum genau gegenläufig verhalten. Das bestätigt die bisherige Diskussion voll und ganz.

Allerdings ist an dieser Stelle nochmals herauszustellen, dass diese Ergebnisse nur den generischen Entartungsfall umfassen. So ist es beispielsweise möglich, dass die Entartungen geringer ausfallen, wenn Wellenzahlkomponenten in zwei Raumrich-

tungen identisch sind. Andererseits ist in manchen Fällen die Zahl der energetischen Entartung der Zustände auch noch höher, wenn nämlich mehrere Zerlegungen eines Gesamtimpulses in Teilimpulse die selbe Energie zur Folge haben. Das führt letztendlich dazu, dass das Verhalten bereits im Grenzfall verschwindender Unordnungsstärke etliche nichtgenerische Effekte zeigt. In diesem Sinne sind die Verteilungen, wie sie in den Abbildungen 4.7 bis 4.9 zu sehen sind, recht kompliziert und nur schwerlich im Detail analysierbar.

Da nun aber zumindest ein recht detailliertes Verständnis des Grenzfalls $W \rightarrow 0$ auch in Dimensionen $d \geq 2$ gewonnen wurde, stellt sich die überaus spannende Frage, warum nun für geringe Unordnung ein Phasenraumverhalten vorzufinden ist, das als Funktion der Potentialstärke dem Aubry-André-Modell entspricht und somit genau umgekehrt zum Verhalten des eindimensionalen Anderson-Modells ist. Um dem nachzugehen, ist wieder die Kopplung von Impulseigenzuständen von Interesse, die durch das Zufallspotential entsteht. Wie im eindimensionalen Fall gilt hierfür auch in höheren Dimensionen, dass die Unordnung beliebige Impulszustände in gleicher Weise zu koppeln vermag. Es tritt an dieser Stelle also insbesondere keine Selektion von verschiedenen Impulsen statt, die miteinander stärker gekoppelt werden als andere Impulspaare, wie dies beim Aubry-André-Modell durch das quasiperiodische Potential der Fall ist. Damit stellt sich wie im eindimensionalen Fall des Anderson-Modells erneut die Frage nach der energetischen Distanz verschiedener Impulseigenzustände, denn diese wirkt selektiv auf die Stärke der Kopplung.

Während nun in einer Dimension nur Impulseigenzustände mit betragsmäßig ähnlichem Impuls stark gekoppelt werden, weil genau diese Zustände energetisch benachbart sind, bedingt die energetische Nachbarschaft in höheren Dimensionen keine solche Impulseinschränkung. Um das Bild der Fermi-Fläche zu gebrauchen, lässt sich dieser Sachverhalt wie folgt formulieren: In höheren Dimensionen sind Zustände auf oder in der Nähe der Fermi-Fläche zwar natürlich energetisch benachbart, können aber völlig verschiedene Impulskomponenten haben. Je nach Form der Fermi-Fläche mag beispielsweise der Betrag des Gesamtimpulses fixiert sein, wie es für freie Teilchen der Fall ist, aber die Impulskomponenten selbst können sehr verschiedene Werte annehmen. Diese Kopplungseigenschaften sind auch sofort anschaulich klar, denn in Dimensionen größer Eins kann das Unordnungspotential die Impulsrichtung einer ebenen Welle effizient durch Streuung verändern, was nur in einer Dimension nicht möglich ist. Bereits ein schwaches Unordnungspotential genügt deshalb, um große Teile des Impulsraums zu erreichen. In diesem Sinne ist bereits das Auftreten der energetischen Entartungen zwischen verschiedenen Impulszuständen ein Hinweis auf die Kopplungsmöglichkeiten, die sich aufgrund der großen Fermi-Fläche ergeben.

Damit wird auch offensichtlich, dass eine ballistische Bewegung der Teilchen in $d \geq 2$ bereits durch beliebig kleine Unordnungspotentiale unterdrückt wird, wenn nur die Systemgröße ausreichend groß ist. Gleiches gilt natürlich auch in einer Dimension, denn bereits bei der Einführung des Anderson-Modells wurde der Effekt angesprochen, dass die Überlagerung der Streueffekte vieler kleiner Potentialbarie-

ren ausreicht, um bei ausreichender Systemgröße stets Lokalisierung der Zustände zu erreichen. Das bedeutet für den eindimensionalen Fall wiederum aber auch, dass auf der selben Skala, auf der die Streuung effektiv wird, auch Lokalisierung stattfindet. Ab dem zweidimensionalen Fall ist das nicht mehr so, wie ebenfalls bereits im einleitenden Kapitel zum Anderson-Modell berichtet wurde. In der Tat ist das Auftreten eines diffusiven Bereichs im Anderson-Modell für $d \geq 2$ schon lange bekannt. Dieser Bereich wird typischerweise anhand seiner chaotischen Eigenschaften identifiziert, die beispielsweise im Energiespektrum zu beobachten sind [36]. Um herauszufinden, wie sich dieser chaotische Bereich im Phasenraum auswirkt, wurde in Abbildung 4.7 im unteren Teil das Resultat einer gängigen Analyse der Energieniveaustatistik dargestellt. Dazu wird die beobachtete Verteilung $p(s)$ des energetischen Abstands benachbarter Energieniveaus s in Einheiten des mittleren Niveauabstands verwendet. Damit lässt sich die Größe η definieren, die die Niveauabstoßung benachbarter Energieniveaus erfasst:

$$\eta = \frac{\int_0^b ds [p(s) - p_{\text{GOE}}(s)]}{\int_0^b ds [p_{\text{Poisson}}(s) - p_{\text{GOE}}(s)]} \quad (4.18)$$

Hierbei werden die analytisch bekannten Niveaustatistiken für das Gaußsche Orthogonale Ensemble (2.10) und die Poisson-Statistik (2.12) verwendet. Für b wird der erste Kreuzungspunkt der Verteilungen $p_{\text{GOE}}(s)$ und $p_{\text{Poisson}}(s)$ eingesetzt, also $b \approx 0.4729$. Für die Verteilung $p(s) = p_{\text{GOE}}(s)$ ergibt sich $\eta = 0$, während für $p(s) = p_{\text{Poisson}}(s)$ der Wert $\eta = 1$ auftritt. Das Verhalten von η als Funktion der Unordnungsstärke W in Abbildung 4.7 stellt eine bewährte Möglichkeit dar, um die verschiedenen Transportbereiche im Anderson-Modell zu unterscheiden. Man erkennt bei hoher Unordnungsstärke deutlich den Bereich der Poisson-Statistik, die für im Ortsraum lokalisierte Zustände auftritt. Im sich für kleinere Unordnungsstärke anschließenden Bereich tritt deutliche Niveauabstoßung auf und die Energieniveausabstandsstatistik wird befriedigend durch $p_{\text{GOE}}(s)$ beschrieben. Bei schwacher Unordnung treten hingegen große Werte für η auf, die ihre Ursache in der nicht-universellen Niveaustatistik haben, die typisch für den ballistischen Bereich in reguläre Geometrien ist.

Man kann nun deutlich erkennen, dass die verschiedenen Transportbereiche deutliche Auswirkungen auf die Inversen Besetzungszahlen im Phasenraum zeigen. Im ballistischen Bereich, bei dem keine Streuung ebener Wellen auftritt, ist die Verteilung der Inversen Besetzungszahlen gegenüber dem Fall verschwindender Unordnung noch nicht verändert. Sobald merkliche Abweichungen auftreten, was natürlich im Endeffekt die Kopplung von Impulzuständen bei unterschiedlicher Energie bedeutet, findet ein Übergang in den diffusiven Bereich statt. Die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum fällt ab diesem Punkt mit zunehmender Unordnungsstärke W . Der steile Anstieg der Inversen Besetzungszahl, der recht plötzlich für noch größere Unordnung einsetzt, ist deutlich mit dem Übergang in den lokalisierten Bereich verknüpft. Damit lassen sich im wesentlichen zwei Punkte festhalten. Erstens ist das

Auftreten eines diffusiven Bereichs mit einer Abnahme der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum gegenüber dem Fall ballistischen Transports verbunden. Zweitens ist beim Übergang vom ballistischen Bereich zu im Ort lokalisierten Zuständen ein plötzlicher Wechsel zu sehr geringer Besetzung im Phasenraum zu verzeichnen. Insgesamt ergibt sich eine deutliche Analogie zum Aubry-André-Modell. Um eine weiterführende Analyse zum Auftreten eines Phasenübergangs zu ermöglichen, sind deshalb nun Untersuchungen für verschiedene Systemgrößen notwendig.

4.6 Skalierungsverhalten

Bisher wurde für die verschiedenen Modelle und Dimensionen immer nur jeweils eine Systemgröße diskutiert. Das war zunächst ausreichend, um Gemeinsamkeiten und Unterschiede zwischen den Fällen zu diskutieren. Für die Untersuchung von Phasenübergängen sind die bisherigen Ausführungen aber völlig unzureichend, da hierfür der thermodynamische Grenzfall entscheidend ist, der sich für unendliche Systemgröße ergibt. Nun kann man diesen Grenzfall mit numerischen Methoden nicht erreichen, da endliche Rechenkapazitäten die Systemgrößen immer auch auf endliche Werte beschränken. Allerdings lohnt sich die Untersuchung für verschiedene Systemgrößen und deren Vergleich. Auf diese Weise kann man entsprechende Skalierungsverhalten extrahieren, die zeigen, in welche Richtung sich die Eigenschaften für zunehmende Systemgröße entwickeln. Durch sorgfältige Analyse kann man so Abschätzungen gewinnen, wie sich das System bei unendlicher Systemgröße verhält.

Zunächst soll der schon stark manifestierte Unterschied zwischen dem eindimensionalen Anderson-Modell und dem Aubry-André-Modell durch Vergleich unterschiedlicher Systemgrößen gefestigt werden. Dazu sind in Abbildung 4.11 die Mittelwerte der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum für verschiedene Systemgrößen dargestellt, wobei die Pfeile die Richtung zunehmender Systemgröße andeuten. In der Abbildung wurden die Inversen Besetzungszahlen im Phasenraum so skaliert, dass sie für die Grenzfälle verschwindender und insbesondere unendlicher Systemgröße aufeinander fallen. Dazu muss der Einfluss der Änderung der Streifenbreite im Phasenraum herausgerechnet werden, was aufgrund der bereits vorgenommenen Analyse der Grenzfälle kein Problem darstellt.

Im eindimensionalen Anderson-Modell wird deutlich, dass das Maximum in der Inversen Besetzungszahl und damit der Lokalisierungseffekt im Phasenraum mit zunehmender Systemgröße immer stärker hervortritt. Außerdem verschiebt sich das Maximum zu immer kleineren Unordnungsstärken. Das ist eine Konsequenz aus der Tatsache, dass für zunehmende Systemgrößen eine immer schwächere Unordnung ausreicht, um eine Lokalisierung der Zustände im Ortsraum zu erzeugen. Für im Ortsraum lokalisierte Zustände bei gegebener Unordnungsstärke wird wiederum für hinreichende Systemgröße der Fall erreicht, dass die Auflösung im Phasenraum in Ortsrichtung schlechter wird als die Ausdehnung des lokalisierten Zustands insge-

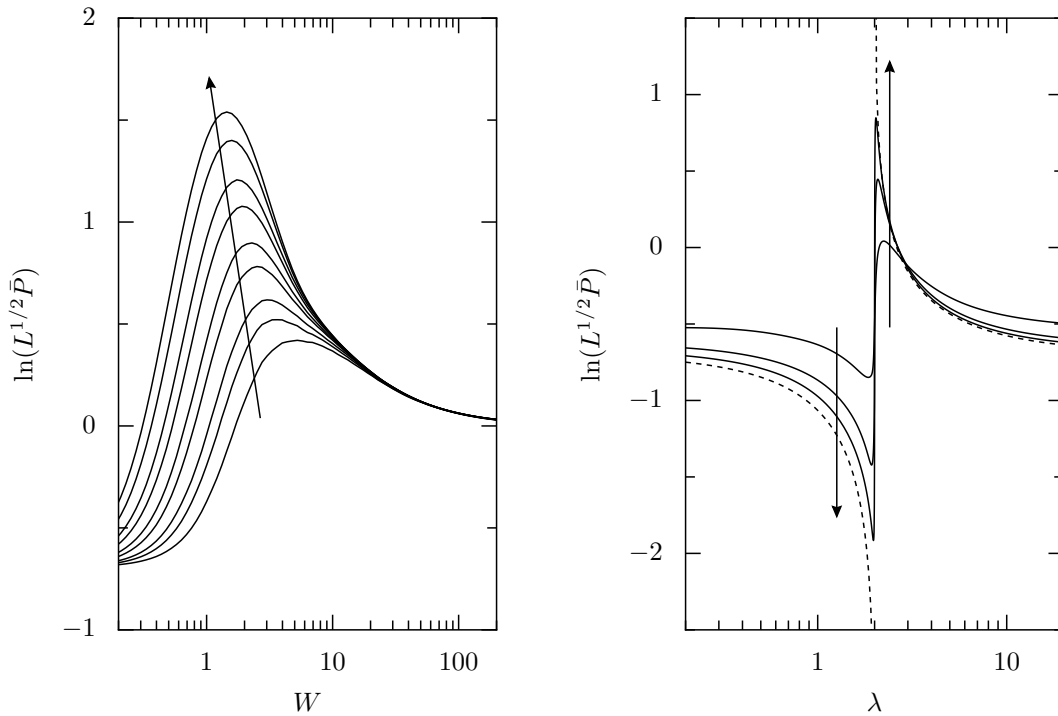


Abbildung 4.11: Mittelwerte der Inverse Besetzungszahl im Phasenraum P für das eindimensionale Anderson-Modell (links) und das Aubry-André-Modell (rechts) für jeweils verschiedene Systemgrößen. In den Kurvenscharen ist in Richtung zunehmender Systemgröße durch Pfeile markiert. Im Anderson-Modell sind Daten für $L = 128, 192, 256, 348, 512, 768, 1024, 1536$ und 2048 zu sehen, wobei die Mittelung über die Hälfte der Energieeigenzustände um die Bandmitte herum und 50 Unordnungsrealisierungen erfolgte. Im Aubry-André-Modell sind die Systemgrößen $L = 144, 1597$ und 10946 gezeigt. Die Mittelung erfolgte hier über alle symmetrischen Zustände. Gestrichelt dargestellt ist zudem eine Abschätzung für das Verhalten bei unendlicher Systemgröße nach [11].

samt. Dann wird die Besetzung des Ortsraums von der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum nicht mehr aufgelöst und entsprechend dominiert die Inverse Besetzungszahl im Impulsraum, die monoton fallend in der Unordnungsstärke ist. Für große Systeme werden für lokalisierte Zustände deshalb immer fallende Inverse Besetzungszahlen im Phasenraum zu beobachten sein. Da im eindimensionalen Anderson-Modell alle Zustände lokalisieren, wenn nur das System groß genug gewählt wird, muss im thermodynamischen Grenzfall $L \rightarrow \infty$ auch das Maximum in der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum zu verschwindender Unordnung hin skalieren.

Für das Aubry-André-Modell tritt hingegen für zunehmende Systemgröße immer deutlicher der sprunghafte Wechsel in der Besetzung des Phasenraums am Selbstdualitätspunkt $\lambda = 2$ hervor, bei dem im thermodynamischen Grenzfall ein Phasenübergang stattfindet. Für Potentialstärken direkt unterhalb dieses Übergangspunktes ist eine weiträumige Besetzung des Phasenraums mit zunehmender Sys-

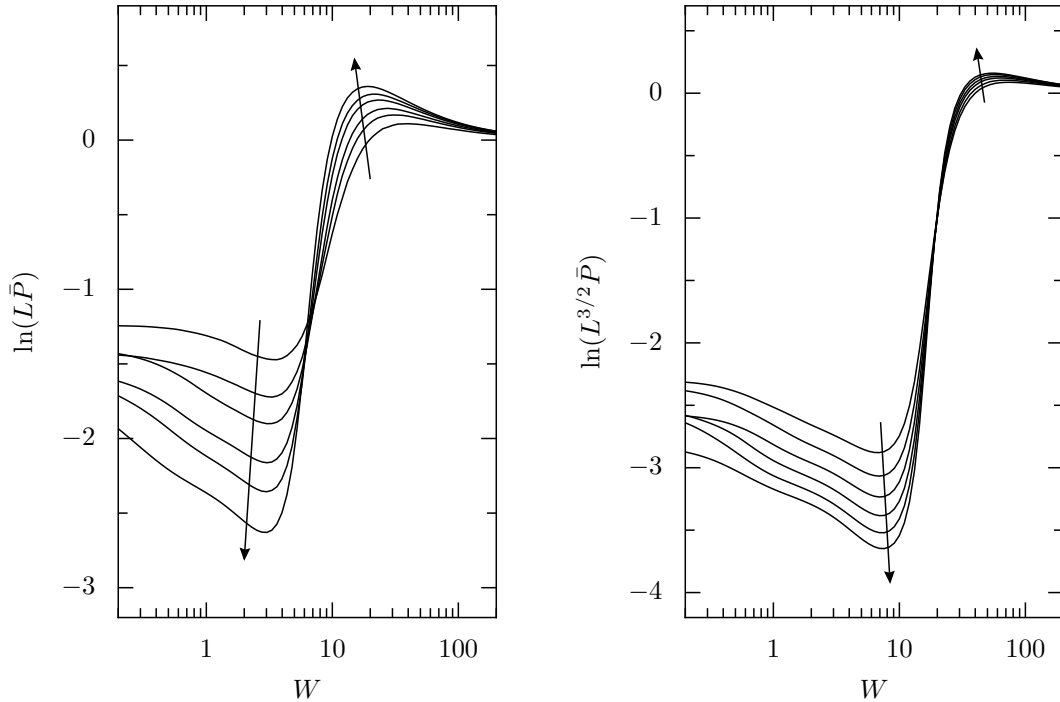


Abbildung 4.12: Mittelwerte der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum P für das zweidimensionale Anderson-Modell (links) und das dreidimensionale Anderson-Modell (rechts) für jeweils verschiedene Systemgrößen. In den Kurvenscharen ist die Richtung zunehmender Systemgröße durch Pfeile markiert. Im zweidimensionalen Fall sind Daten für $L = 16, 24, 32, 48, 64$ und 96 zu sehen, während im dreidimensionalen Fall die Systemgrößen $L = 14, 16, 18, 20, 22$ und 24 gezeigt sind. Die Mittelung erfolgte über die Hälfte der Energieeigenzustände um die Bandmitte herum und 50 Unordnungsrealisierungen (in $d = 2$ für $L \geq 64$ sowie in $d = 3$ für $16 \leq L \leq 20$ je 20 Realisierungen, in $d = 3$ für $L = 22$ nur 15 Realisierungen und in $d = 3$ für $L = 24$ nur 10 Realisierungen).

temgröße immer deutlicher beobachtbar, während direkt oberhalb des Phasenübergangs die Besetzung des Phasenraums immer mehr abnimmt. In Abbildung 4.11 ist anhand der zusätzlich gezeigten gestrichelten Linie auch eine Extrapolation für den thermodynamischen Grenzfall angegeben, die in [11] analytisch angegeben wurde. Die Abschätzung entstand unter Zuhilfenahme des Zwei-Zustands-Modells für die Grenzfälle verschwindenden und unendlichen Potentials sowie einer Padé-Analyse im Bereich des Selbstdualitätspunktes.

Die Abbildung 4.12 zeigt nun analog zur vorherigen Abbildung die Mittelwerte der Inversen Besetzungszahlen im Phasenraum für das zwei- und dreidimensionale Anderson-Modell. Leider sind die Systemgrößen, die hier numerisch erreicht werden können, deutlich kleiner als in den eindimensionalen Modellen zuvor. Das bedeutet, dass präzise Aussagen über den thermodynamischen Grenzfall kaum mehr möglich sind. Beispielsweise scheitert eine Padé-Analyse des Anderson-Übergangs in drei Dimensionen aufgrund der Limitierung auf viel zu kleine Systeme. Um eine Vorstellung von dem numerischen Aufwand zu vermitteln, sind in Tabelle 4.1 die

Systemgröße L	14	16	18	20	22	24
Rechenzeit [s]	293	830	2390	5730	13400	27900

Tabelle 4.1: Rechenzeiten in Abhängigkeit der Systemgröße L auf einem Knoten des Vektorrechners VPP des Leibniz-Rechenzentrums München für die vollständige numerische Lösung einer Unordnungsrealisierung des Anderson-Modells in drei Dimensionen und Bestimmung der Inversen Besetzungszahlen aller Zustände im Phasenraum. Die beiden Teilprobleme benötigen auf diesem Rechner bei geeigneter Implementation (Vektorisierung, Cache-Optimierung) in etwa die gleiche Rechenzeit. Allein der Hamilton-Operator benötigt für $L = 24$ ca. 1.5 GB Speicher, womit sowohl speicher- also auch zeitmäßig die maximale Systemgröße erreicht ist.

Rechenzeiten im dreidimensionalen Fall angegeben, die auf einem einzelnen Knoten des Vektorrechners VPP des Leibniz-Rechenzentrums München pro Unordnungsrealisierung und -stärke benötigt wurden. Für die größten betrachteten Systeme mit $L = 24$ in drei Dimensionen ergeben sich immerhin fast 8 Stunden für jeden solchen Rechenschritt.

In Abbildung 4.12 ist in erster Linie eine immer stärkere Ausprägung des Übergangs von großer Besetzung des Phasenraums im diffusiven Bereich zu geringer Besetzung im lokalisierten Bereich zu verzeichnen. Das deutet auf eine Manifestation dieser Bereiche im thermodynamischen Grenzfall hin. Allerdings ist dafür auch eine Skalierung dieser Bereiche in Bezug auf die Unordnungsstärke von Interesse. Dabei setzt sich zunächst der diffusive Bereich gegenüber dem ballistischen Bereich für kleine Unordnungsstärken durch. Dieser Übergang schlägt sich auch in der Form der Verteilungen der Inversen Besetzungszahlen im Phasenraum nieder. Um dies zu veranschaulichen, ist in Abbildung 4.13 die Standardabweichung $\sigma(P)$ gezeigt, wobei die selbe Skalierung wie für die Mittelwerte angewandt wurde. Im Wesentlichen ergibt sich ein vergleichbares Bild wie für die Mittelwerte. Die Standardabweichung wird im diffusiven Bereich erheblich unterdrückt, der besonders im dreidimensionalen Fall deutlich ausgeprägt ist. Das heißt, dass die Besetzung des Phasenraumes für die einzelnen Zustände ähnlich ist. Darin zeigt sich der universelle chaotische Charakter diffusiver Zustände, der sich aufgrund der starken Kopplung der Zustände in diesem Bereich ergibt.

Schwieriger ist die Analyse für den Übergang zu lokalisierten Zuständen selbst. Dazu wurde in Abbildung 4.14 die Position der Minima (offene Symbole) und Maxima (volle Symbole) der mittleren Inversen Besetzungszahl im Phasenraum aus Abbildung 4.12 extrahiert. Es zeigt sich, dass zunächst die Maxima in allen Dimensionen mit zunehmender Systemgröße zu geringerer Unordnungsstärke hin skalieren. Der Effekt ist so zu interpretieren, dass für lokalisierte Zustände bei gegebener Unordnungsstärke für ausreichende Systemgröße immer abfallende Inverse Besetzungszahlen im Phasenraum mit zunehmender Unordnungsstärke zu beobachten sind. Hier greift die Argumentation, die schon im eindimensionalen Fall angegeben wurde, unverändert.

Für die Minima der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum ist das Verhal-

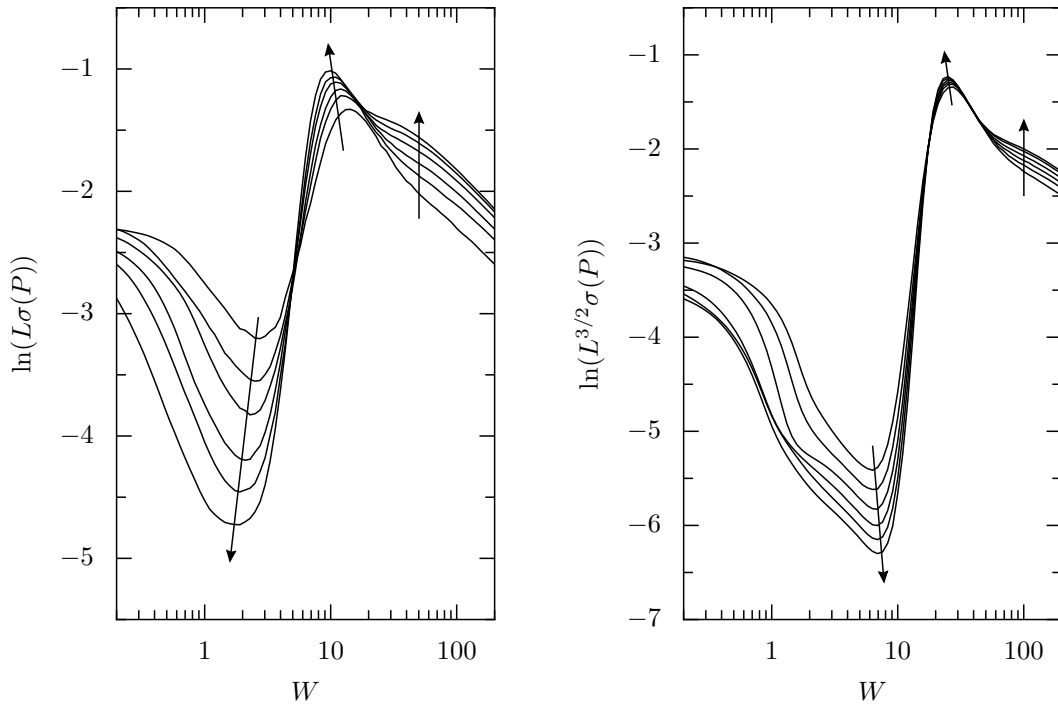


Abbildung 4.13: Standardabweichungen $\sigma(P)$ der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum P für das zweidimensionale Anderson-Modell (links) und das dreidimensionale Anderson-Modell (rechts) für verschiedene Systemgrößen. Es liegen die selben Daten wie in Abbildung 4.12 zugrunde.

ten differenzierter. Zunächst treten in einer Dimension gar keine Minima auf. Als Ursache wurde bereits die Lokalisierung im Phasenraum ermittelt, die schon für schwache Unordnung einsetzt. Auf diese Weise wird ein diffusiver Transportbereich verhindert. In zwei Dimensionen muss man nun feststellen, dass die Minima mit zunehmender Systemgröße zu kleineren Unordnungsstärken hin verschoben werden. Im Grunde bleibt auch keine andere Lösung, als dass der diffusive Bereich sogar zu verschwindender Unordnung hin skaliert wird, da das Anderson-Modell in zwei Dimensionen den marginalen Fall darstellt, bei dem sich gerade noch Lokalisierung im thermodynamischen Grenzfall für beliebig schwache Unordnung ergibt.

Im dreidimensionalen Anderson-Modell, bei dem für $L \rightarrow \infty$ ein Phasenübergang bei $W \approx 16.5$ auftritt, bewegen sich hingegen Minima und Maxima der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum mit zunehmender Systemgröße aufeinander zu. Hier wird also ein Skalierungsverhalten wie im Aubry-André-Modell gefunden, bei dem für zunehmende Systemgröße der Wechsel von großer Phasenraumbelegung zu starker Lokalisierung im Phasenraum immer deutlicher und plötzlicher auftritt. Der in Abbildung 4.14 gezeigte Skalierungsverlauf ist dabei mit einem Phasenübergang bei $W \approx 16.5$ bestens vereinbar, allerdings ist eine genaue Abschätzung des Übergangspunktes aus der Darstellung kaum möglich. Erheblich präzisere Aussagen können beispielsweise aus der Analyse des Energieniveauspektrums gewonnen

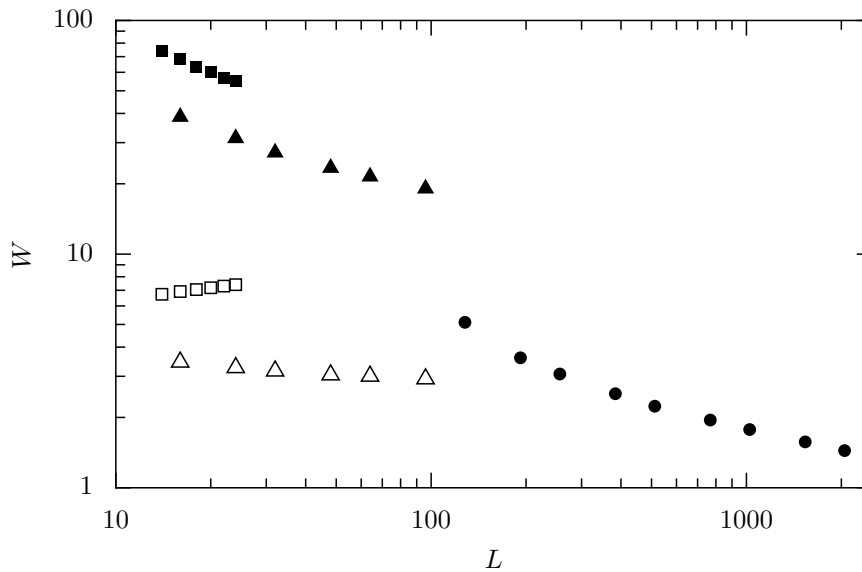


Abbildung 4.14: Position der Minima (offene Symbole) und Maxima (volle Symbole) der Mittelwerte der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum P im Anderson-Modell für die verschiedenen Systemgrößen und Dimensionen 1 (Kreise), 2 (Dreiecke) und 3 (Quadrate). Die Position der Minima und Maxima wurde aus den Abbildungen 4.11 und 4.12 extrahiert.

werden, wofür auch etwas größere Systeme verfügbar sind, weil keine Berechnung und Auswertung von Wellenfunktionen notwendig wird. Allerdings lässt sich der Punkt des Anderson-Übergangs trotzdem auch hier besser eingrenzen. Eine nahe-liegende Variante wäre die genauere Bestimmung der Position der Schnittpunkte der Kurven in Abbildung 4.12. Allerdings stellt man dabei fest, dass für die kleinen Systemgrößen noch gar kein Schnittpunkt auszumachen ist. Das wird auch an der Abbildung 4.15 deutlich. Dort ist die wie üblich skalierte mittlere Inverse Besetzungszahl gegenüber der Systemgröße für verschiedene Unordnungsstärken dargestellt. Man erkennt deutlich, dass das Monotonieverhalten im Bereich $15 \leq W \leq 20$ wechselt. Allerdings ist beispielsweise für $W = 19.1$ zunächst ein ganz leichter Abfall und nachher ein Anstieg auszumachen. Auch für den Fall $W = 17.4$ sollte auch diese Kurve für größere Systeme schließlich mit der Systemgröße ansteigen, da auch dieser Unordnungswert noch oberhalb des Phasenübergangs im dreidimensionalen Anderson-Modell bei $W \approx 16.5$ liegt. Dass man in Abbildung 4.12 keinen Schnittpunkt findet, zeigt auch bereits, dass die betrachteten Systeme einfach zu klein für präzise Aussagen sind. Allerdings ist anzumerken, dass es keineswegs das Ziel der Phasenraumuntersuchungen ist, nur wohlverstandene Eigenschaften bekannter Modelle zu reproduzieren. Die Erkenntnisse über die Bedeutung der Impulskopplung für das Auftreten von diffusivem Transport und Metall-Isolator-Übergängen sind aber ein Beweis für die interessante Sichtweise, die sich durch die Phasenraumanalyse ungeordneter Systeme erschließt.

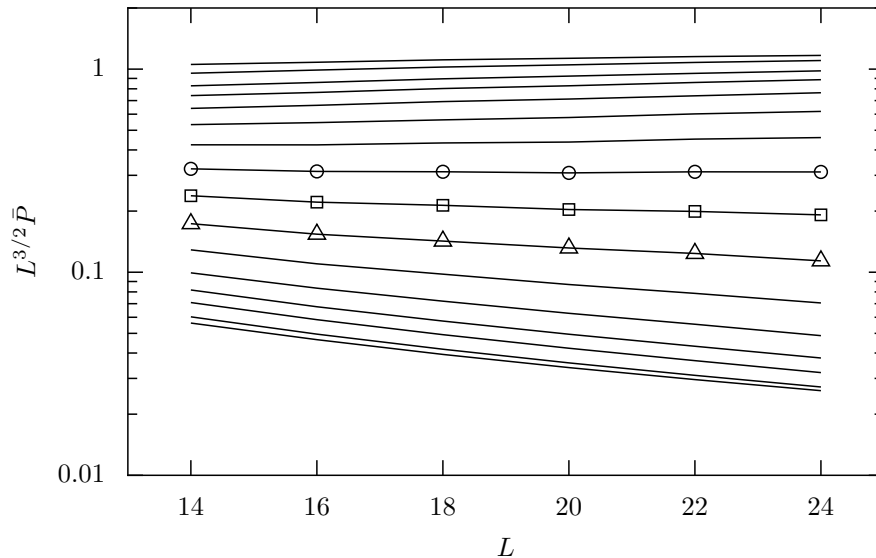


Abbildung 4.15: Mittelwerte der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum P im dreidimensionalen Anderson-Modell für die Unordnungsstärken $W = 6.9, 9.1, 11.0, 12.0, 13.2, 14.5, 15.8$ (Dreiecke), 17.4 (Quadrate), 19.1 (Kreise), $20.9, 22.9, 25.1, 27.5, 30.2, 36.3$ (von unten nach oben).

4.7 Zwei wechselwirkende Teilchen

Im Sinne eines Ausblicks soll die Phasenraumanalyse hier auf das Problem zweier wechselwirkender Teilchen in einem eindimensionalen ungeordneten System angewandt werden. Dieses Problem wurde vor nunmehr knapp einem Jahrzehnt von Shepelyansky aufgebracht [3], der einen Delokalisierungseffekt im Zusammenspiel von Unordnung und Wechselwirkung beobachtete. Er betrachtete dazu ein eindimensionales Anderson-Modell mit zwei Teilchen, die eine Hubbard-Wechselwirkung aufeinander ausüben.

Das Überraschende an der Beobachtung des Delokalisierungseffekts ist nun, dass zunehmende Unordnung allein stärkere Lokalisierung zur Folge hat, wie es auch in dieser Arbeit anhand des Anderson-Modells schon ausführlich diskutiert wurde. Ähnlich verhält es in wechselwirkenden Problemen mit zunehmender Wechselwirkungsstärke. Das grundlegende Modell in diesem Bereich der Festkörperphysik ist das Hubbard-Modell [59, 60, 61], das neben der kinetischen Energie auf einem Gitter einen Wechselwirkungsterm beinhaltet. Im Fall einer Hubbard-Wechselwirkung wird der einfache Fall betrachtet, dass die Wechselwirkungsenergie U genau dann auftritt, wenn sich zwei Teilchen auf dem selben Gitterplatz befinden. Das Hubbard-Modell ist für die Behandlung stark korrelierter Elektronen mit Spin ähnlich fundamental wie das Anderson-Modell für ungeordnete Probleme. Entsprechend umfangreich sind die vielen Einsatzbereiche des Hubbard-Modells, die hier unmöglich alle auch nur genannt werden können. Da an dieser Stelle das Hauptaugenmerk auf den eindimensionalen Fall gelegt werden soll, ist es zumindest geboten, die

sen Fall kurz zu umreißen. Im Grundzustand ergibt sich bei halber Füllung ein antiferromagnetisch isolierendes Verhalten und die niederenergetischen Anregungen zeigen eine Separation von Spin und Ladung. Die Lösung des eindimensionalen Falls erfolgt mittels des Bethe-Ansatzes [62] und enthält bereits eine Vielzahl von Phänomenen, die sich durch allgemeinere Formen der zunächst sehr speziellen Wechselwirkung noch weiter auffächern. So kann man beispielsweise auch Lokalisierung durch zunehmende Wechselwirkung studieren. Insgesamt ergibt sich eine riesige Palette von Modellen und insbesondere auch Kombinationsmöglichkeiten, für die Metall-Isolator-Übergänge zu diskutieren sind [63].

Um auf die Arbeit von Shepelyansky zurückzukommen, war die dort gemachte Beobachtung der Delokalisierung durch die Kombination aus Unordnung und Wechselwirkung zunächst entsprechend unerwartet. Allerdings ergaben sich schnell unabhängige Argumente und numerische Bestätigungen [64, 65, 66, 67, 68] für den Delokalisierungseffekt, allerdings auch kontroverse Diskussionen [69, 70]. Aus heutiger Sicht kann die Delokalisierung, die durch das Zusammenspiel von Unordnung und Wechselwirkung zumindest in bestimmten Parameterregionen entsteht, als gesichert angesehen werden. Kürzlich wurde auch erstmals eine vollständig analytische Erklärung für das Delokalisierungsverhalten angegeben [71]. In dieser Arbeit wurde dazu ein eindimensionales ungeordnetes System in Abschnitte geteilt und der Hilbertraum auf Fälle beschränkt, bei denen sich die beiden Teilchen auf benachbarten Abschnitten oder ein und demselben Abschnitt befinden. In letzterem Fall wird zusätzlich die Wechselwirkung aktiv. In diesem Rahmen konnte eine Delokalisierung durch die Wechselwirkung gezeigt werden.

Mit den bisherigen Arbeiten zum Delokalisierungsphänomen durch Unordnung und Wechselwirkung sind aber keineswegs die in diesem Zusammenhang interessante physikalischen Fragestellungen beantwortet, denn die dazu notwendigen Parameterregionen sind bisher nicht erschlossen. Insbesondere geht es dabei um experimentelle Befunde, die beispielsweise bereits in der Arbeit von Shepelyansky als Motivation angegeben wurden, nämlich die Beobachtung von Dauerströmen [72, 73] in metallischen Ringen, die deutlich über den Vorhersagen wechselwirkungsfreier Theorien liegen. Eine andere Klasse von Experimenten, für deren Erklärung die Einbeziehung von Wechselwirkung in die Theorien ungeordneter Festkörper ebenfalls als wahrscheinlicher Ausweg gilt, ist die Beobachtung metallischer Leitfähigkeit in zweidimensionalen Systemen. Mittlerweile sind zahlreiche Experimente in diesem Zusammenhang bekannt, über die der Artikel [4] einen Überblick gibt.

Das Problem ist nun, dass der Fall vieler wechselwirkender Teilchen in einem ungeordneten System sowohl für analytische wie auch numerische Arbeiten ein extrem schwieriges Problem darstellt. Die Beschränkung auf zwei Teilchen ist eine mögliche Vereinfachung, um den prinzipiellen Einfluss einer Wechselwirkung zu studieren. Eine Interpretation im Sinne eines vollen Vielteilchenproblems ist auf dieser Basis aber sehr schwierig. Zudem sollte angemerkt werden, dass insbesondere zahlreiche numerische Arbeiten in der Regel energetisch hoch angeregte Zweiteilchenzustände untersucht haben. Ähnlich wie beim Einteilchen-Anderson-Modell kann

ten so generische Eigenschaften vieler Zustände in der Mitte des Spektrums ermittelt werden, beispielsweise anhand der im Einteilchen-Problem wohletablierten Niveauabstandsstatistiken. Die physikalische Relevanz dieser Zustände beispielsweise für die Leitfähigkeit ist aber zweifelhaft, denn diese Eigenschaften sind im Wesentlichen durch den Vielteilchen-Grundzustand sowie niedrige Anregungen aus diesem Zustand bestimmt. Im wechselwirkungsfreien Fall ergeben sich die Vielteilchen-Wellenfunktionen durch Besetzung der Einteilchenzustände, wodurch bei Fermionen auch hochenergetische Einteilchenzustände physikalisch relevant sind. Im Gegensatz dazu sind hochangeregte Vielteilchen-Zustände durch die vergleichsweise geringen thermischen Anregungen im Festkörper nicht erreichbar. Deshalb sind Untersuchungen hochangeregter Vielteilchen-Zustände nur eingeschränkt interessant. Methoden, welche Eigenschaften einzelner Zustände untersuchen, sind hier zu bevorzugen, insbesondere wenn sie auf den Grundzustand angewandt werden.

Die in dieser Arbeit für das nichtwechselwirkende Problem diskutierte Phasenraumanalyse ist in dieser Hinsicht geeignet, auf den Fall mit Wechselwirkung angewandt zu werden. Dazu soll hier der Grundzustand für zwei spinlose Fermionen, die eine Coulomb-Wechselwirkung aufeinander ausüben, untersucht werden. Darüber hinaus soll der Hamilton-Operator einem eindimensionalen Anderson-Modell entsprechen, so dass sich insgesamt ergibt:

$$H = -t \sum_{\langle m,n \rangle} c_m^\dagger c_n + W \sum_n v_n c_n^\dagger c_n + U \sum_{m \neq n} \frac{1}{|m-n|} c_n^\dagger c_m^\dagger c_m c_n. \quad (4.19)$$

Der neu eingeführte Parameter U bezeichnet die Wechselwirkungsstärke. Die Wechselwirkungsenergie hängt vom Abstand der beteiligten Gitterplätze $|m-n|$ ab. Für die numerische Bestimmung des Grundzustands wird hier die Lanczos-Methode verwendet [74].

Die Verallgemeinerung der Phasenraumdarstellung erfolgt dabei für mehrere Teilchen genau wie für mehrere Dimensionen durch entsprechend hochdimensionale Integrale über die unabhängigen Koordinaten in der Ortsdarstellung der Wellenfunktion. Auch für ununterscheidbare Teilchen, im Ortsraum parametrisiert durch die zwei Koordinaten m und n , soll dabei unter Ausnutzung der Symmetrie $\psi(m, n) = -\psi(n, m)$ über den vollen Produktraum integriert werden. Dadurch wird sichergestellt, dass sich die Symmetrieeigenschaften nicht auf die Besetzungsmaße auswirken. Beispielsweise kann man dann nämlich den Fall zweier unterscheidbarer Teilchen weiterhin durch Kombination der symmetrischen Zustände (Bosonen) und der anti-symmetrischen Zustände (Fermionen) erhalten.

Für den Grundzustand zweier wechselwirkender Teilchen ergibt sich das in Abbildung 4.16 gezeigte Verhalten für die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum. Insbesondere im Kontext der vorangegangenen Diskussion von Einteilchenproblemen werden daran einige Dinge deutlich. Zunächst verhält sich die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum ähnlich zum eindimensionalen Fall ohne Wechselwirkung. Die Auswirkung der Wechselwirkung stellt in diesem Sinne keine gravierende Änderung

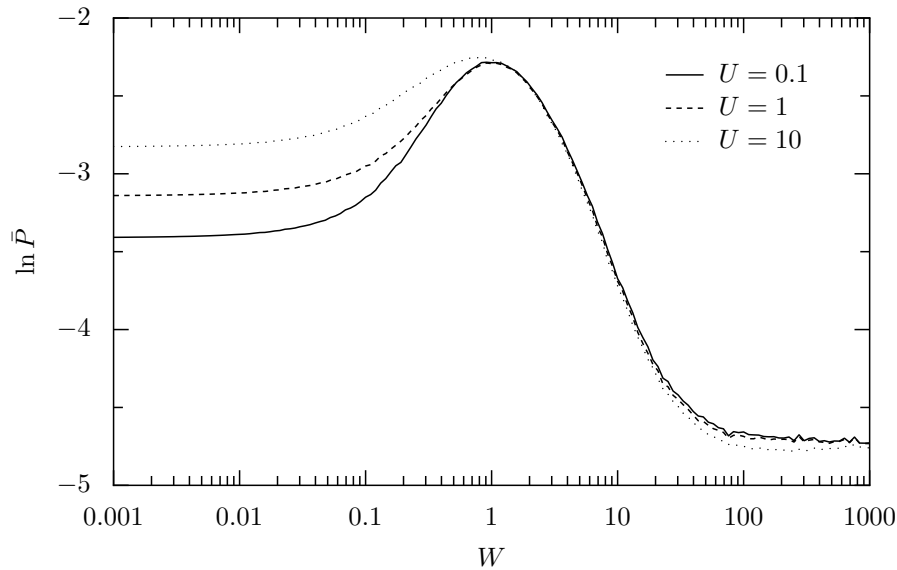


Abbildung 4.16: Inverse Besetzungszahl im Phasenraum P für den Grundzustand zweier spinloser Fermionen im eindimensionalen Anderson-Modell mit Coulomb-Wechselwirkung gemäß (4.19). Gezeigt sind Mittelwerte, die durch 1 000 Realisierungen bei einer Systemgröße von $L = 64$ bestimmt wurden. Für die Wechselwirkungsstärke U wurden die Werte 0.1 (durchgezogen), 1 (gestrichelt) und 10 (gepunktet) verwendet.

dar, wie es beispielsweise beim Übergang vom eindimensionalen zum zweidimensionalen Anderson-Modell der Fall ist. Zudem ist zu erkennen, dass die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum bei kleiner Unordnungsstärke durch die Wechselwirkung deutlich ansteigt, während für große Unordnungsstärke ein leichter Abfall zu beobachten ist. Beide Effekte sowie auch ihre unterschiedliche Intensität lassen sich recht leicht erklären.

Im Fall geringer Unordnung muß zunächst festgestellt werden, dass der Grundzustand ohne Wechselwirkung aus den zwei energetisch niedrigsten Einteilchenzuständen gebildet wird. Diese Zustände sind somit ebene Wellen mit kleinem Impuls, die räumlich einen erheblichen gegenseitigen Überlapp haben. Mit zunehmender Wechselwirkung wird solch ein Zustand nun aber energetisch ungünstig und eine räumliche Separation der zwei Teilchen entsprechend vorteilhaft, denn dadurch lässt sich die Wechselwirkungsenergie herabsetzen. Im wechselwirkungsfreien Fall wurde eine ähnliche Lokalisierung in der Ortskoordinate auch beobachtet, sobald eine kleine Unordnung aktiv wurde. Für den Fall zweier wechselwirkender Teilchen bedeutet das, dass die Wechselwirkung den Lokalisierungseffekt im Phasenraum, der aus dem nichtwechselwirkenden Fall her bekannt ist, für verschwindende und kleine Unordnung verstärkt. Das entspricht genau der Beobachtung aus Abbildung 4.16.

Bei hoher Unordnung ist ein kleiner, umgekehrter Effekt zu beobachten, dass die Inverse Besetzungszahl im Phasenraum durch Wechselwirkung geringfügig sinkt. Ohne Wechselwirkung werden die zwei Teilchen in diesem Grenzfall in den zwei tiefsten Potentialmulden des Anderson-Modells lokalisieren. Durch entsprechend

starke Wechselwirkung wird nun erreicht, dass die lokalisierten Zustände räumlich separiert sein müssen. Falls sie das nicht sind und die Wechselwirkung ausreichend groß ist, wird entsprechend auf andere tiefe Potentialmulden ausgewichen, die weiter auseinander liegen. Zusammen mit der endlichen Auflösung im Phasenraum wird diese Separation auch im Phasenraum sichtbar, indem die Besetzung des Phasenraums im Mittel geringfügig steigt.

Insgesamt muss also festgestellt werden, dass sich die Besetzung des Phasenraums unter dem Einfluss von Wechselwirkung genau so verhält, wie es anhand einfacher Überlegungen zu erwarten ist. Dieses Ergebnis ist deshalb aber keineswegs uninteressant. Vielmehr bestätigt diese Beobachtung, dass der Delokalisierungseffekt durch Wechselwirkung und Unordnung recht subtil ist. Im Grunde ist der Bereich mittlerer Unordnungsstärke interessant. Eine Wechselwirkung kann in diesem Fall dazu beitragen, dass die ursprünglichen Einteilchenzustände gegenseitig Impulse austauschen können, was eine Delokalisierung im Phasenraum unterstützt. Einen sehr kleinen Effekt in dieser Richtung kann man auch in Abbildung 3.3 für mittlere Unordnungsstärken $1 \leq W \leq 10$ erkennen. Allerdings ist das Phasenraumverhalten insgesamt gesehen für zwei wechselwirkende Teilchen in einer Dimension nicht verschieden von dem, was in diesem Problem ohne jede Wechselwirkung beobachtet wird. Das gilt insbesondere für die Änderung der Phasenraumbesetzung bei kleiner, aber zunehmender Unordnungsstärke. Hinweise auf einen Wechsel der Steigung der Inversen Besetzungszahl im Phasenraum als Funktion der Unordnungsstärke, wie es beim Übergang von einer zu zwei Dimensionen beobachtet wurde, sind nicht zu erkennen.

Ein interessanter Fall ergibt sich möglicherweise aber in zwei Dimensionen, wenn dort eine Wechselwirkung die Übertragung von Impulsen unterstützt. Unter Umständen lässt sich dann beobachten, dass der diffusive Bereich für zunehmende Systemgröße nicht mehr nach Null skaliert. Allerdings ist dieser Fall mit dem hier verwendeten Verfahren, Zustände und Phasenraumbesetzung numerisch zu bestimmen, auf der momentan verfügbaren Rechenkapazität nicht handhabbar. Andererseits ergeben sich vielleicht in Zukunft alternative Untersuchungsmöglichkeiten, wobei die Einbeziehung endlicher Füllung, also deutlich mehr als zwei Teilchen, ebenso entscheidend sein mag. Das Phasenraumkonzept, das dem quantenmechanischen Charakter der Teilchen in Form endlicher Auflösung in Orts- und Impulsrichtung in bemerkenswerter Weise Rechnung trägt, könnte jedenfalls interessante physikalische Einblicke erlauben.

5 Zufallsmatrixmodell für wechselwirkende Vielteilchensysteme

Nachdem in den vorangegangenen Kapiteln mit der dort diskutierten Phasenraum-analyse interessante Einblicke in Zusammenhang mit dem Auftreten von Metall-Isolator-Übergängen und diffusivem Transport in ungeordneten Systemen gefunden wurden, stellte sich abschließend aber auch heraus, dass bestimmte, physikalisch besonders relevante Bereiche auf die Weise nur schwer zu erfassen sind. Als Ursache ist die enorme Komplexität der Problemstellung auszumachen, die sich beispielsweise im Rahmen numerischer Analysen diskreter Modelle in entsprechend großen Hilbert-Räumen widerspiegelt, die für wechselwirkende Probleme auftreten.

Es gibt verschiedene Herangehensweisen, um diese Probleme zu umgehen. Eine Möglichkeit stellen numerische Methoden dar, die die Hilbert-Räume auf beispielsweise für Grundzustandseigenschaften physikalisch relevante Teile reduzieren. In diesem Zusammenhang ist beispielsweise die Methode der Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG) zu nennen [75]. Ein Durchbruch bei der Erklärung zahlreicher experimenteller Befunde in wechselwirkenden Vielteilchenproblemen ist auf die Weise bisher aber nicht gelungen, weil relevante Parameterbereiche nicht erschlossen sind. Im Fall der DMRG ergeben sich beispielsweise erhebliche Schwierigkeiten bei der Betrachtung über eindimensionale Systeme hinaus.

Eine Alternative stellen Approximationen des ursprünglich wechselwirkenden Problems durch ein effektives Einteilchenbild dar, wie dies beispielsweise im Rahmen der Hartree-Fock Methode durchgeführt wird. Das effektive Einteilchenbild ergibt sich, indem man die Vielteilchen-Wellenfunktionen, speziell die des Grundzustands, durch Besetzung geeigneter Einteilchenzustände approximiert. In dem so definierten zugehörigen Einteilchenproblem ist die Wechselwirkung zwischen den Teilchen durch eine effektive Wechselwirkung eines Teilchens mit den restlichen Teilchen ersetzt. Je nach Problemstellung können Wechselwirkungen auf diese Weise befriedigend berücksichtigt werden. Die eigentlichen Korrelationen zwischen wechselwirkenden Teilchen werden in einem effektiven Einteilchenbild aber nicht wiedergegeben.

Deswegen soll hier eine ganz andere Herangehensweise an wechselwirkende Probleme vorgestellt werden, die sich dem Problem von anderer, abstrakterer Sicht stellt. Dazu soll die Methode der Zufallsmatrizen um allgemeine Zweiteilchenwechselwirkungen ergänzt werden.

5.1 Zufallsmatrizen

Die Motivation für die Beschäftigung mit Zufallsmatrizen entstammt der Beobachtung, dass viele physikalische Problemstellungen im Detail von so vielen Parametern abhängen, dass eine theoretische Erfassung der generisch vorliegenden Problemstellung von den speziellen Details losgelöst werden sollte. In diesem Licht kann man beispielsweise das Anderson-Modell sehen. Es ist eine erhebliche, aber überaus sinnvolle Abstraktion, statt der Details eines ungeordneten Festkörpers nur global eine Unordnungsstärke festzulegen. Es stellt sich heraus, dass dieses Vorgehen überaus erfolgreich ist. Eine zusätzliche Motivation entsteht letztendlich auch dadurch, dass der Übergang zu immer größeren Systemen beispielsweise im Fall ungeordneter Systeme zu einer Selbstmittelung führt. Das bedeutet, dass generische Eigenschaften, was auch Fluktuationen mit einbezieht, schließlich über Spezialitäten einzelner Realisierungen siegen, wenn allein das System groß genug gewählt wird.

Bei den Zufallsmatrizen [20] ist diese Herangehensweise konsequent fortgesetzt. Anstatt die mikroskopischen Eigenschaften der Zustände eines Systems zu vernachlässigen, werden die spezifischen Eigenschaften des Hamilton-Operators selbst ignoriert. Die einzig verbleibende Information beinhaltet die Raum-Zeit-Symmetrie des Systems. Darüber hinaus wird der Hamilton-Operator zufällig gewählt. Die konzeptionelle Idee der Anwendung von Zufallsmatrizen auf physikalische Systeme stammt von Wigner aus den fünfziger Jahren des vergangenen Jahrhunderts, der damit Eigenschaften der Energiespektren von Atomkernen untersuchte. Da umfangreiche historische Einführungen zur Entwicklung der Zufallsmatrixtheorie verfügbar sind [76], braucht an dieser Stelle nicht weiter darauf eingegangen werden. Es sei jedoch angemerkt, dass der zitierte Artikel [76] die Einleitung der Spezialausgabe Heft 12, Band 63 der Zeitschrift „Journal of Physics A: Mathematical and General“ zum Thema Zufallsmatrixtheorie ist und der ganze Heft überaus interessante und aktuelle Artikel zu verschiedensten Anwendungsgebieten der Zufallsmatrixtheorie enthält.

An dieser Stelle sollen zwei elementare Symmetrieklassen von Zufallsmatrizen kurz eingeführt werden, die im Rahmen dieser Arbeit von Interesse sind. Die erste Symmetrieklasse ist die des sogenannten Gaußschen Orthogonalen Ensembles (GOE). Dieses ist invariant unter orthogonalen Transformationen. Beim Gaußschen Unitären Ensemble (GUE) wird hingegen Invarianz unter unitären Transformationen gefordert. Bei der Interpretation der Matrizen als Hamilton-Operatoren bedeuten diese beiden Ensembles zunächst, dass für beide Fälle eine Invarianz unter Rotation der Basis vorliegt. Beim Gaußschen Orthogonalen Ensemble ist zudem eine Zeitumkehrsymmetrie gegeben, die sich in Form der Einschränkung auf reelle symmetrische Matrizen zeigt. Das Gaußsche Unitäre Ensemble beschreibt hingegen den allgemeineren Fall hermitescher Matrizen. Über diese Symmetrieeinschränkungen hinaus sollen die Matrixelemente aber statistisch unabhängig gewählt werden.

Durch die geforderten Invarianzen der Ensembles unter entsprechenden Basistransformationen ist die Verteilung der Matrixelemente bereits auf eine Gauß-

Verteilung festgelegt. Das liegt daran, dass bei einer Transformation jedes Element der Matrix in der neuen Basis in der Regel aus einer Kombination vieler Elemente der Matrix in der alten Basis gebildet wird. Nach dem zentralen Grenzwertsatz muss dann die Verteilung der Matrixelemente bereits gauß-förmig sein. Das bedeutet natürlich auch, dass eine vollständige Charakterisierung bereits durch die ersten und zweiten Momente der Verteilungen der Matrixelemente gegeben ist. Durch Analyse von Basistransformationen lässt sich auch direkt eine Verteilungsfunktion $P(h)$ für die Matrizen h der Matrix-Ensembles erzeugen [77]. Dabei ergibt sich:

$$P(h) = \exp \left(- a \operatorname{Tr} h^2 + b \operatorname{Tr} h + c \right). \quad (5.1)$$

Interessant ist an sich nur der erste Term, denn die weiteren Terme ermöglichen nur eine zusätzliche Konstante in der Diagonalen, also eine Verschiebung des Energiespektrums. Für die Matrixelemente selbst gilt im Fall reeller, symmetrischer Matrizen also:

$$P(h) \sim \exp \left(- \sum_i h_{ii}^2 - 2 \sum_{i<j} h_{ij}^2 \right). \quad (5.2)$$

Die Verteilungen der einzelnen Matrixelemente sind unabhängig voneinander, weil die Matrixelemente in der Verteilungsfunktion $P(h)$ als Produkte auftreten. Die Varianz in den Diagonaleinträgen ist um einen Faktor 2 größer als die der Nichtdiagonaleinträge, da letztere gemäß der Symmetrie $h_{ij} = h_{ji}$ zweimal vorkommen. Für hermitesche Matrizen tauchen in der Verteilungsfunktion auch die Imaginärteile für die Nichtdiagonaleinträge auf und es gilt:

$$P(h) \sim \exp \left(- \sum_i h_{ii}^2 - 2 \sum_{i<j} \operatorname{Re}(h_{ij})^2 - 2 \sum_{i<j} \operatorname{Im}(h_{ij})^2 \right). \quad (5.3)$$

Demnach sind Realteil und Imaginärteil für die Nichtdiagonaleinträge im Gaußschen Unitären Ensemble ebenfalls unabhängige Zufallsgrößen.

Es stellt sich nun heraus, dass Eigenwerte und Eigenvektoren für Zufallsmatrizen im Grenzfall unendlicher Matrixgröße viele universelle Eigenschaften zeigen, die in zahlreichen Fällen sogar analytisch gegeben sind. Aber auch schon für recht kleine Matrizen, die beispielsweise numerisch zugänglich sind, werden diese universellen Eigenschaften häufig sehr gut approximiert. Beispielsweise ergibt sich die Niveauabstandsverteilung (2.10) in der angegebenen Form für 2×2 Matrizen, aber der Fall unendlich großer Matrizen unterscheidet sich davon nur um weniger als 1%.

In der Zufallsmatrixtheorie bleibt neben den Symmetrieklassen nur eine globale Skala bestehen, nämlich die der Varianz der Matrixelemente. Diese Skala taucht auch wieder im Eigenwertspektrum der Ensembles in Form des mittleren Niveauabstands Δ auf. Wenn man diese Energieskala global verwendet, bleibt gar kein freier Parameter mehr übrig. In diesem Sinne erzeugen Zufallsmatrizen universelle Vorhersagen, die beispielsweise beim Anderson-Modell im Bereich diffusiven Transports sehr gut erreicht werden, wie schon bei der Einleitung zum Anderson-Modell

in Kapitel 2 berichtet wurde. Auch bei der ursprünglich ersten physikalischen Anwendung der Zufallsmatrixtheorie zur statistischen Untersuchung der Zustände von großen Atomkernen ist die Approximation sehr gut. Als ein weiteres Beispiel seien quantenmechanische Billards genannt, die aufgrund ihrer Form eine chaotische klassische Dynamik aufweisen. All diese Beispiele aus sehr verschiedenen Bereichen der Physik zeichnen sich durch ihre große intrinsische Komplexität aus, bei der ein Verhalten erreicht wird, das sehr gut durch Zufallsmatrizen angenähert werden kann. In diesem Sinne kann die Zufallsmatrixtheorie als interessanter, abgesehen von Symmetrien parameterfreier Grenzfall quantenmechanischer Probleme aufgefasst werden.

5.2 Zweiteilchenwechselwirkung

Ein Nachteil der Zufallsmatrixbeschreibung besteht darin, dass dabei jegliche spezielle Information über das zu beschreibende System zugunsten der Vereinfachung verloren geht. Will man nun beispielsweise den Einfluss von Wechselwirkung auf die Dynamik der Teilchen untersuchen, hilft die Zufallsmatrixbeschreibung in der konventionellen Form nicht weiter. Konsequenterweise sollte man dann eine Zweiteilchenwechselwirkung im Sinne einer Zufallsmatrix mit einem gegebenen Einteilchenproblem kombinieren, wobei Unterschiede zur Zufallsmatrixtheorie beobachtet werden können [78, 79], in der diese Wechselwirkung nicht explizit enthalten ist. Für die Beschreibung chaotischer Einteilchendynamik ist es darüber hinaus sinnvoll, das Einteilchenproblem selbst auch durch eine Zufallsmatrix zu beschreiben [21]. Der Hamilton-Operator hat somit folgende Gestalt:

$$H = \sum_{i,j} h_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} u_{ij;kl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k, \quad (5.4)$$

wobei die Zustände $|i\rangle = c_i^\dagger |-\rangle$ eine hier nicht näher spezifizierte Einteilchenbasis ohne Berücksichtigung von Spinfreiheitsgraden bilden, wobei $|-\rangle$ den Vakuumzustand bezeichnet. Für die Matrix h_{ij} wird eine Zufallsmatrix aus einem der zuvor diskutierten Ensembles gewählt. Die Zweiteilchenmatrixelemente sollen analog zum Einteilchenproblem gauß-förmig verteilt sein, weshalb die Diskussion auch für diese Matrixelemente auf erste und zweite Momente beschränkt werden kann. Da der Einteilchenoperator invariant unter orthogonalen beziehungsweise unitären Transformation der Einteilchenbasis ist, soll gleiches auch für den Zweiteilchenoperator gelten. Abhängig von den Vertauschungssymmetrien des Zweiteilchenoperators ergeben sich verschiedene Ensembles von Zweiteilchenoperatoren, die nachfolgend diskutiert werden.

Zuvor ist es aber auch interessant, den Hamilton-Operator (5.4) in der Basis der Einteilcheneigenzustände zu betrachten. Dies sei hier durch griechische Buchstaben

angedeutet:

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} u_{\alpha\beta;\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma}. \quad (5.5)$$

Die Eigenwerte ϵ_{α} bilden dabei ein Zufallsmatrixspektrum, das unabhängig von den Zweiteilchenmatrixelementen ist. Durch die geforderte Invarianz des Zweiteilchenoperators unter orthogonalen beziehungsweise unitären Transformation der Einteilchenbasis bleiben die statistischen Eigenschaften des Zweiteilchenoperators bei der Transformation in die Einteilcheneigenzustände bestehen. Physikalisch relevante Wechselwirkungen, wie beispielsweise eine Coulomb-Wechselwirkung ohne oder mit Abschirmung, sind in einer bestimmten Einteilchenbasis, typischerweise der Ortsbasis, festgelegt und besitzen dort keine Fluktuationen. Es ist aber dennoch sinnvoll, Fluktuationen der Wechselwirkungsmatrixelemente zu diskutieren nämlich genau in der Basis der Einteilcheneigenzustände [22]. Damit ist eine schlüssige Motivation gegeben, den Hamilton-Operator (5.4) zu verwenden, dessen Ensembleeigenschaften mit dem in Gleichung (5.5) angegebenen Fall übereinstimmen.

5.2.1 Mittelwerte

Bei der Wechselwirkung sind zunächst die Mittelwerte der Wechselwirkungsmatrixelemente interessant. Diese können in Analogie zu den schon diskutierten Zufallsmatrizen aufgrund der geforderten Invarianz unter Basistransformationen nur in der Diagonalen auftreten. Für den Fall von Fermionen ohne Spin sind somit nur Matrixelemente der Form $u_{ij;ij}$ betroffen. Bezeichnet man deren Mittelwert mit \bar{u} ergibt sich im Hamilton-Operator (5.4) der Energiebeitrag \bar{U} aufgrund der Mittelwerte der Wechselwirkung:

$$\bar{U} = \frac{1}{2} \bar{u} \sum_{i \neq j} n_i n_j = \frac{1}{2} \bar{u} (n^2 - n). \quad (5.6)$$

Der Operator $n_i = c_i^{\dagger} c_i$ bezeichnet dabei den Teilchenzahloperator und n ist die Teilchenzahl selbst, die im Problem (5.4) konstant ist und in diesem Sinne eine gute Quantenzahl darstellt. Es sei angemerkt, dass man in dieser Diskussion auch den Spin mit einbeziehen kann, wobei dann weitere Möglichkeiten für Mittelwerte der Matrixelemente auftreten und dabei insbesondere ein zusätzlicher Energiebeitrag entsteht, der von der ebenfalls guten Quantenzahl Gesamtspin abhängt. Die zweifelsohne interessantesten Aspekte, die eine solche Erweiterung beinhaltet, übersteigen aber den inhaltlichen Rahmen dieser Arbeit.

5.2.2 Fluktuationen in orthogonalen Zweiteilchenensembles

Zunächst sollen die Fluktuationen der Wechselwirkungsmatrixelemente für die Invarianz unter orthogonalen Transformationen diskutiert werden. Die Wechselwir-

kungsmatrix muss dann reell und symmetrisch sein. Also gilt $u_{ij;kl} = u_{ij;kl}^* = u_{kl;ij}$. Darüber hinaus sind drei verschiedene Fälle zu unterscheiden.

Eine erste Möglichkeit ist durch die Invarianz der Matrixelemente $u_{ij;kl}$ unter allen 24 Vertauschungen der Indizes $ijkl$ gegeben:

$$u_{ij;kl} = u_{ji;kl} = \dots \quad (5.7)$$

Diese Eigenschaft ist bei einer δ -förmigen Wechselwirkung gegeben, denn diese lautet in der Basis reel gewählter Einteilcheneigenzustände:

$$u_{\alpha\beta;\gamma\delta} \sim \int d^d r \psi_\alpha(\vec{r}) \psi_\beta(\vec{r}) \psi_\gamma(\vec{r}) \psi_\delta(\vec{r}) \quad (5.8)$$

und ist invariant unter Vertauschungen der vier Wellenfunktionen. Für den Fall spinloser Fermionen, bei dem nur antisymmetrische Anteile der Wechselwirkungsmatrixelemente beitragen, tritt dieses Ensemble aber gar nicht auf, denn aufgrund der Symmetrie folgt $u_{ij;kl} - u_{ji;kl} = 0$. Eine δ -förmige Wechselwirkung kann im Fall spinloser Fermionen auch keine Wirkung entfalten.

In einem zweiten Fall kann man die folgende Symmetrie betrachten:

$$u_{ij;kl} = u_{ji;lk} = u_{kl;ij} = u_{lk;ji} = u_{kj;il} = u_{jk;li} = u_{il;kj} = u_{li;jk}. \quad (5.9)$$

Diese Eigenschaften werden von beliebigen lokalen Zweiteilchenwechselwirkungen $u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = u(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ erfüllt, wobei die Symmetrie eine Folge der Vertauschbarkeit identischer Teilchen ist. Um die zweiten Momente einer Verteilungen zu bestimmen, betrachtet man den Mittelwert aus dem Produkt zweier Matrixelemente:

$$\overline{u_{ij;kl} u_{pq;rs}} = u^2 (\delta_{ip} \delta_{jq} \delta_{kr} \delta_{ls} + \delta_{iq} \delta_{jp} \delta_{ks} \delta_{lr} + \delta_{ir} \delta_{js} \delta_{kp} \delta_{lq} + \delta_{is} \delta_{jr} \delta_{kq} \delta_{lp} + \delta_{ir} \delta_{jq} \delta_{kp} \delta_{ls} + \delta_{iq} \delta_{jr} \delta_{ks} \delta_{lp} + \delta_{ip} \delta_{js} \delta_{kr} \delta_{lq} + \delta_{is} \delta_{jp} \delta_{kq} \delta_{lr}), \quad (5.10)$$

wobei sich die acht Terme durch die Permutationen der Indizes $pqrs$ ergeben, die laut (5.9) die Wechselwirkungsmatrixelemente unverändert lassen. Die Variable u legt die Stärke der Fluktuationen fest und kann beliebig gewählt werden. Die zweiten Momente der Gauß-Verteilungen sind in Form folgender Varianzen bestimmt:

$$\sigma^2(u_{\alpha\beta;\gamma\delta}) = u^2, \quad \sigma^2(u_{\alpha\beta;\alpha\beta}) = 4u^2, \quad \sigma^2(u_{\alpha\beta;\beta\alpha}) = 2u^2. \quad (5.11)$$

Schließlich gibt es eine dritte Möglichkeit, dass man sich auf folgende Symmetrie beschränkt:

$$u_{ij;kl} = u_{ji;lk} = u_{kl;ij} = u_{lk;ji}. \quad (5.12)$$

Im Gegensatz zum vorherigen Fall liegt hier eine nichtlokale Zweiteilchenwechselwirkung in Form von $u(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}'_1, \vec{r}'_2) = u(\vec{r}_2, \vec{r}_1; \vec{r}'_2, \vec{r}'_1)$ vor, mit $u(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}'_1, \vec{r}'_2) = \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | u | \vec{r}'_1, \vec{r}'_2 \rangle$. Analog zu oben ergibt sich somit:

$$\overline{u_{ij;kl} u_{pq;rs}} = u^2 (\delta_{ip} \delta_{jq} \delta_{kr} \delta_{ls} + \delta_{iq} \delta_{jp} \delta_{ks} \delta_{lr} + \delta_{ir} \delta_{js} \delta_{kp} \delta_{lq} + \delta_{is} \delta_{jr} \delta_{kq} \delta_{lp}). \quad (5.13)$$

Dies ist die direkte Verallgemeinerung des Gaußschen Orthogonalen Ensembles auf ein Zweiteilchenproblem. Für die Varianzen der Matrixelemente ergibt sich:

$$\sigma^2(u_{\alpha\beta;\gamma\delta}) = u^2, \quad \sigma^2(u_{\alpha\beta;\alpha\beta}) = 2u^2, \quad \sigma^2(u_{\alpha\beta;\beta\alpha}) = 2u^2. \quad (5.14)$$

In den Diagonalelementen ergibt sich also gegenüber (5.11) ein Unterschied.

5.2.3 Fluktuationen in unitären Zweiteilchenensembles

Bei der Forderung von Invarianz eines Wechselwirkungsensembles unter unitären Transformationen entstehen hermitesche Matrizen, so dass $u_{ij;kl} = u_{kl;ij}^*$ gilt. Gegenüber der Diskussion bei orthogonaler Invarianz ergeben sich hier nur noch zwei verschiedene Ensembles.

Bei einem δ -förmigen Potential ist statt der Gleichung (5.8) nun zu beachten, dass komplexe Wellenfunktionen vorliegen. Das bedeutet, dass folgender Ausdruck entsteht:

$$u_{\alpha\beta;\gamma\delta} \sim \int d^d r \psi_\alpha^*(\vec{r}) \psi_\beta^*(\vec{r}) \psi_\gamma(\vec{r}) \psi_\delta(\vec{r}) \quad (5.15)$$

Statt aller 24 möglichen Vertauschungen in (5.7) sind demnach nur noch 8 Matrixelemente identisch:

$$u_{ij;kl} = u_{ji;kl} = u_{ij;lk} = u_{ji;lk} = u_{kl;ij}^* = u_{kl;ji}^* = u_{lk;ij}^* = u_{lk;ji}^*. \quad (5.16)$$

Allerdings zeigt sich auch hier, dass antisymmetrische Anteile der Wechselwirkungsmatrixelemente bereits verschwinden, denn beispielsweise gilt $u_{ij;kl} - u_{ji;kl} = 0$. Im Fall spinloser Fermionen bleibt solch eine Wechselwirkung ohne Auswirkung.

Als zweite Möglichkeit bleibt die am wenigsten eingeschränkte Symmetrie:

$$u_{ij;kl} = u_{ji;lk} = u_{kl;ij}^* = u_{lk;ji}^*. \quad (5.17)$$

Die Invarianz unter unitären Transformationen führt insbesondere zu einer Übereinstimmung der Fälle von lokaler und nichtlokaler Wechselwirkung. Die Momente der Verteilungen lassen sich wieder durch das Produkt zweier Matrixelemente bestimmen:

$$\overline{u_{ij;kl}^* u_{pq;rs}} = u^2 (\delta_{ip} \delta_{jq} \delta_{kr} \delta_{ls} + \delta_{iq} \delta_{jp} \delta_{ks} \delta_{lr}) \quad (5.18)$$

und für die Varianzen der Matrixelemente folgt:

$$\sigma^2(u_{\alpha\beta;\gamma\delta}) = u^2, \quad \sigma^2(u_{\alpha\beta;\alpha\beta}) = u^2, \quad \sigma^2(u_{\alpha\beta;\beta\alpha}) = u^2. \quad (5.19)$$

In dieser Schreibweise ist nicht explizit gekennzeichnet, dass die Diagonalelemente rein reell sind und nur für die Nichtdiagonalelemente komplexe Zahlen auftreten. Bei der Realisierung solcher Ensembles muss deshalb die Varianz der Gauß-Verteilung für die reellen Diagonalelemente doppelt so groß gewählt werden wie die Varianzen der voneinander unabhängigen Real- und Imaginärteile der Nichtdiagonalelemente.

6 Statistik der Coulomb-Blockade in Quantenpunkten

Im vorherigen Kapitel wurde ein Zufallsmatrixmodell mit expliziter Zweiteilchenwechselwirkung vorgestellt. Die erhebliche Abstraktion gegenüber konkreten physikalischen Modellen darf dabei in theoretischer Hinsicht durchaus als Vorteil angesehen werden. Einerseits versprechen Zufallsmatrixmethoden einen generischen Grenzfall für chaotische quantenmechanische Systeme, wobei durch die explizite Berücksichtigung der Wechselwirkung deren Auswirkung in solchen Problemen studiert werden kann. Andererseits genießen Zufallsmatrixmethoden vielfach eine herausragende Stellung bei der analytischen und auch numerische Diskussion von Problemen. Ursachen sind beispielsweise die einfache analytisch gegebene Invarianz der Ensembles und dass das Verhalten im thermodynamischen Grenzfall unendlicher Systemgröße häufig bereits hervorragend aus den Eigenschaften bei kleinen Problemgrößen extrapoliert werden kann.

Als eine Anwendung des Zufallsmatrixmodells mit Wechselwirkung sollen im Folgenden numerische Untersuchungen zu statistischen Eigenschaften der Coulomb-Blockade in Quantenpunkten mit chaotischer Dynamik durchgeführt werden [25]. Dieses quantenmechanische Vielteilchensystem zeichnet sich besonders durch gute experimentelle Kontrollierbarkeit aus. So ist es möglich, gezielt sehr kleine leitfähige Regionen zu erzeugen und zu untersuchen. Diese kleinen metallischen Inseln beinhalten typischerweise bis zu einige tausend freie Elektronen und besitzen in der Regel eine lineare Ausdehnung von 0.1-1 μ m. Meist werden sie als zweidimensionale Elektronengase in Halbleiterheterostrukturen erzeugt, wobei die Berandung durch elektrostatische Potentiale definiert wird. Die entstehenden Quantenpunkte besitzen sehr wenig Störstellen und haben aufgrund von Rundungen in den Ecken, die sich durch die elektrostatischen Begrenzungspotentiale zwangsläufig ergeben, eine klassisch chaotische Einteilchendynamik.

Für die experimentelle Untersuchung solcher Quantenpunkte werden diese kontaktiert, wobei experimentell wie theoretisch ein interessanter Grenzfall darin besteht, Tunnelkontakte zu verwenden. Man spricht von geschlossenen Quantenpunkten, in denen die Quantisierung der Ladung und diskrete niedrigenergetische Anregungen sichtbar werden. In diesem Zusammenhang wurde der Begriff Künstliche Atome geprägt. Je größer die Quantenpunkte sind, umso niedriger müssen dabei die Temperaturen gewählt werden, damit diese Effekte sichtbar bleiben und nicht thermisch ausschmieren. Typischerweise finden die Experimente bei wenigen Grad Kelvin statt. Bei Transportmessungen durch den Quantenpunkt können dann Ei-

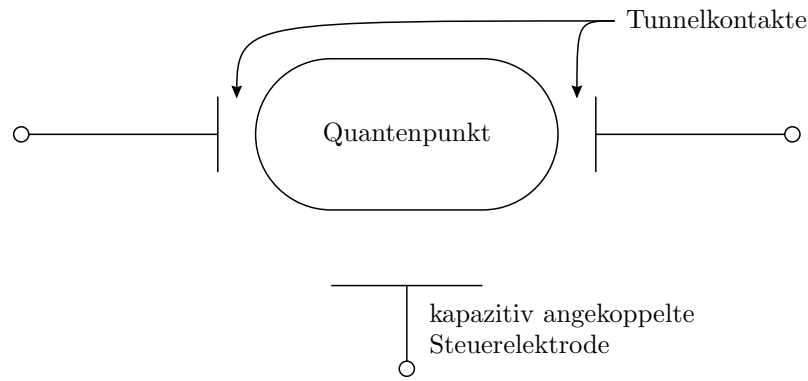


Abbildung 6.1: Schematische Darstellung eines experimentellen Aufbaus zur Beobachtung der Coulombblockade.

enschaften der beteiligten quantenmechanischen Vielteilchenzustände direkt beobachtet werden. Gleichzeitig lässt sich die Zahl der Elektronen auf dem Quantenpunkt über einen großen Bereich variieren. Falls die elektrostatische Coulomb-Energie ausreichend groß wird, tritt Coulomb-Blockade auf.

6.1 Coulomb-Blockade in Quantenpunkten

Abbildung 6.1 zeigt schematisch ein Experiment zur Beobachtung der Coulomb-Blockade. Der Quantenpunkt ist mittels zweier Tunnelbarrieren kontaktiert, womit ein Strom durch den Quantenpunkt getrieben werden kann. Hier soll der Fall betrachtet werden, dass die an die Tunnelbarrieren angelegte Spannung klein ist. Die Leitfähigkeit wird also durch den Strom in linearer Antwort auf kleine Spannungen zwischen den Kontakten ermittelt.

Ein weiterer, nur kapazitiv an den Quantenpunkt angekoppelter Kontakt findet in dem experimentellen Aufbau Verwendung, um die Zahl der freien Ladungsträger auf dem Quantenpunkt zu modifizieren. Je nach Potential auf dem Kontakt wird der energetisch günstigste Zustand durch unterschiedliche Anzahl freier Elektronen erreicht. Dies lässt sich leicht anhand der Gesamtenergie $E(n)$ erkennen, die sich für n freie Elektronen auf dem Quantenpunkt ergibt. Das Potential V_s , das an der Steuerelektrode anliegt, geht dabei in Form der elektrostatischen Energie $-enV_s$ ein, wobei e die Elementarladung bezeichnet. Darüber hinaus ist aber auch die Wechselwirkungsenergie innerhalb des Quantenpunktes einzubeziehen. Im letzten Kapitel wurde dies anhand der Mittelwerte \bar{u} einer beliebigen Zweiteilchenwechselwirkung bereits diskutiert, wobei an dieser Stelle auch die Argumentation mittels einer klassischen Ladungsenergie des Quantenpunktes möglich ist. Dabei ergibt sich, dass die Kapazität C des Quantenpunktes mit dem Mittelwert \bar{u} verknüpft ist gemäß $\bar{u} = e^2/2C$. Für die Gesamtenergie folgt:

$$E(n) = -enV_s + \frac{e^2}{2C}(n^2 - n). \quad (6.1)$$

In Abhängigkeit des Potentials V_s wird diese Energie für unterschiedliche, zunächst kontinuierlich angenommene Teilchenzahl n_{\min} minimal:

$$n_{\min} = \frac{V_s C}{e} + \frac{1}{2}. \quad (6.2)$$

Die Teilchenzahl ist demnach linear mit dem Potential V_s verknüpft. Nun ist aber zu beachten, dass die Teilchenzahl quantisiert ist, nämlich eine ganze Zahl sein muß. Für ein gegebenes Potential der Steuerelektrode wird sich die Zahl von Elektronen einstellen, die die niedrigste Energie besitzt. Allerdings wird eine Änderung der Elektronenzahl in der Regel dann mit einem erheblichen Energieaufwand verbunden sein, der mit $1/C$ skaliert. Das bedeutet, dass ein Strom durch die Tunnelkontakte verhindert wird – es liegt Coulomb-Blockade vor.

Ein Ausweg aus dieser Situation ergibt sich in dem Spezialfall, wenn die optimale Teilchenzahl gemäß (6.2) gerade halbzahlig wird. Dann sind die Energien (6.1) für die beiden benachbarten ganzen Teilchenzahlen identisch. Damit fällt die Bedingung der Coulomb-Blockade weg, wonach die Anzahl der Elektronen auf dem Quantenpunkt energetisch fixiert ist, und es wird ein Stromfluss durch die Tunnelkontakte beobachtbar. Nach (6.2) ist zu erwarten, dass diese Leitfähigkeitsspitzen in äquidistanten Abständen bei Variation des Potentials der Steuerelektrode auftreten. Abhängig von den experimentellen Gegebenheiten wird dieses Verhalten auch im Experiment sehr gut erfüllt [80], allerdings sind gewisse Abweichungen vom äquidistanten Verhalten beobachtbar [27, 28].

Um diese Abweichungen zu erklären, muss man die Gesamtenergie (6.1) um einen Term erweitern, der das Füllen eines Einteilchenspektrums ϵ_i ohne Berücksichtigung des Spins der Elektronen beinhaltet:

$$E(n) = -enV_s + \underbrace{\frac{e^2}{2C}(n^2 - n) + \sum_{i=1}^n \epsilon_i}_{E_{\text{GZ}}(n)}. \quad (6.3)$$

Die Terme $E_{\text{GZ}}(n)$ sind damit als eine Approximation der Grundzustandsenergie im Quantenpunkt mit n Teilchen zu interpretieren. Berechnet man nun die Differenz Δ_2 zweier benachbarter Potentiale $V_s^{(n-1,n)}$ und $V_s^{(n,n+1)}$, die durch die Äquivalenz der Energien $E(n-1)$ und $E(n)$ beziehungsweise $E(n)$ und $E(n+1)$ definiert sind, ergibt sich:

$$\begin{aligned} e \Delta_2 &= e(V_s^{(n,n+1)} - V_s^{(n-1,n)}) = E_{\text{GZ}}(n+1) + E_{\text{GZ}}(n-1) - 2E_{\text{GZ}}(n) \\ &= \frac{e^2}{C} + \epsilon_{n+1} - \epsilon_n. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Neben der schon diskutierten Konstanten e^2/C , tritt nun zusätzlich ein Niveauabstand des Einteilchenspektrums auf. Damit ist eine mögliche Ursache für die Ab-

weichungen vom äquidistanten Verhalten der Leitfähigkeitsspitzen identifiziert. Allerdings hat diese Beschreibung gewisse Mängel. Zunächst ist nämlich anzunehmen, dass man in chaotischen Quantenpunkten für die Fluktuationen in der Abstandsstatistik der Leitfähigkeitsspitzen Zufallsmatrixverhalten findet. Demnach müssten die Verteilungen $p_{\text{GOE}}(s)$ gemäß (2.10) beziehungsweise $p_{\text{GUE}}(s)$ entsprechend (2.11) auftreten, je nachdem, ob im untersuchten Problem Zeitumkehrsymmetrie vorhanden ist oder nicht. Diese Erwartung von Zufallsmatrixverhalten entsteht einerseits aufgrund Präparation der Quantenpunkte, die in der Regel sehr wenig Störstellen besitzen, was im Rahmen der kleinen Ausdehnungen der Quantenpunkte zu ballistischem Transport führen sollte. Die Begrenzung der Quantenpunkte beinhaltet beispielsweise aber Rundungen in den Ecken aufgrund der verwendeten elektrostatischen Potentiale. Die entstehenden Geometrien sollten demnach zu klassisch chaotischem Verhalten führen. Des weiteren zeigen andere Messgrößen an Quantenpunkten, beispielsweise die nachfolgend diskutierte Leitfähigkeitsstatistik der Leitfähigkeitsspitzen, deutliches Zufallsmatrixverhalten. Umso überraschender ist es, dass in der Abstandsstatistik kein Zufallsmatrixverhalten gefunden wird [28], sondern typischerweise gauß-förmige Verteilungen auftreten.

6.2 Abstandsstatistik der Leitfähigkeitsspitzen

In Gleichung (6.4) ist in der ersten Zeile bereits eine Möglichkeit aufgezeigt, wie die Abstandsstatistik der Leitfähigkeitsspitzen für ein beliebiges Vielteilchensystem bestimmt werden kann, wenn die Grundzustandenergie $E_{\text{GZ}}(n)$ für verschiedene aufeinanderfolgende Teilchenzahlen n bekannt ist. Dazu können numerische Lösungen des im vorangegangenen Kapitel vorgestellten Zufallsmatrixmodells mit Wechselwirkung eingesetzt werden, wobei hier nur die Fluktuationen in der Abstandsstatistik interessieren. Der analytisch bekannte Einfluss eines Mittelwerts \bar{u} , der einen konstanten Abstand der Leitfähigkeitsspitzen erzeugt, wenn keine Fluktuationen mit einbezogen werden, ist hierbei also nicht von Interesse. Dazu kann man die Abstände Δ_2 zwischen Leitfähigkeitsspitzen um ihrem Mittelwert $\bar{\Delta}_2$ bereinigen und in Einheiten des mittleren Niveauabstands des Einteilchenproblems angeben. Dadurch entsteht die dimensionslose Größe $\tilde{\Delta}_2$

$$\tilde{\Delta}_2 = \frac{\Delta_2 - \bar{\Delta}_2}{\Delta}, \quad (6.5)$$

die unabhängig von \bar{u} ist. Die Abbildung 6.2 zeigt die Verteilung von $\tilde{\Delta}_2$ für unterschiedliche Wechselwirkungsstärke u . In dieser Abbildung wurde eine nichtlokale Zweiteilchenwechselwirkung verwendet, aber für eine lokale Zweiteilchenwechselwirkung ergeben sich im Rahmen dieser Untersuchungen keine signifikanten Unterschiede.

Es ist deutlich zu sehen, dass die Abstandsstatistik bereits für recht kleine Wechselwirkungsstärke $u \sim \Delta$ deutlich vom Zufallsmatrixverhalten abweicht und ein

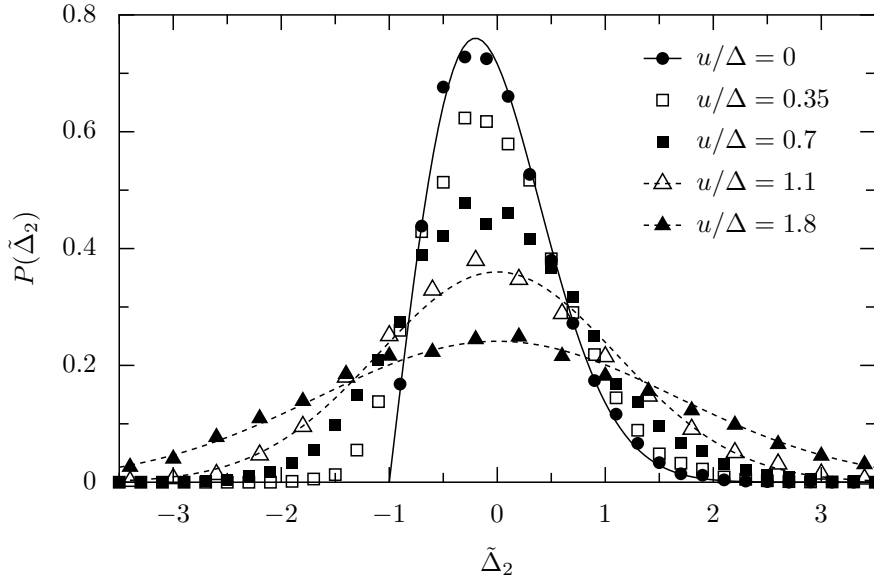


Abbildung 6.2: Abstandsstatistik der Leitfähigkeitsspitzen gemäß dem Zufallsmatrixmodell mit Wechselwirkung (5.4) für das orthogonale Ensemble und nichtlokale Zweiteilchenwechselwirkung bei verschiedenen Wechselwirkungsstärken u gemessen in Einheiten den mittleren Einteilchenniveauabstands Δ . Die Einteilchenbasis bestand aus $m = 12$ Elementen und die Teilchenzahl betrug $n = 4$, was bedeutet, dass Grundzustandenergien für 3, 4 und 5 Teilchen in (6.4) verwendet wurden. Die durchgezogene Linie zeigt die auf Mittelwert Null verschobene Niveauabstandsstatistik $p_{\text{GOE}}(\Delta_2)$ und die gestrichelten Linien sind Gauß-Verteilungen angepasst an die Daten für die zwei größten gezeigten Werte von u . Für jede Wechselwirkungsstärke wurden 10 000 Realisierungen verwendet.

gauß-förmiges Verhalten annimmt. Das deckt sich mit zahlreichen Experimenten, beispielsweise Ergebnissen aus der schon zitierten Arbeit [28]. Dort wird auch der experimentell leicht realisierbare Fall diskutiert, durch ein Magnetfeld die Zeitumkehrsymmetrie des Problems zu brechen. Für das Zufallsmatrixmodell bedeutet dies einen Übergang zu unitären Ensembles. Für diesen Fall ist im Folgenden aber immer nur der Hamilton-Operator des Einteilchenproblems von orthogonaler zu unitärer Invarianz geändert worden. Insbesondere ist bei der Abstandsstatistik aber nicht zu erwarten, dass auch ein Wechsel der Invarianzklasse der Zweiteilchenwechselwirkung erhebliche Auswirkungen zeigen wird, denn bereits für orthogonale Invarianz sowohl im Einteilchen- wie auch im Zweiteilchenanteil entstehen bereits gauß-förmige Verteilungen. Insbesondere wird also das für Zufallsmatrizen typische Verhalten zerstört.

In Abbildung 6.3 ist nun die Abstandsstatistik im Fall unitärer Invarianz des Einteilchenproblems dargestellt. Damit ergibt sich im wechselwirkungsfreien Fall die Niveauabstandsstatistik p_{GUE} . Von da aus ist wiederum ein Übergang zu einer Gauß-Verteilung zu beobachten, die auch im Experiment gefunden wird.

Um diesen Wechsel der Verteilungen quantitativ zu erfassen, wurden in Abbil-

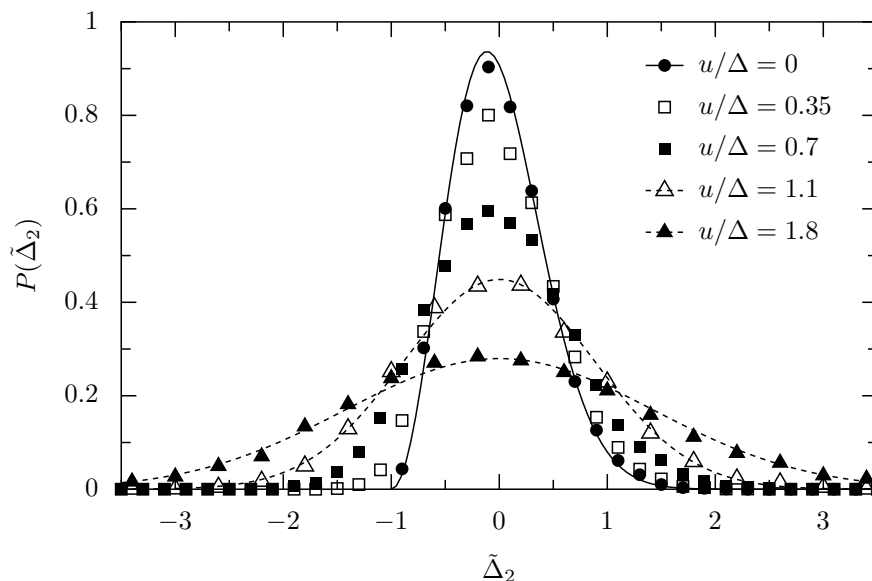


Abbildung 6.3: Abstandstatistik der Leitfähigkeitsspitzen analog zu Abbildung 6.2, wobei jedoch für das Einteilchenproblem Zufallsmatrizen aus dem Gaußschen Unitären Ensemble gewählt wurden.

dung 6.4 Standardabweichungen der Abstandstatistiken aus Abbildung 6.2 (durchgezogene Linie) und Abbildung 6.3 (gestrichelte Linie) bestimmt. Darüber hinaus ist der Wechsel in den Verteilungen für andere Größen der Einteilchenbasis m durch Symbole gekennzeichnet. Ebenso lässt sich die Teilchenzahl n variieren. Es stellt sich heraus, dass sich all die Standardabweichungen für unterschiedliche Werte m und n auf die Linien des Referenzfalls $m = 12$ und $n = 4$ skalieren lassen, wenn man die Wechselwirkungsstärke mit einem Faktor multipliziert. Es entsteht eine effektive Wechselwirkungsstärke u_{eff} , die den Übergang der Abstandstatistik vom Zufallsmatrixverhalten zu gauß-förmigen Verteilungen charakterisiert. Der Proportionalitätsfaktor wird hier als $f(m, n)$ bezeichnet, womit sich ergibt:

$$u_{\text{eff}} = f(m, n) \frac{u}{\Delta}. \quad (6.6)$$

Der Skalierungsfaktor $f(m, n)$, wie er sich für verschiedene Werte m und n ergibt, ist in Abbildung 6.4 dargestellt. Es ist bemerkenswert, dass sich die Skalierungsfaktoren für orthogonale und unitäre Invarianz des Einteilchenproblems nicht unterscheiden. Darüber hinaus soll nun anhand einer anderen physikalischen Größe gezeigt werden, dass diese Skalierungseigenschaft des Zufallsmatrixmodells mit Wechselwirkung allgemeinere Gültigkeit besitzt.

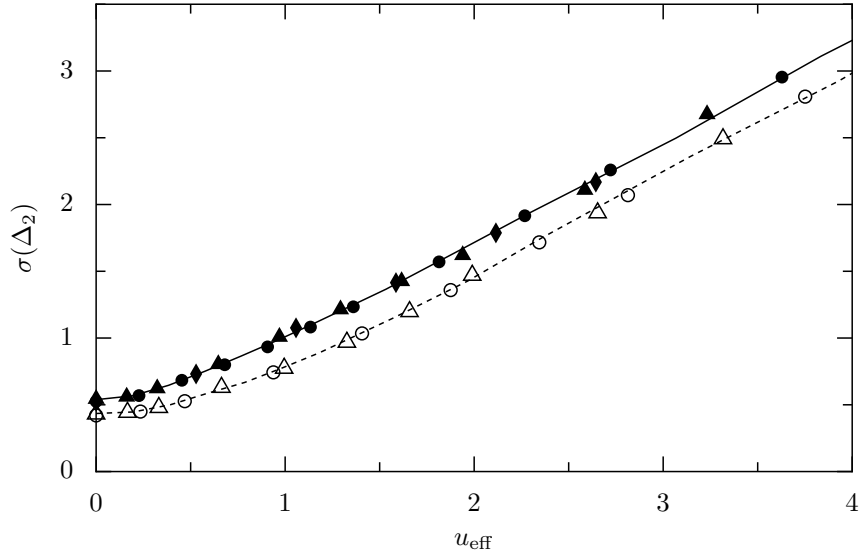


Abbildung 6.4: Standardabweichungen der Abstandsstatistiken der Leitfähigkeitsspitzen als Funktion einer effektiven Wechselwirkungsstärke gemäß (6.6). Durch geeignete Wahl des Skalierungsparameters $f(m, n)$ fallen die Kurven für verschiedene Größe der Einteilchenbasis m und Teilchenzahl n aufeinander. In den gezeigten Daten wurde $n = 4$ festgehalten, für m jedoch die Werte 10 (Kreise), 12 (durchgezogene Referenzlinien), 14 (Dreiecke) und 16 (Rauten) verwendet. Bei der durchgezogenen Linie/den vollen Symbolen beziehungsweise der gestrichelten Linie/den offenen Symbolen wurden für das Einteilchenproblem Zufallsmatrizen aus dem Gaußsche Orthogonalen beziehungsweise Unitären Ensemble verwendet. Für den Referenzfall $m = 12, n = 10$ wurden 10 000 Realisierungen verwendet, in den anderen Fällen zwischen 1 000 und 5 000 Realisierungen.

6.3 Leitfähigkeitsstatistik der Leitfähigkeitsspitzen

Das eben in Zusammenhang mit der Abstandsstatistik der Leitfähigkeitsspitzen in Quantenpunkten verwendete Zufallsmatrixmodell mit Wechselwirkung kann auch zur Diskussion der Statistik der Höhe der Leitfähigkeitsspitzen selbst verwendet werden [26]. Die Breite der Leitfähigkeitsspitzen ist im Wesentlichen durch die Temperatur festgelegt, aber die Leitfähigkeit selbst hängt von den Tunnelraten Γ_1 und Γ_2 zwischen dem Quantenpunkt und den beiden Kontakten ab [23]. Die dimensionslose Höhe der Leitfähigkeitsspitzen ist bei tiefen Temperaturen demnach:

$$\alpha = \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\bar{\Gamma}(\Gamma_1 + \Gamma_2)}, \quad (6.7)$$

wobei $\bar{\Gamma}$ die Tunnelrate im Ensemblemittel angibt. Für Quantenpunkte mit chaotischer Einteilchendynamik wurden Verteilungen der Leitfähigkeit in den Leitfähigkeitsspitzen angegeben, die mit Mitteln der Zufallsmatrixtheorie analytisch angegeben werden können, die aber auch in numerischen Untersuchungen auftre-

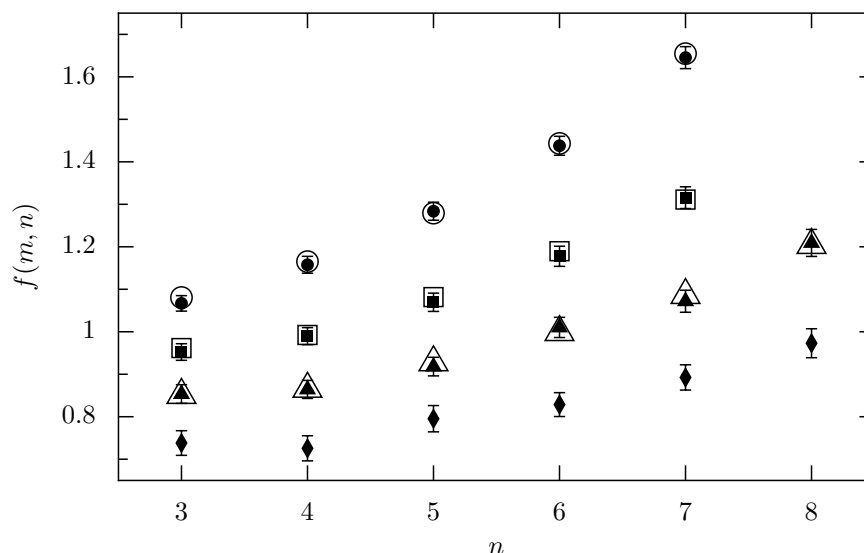


Abbildung 6.5: Skalierungsparameter $f(m, n)$ für verschiedene Teilchenzahlen n und unterschiedliche Größen der Einteilchenbasis $m = 10$ (Kreise), 12 (Quadrate), 14 (Dreiecke) und 16 (Rauten). Bei den vollen beziehungsweise offenen Symbolen wurden für das Einteilchenproblem Zufallsmatrizen aus dem Gaußsche Orthogonale beziehungsweise Unitären Ensemble verwendet. Für die kleiner dargestellten vollen Symbole sind statistische Fehlerbalken angegeben, die in gleicher Größenordnung auch für die offenen Symbole gefunden werden.

ten [24]. Dabei ergibt sich ein Unterschied zwischen den Fällen mit und ohne Zeitumkehrsymmetrie. Dies wurde später auch in zahlreichen Experimenten bestätigt [29, 30].

In diesem Zusammenhang stellt sich natürlich die Frage, wie sich das Zufallsmatrixmodell mit Wechselwirkung verhält, wenn man damit die Leitfähigkeitsstatistik bestimmt. Im Rahmen eines Vielteilchenmodells treten dabei die Amplituden für das Hinzufügen eines Teilchens an den Positionen \vec{r}_i auf, die durch die Tunnelkontakte $i = 1$ und 2 kontaktiert werden. Demnach gilt:

$$\Gamma_i \sim |\langle \psi_{\text{GZ}}(n+1) | c^\dagger(\vec{r}_i) | \psi_{\text{GZ}}(n) \rangle|^2. \quad (6.8)$$

Die Wellenfunktionen $\psi_{\text{GZ}}(n)$ und $\psi_{\text{GZ}}(n+1)$ bezeichnen dabei die Vielteilchengrundzustände für n und $n+1$ Teilchen, wohingegen $c^\dagger(\vec{r}_i)$ der Erzeugungsoperator für ein Teilchen am Ort \vec{r}_i ist. Im Zufallsmatrixmodell, in dem sowieso keine Geometrieinformationen vorhanden sind und außerdem eine Invarianz des Ensembles unter Basistransformationen gegeben ist, kann man für $c^\dagger(\vec{r}_i)$ den Erzeugungsoperator c_i^\dagger auf einem beliebigen Basiszustand i verwenden. Bei der numerischen Untersuchung von Verteilungen kann man sogar alle verfügbaren Erzeugungsoperatoren c_i^\dagger verwenden, um die Statistik zu verbessern. Zur Hervorhebung dieses Umstands wird dann der Index nicht mehr mitgeschrieben.

An dieser Stelle ist es aber zunächst noch interessant, den Fall verschwindender

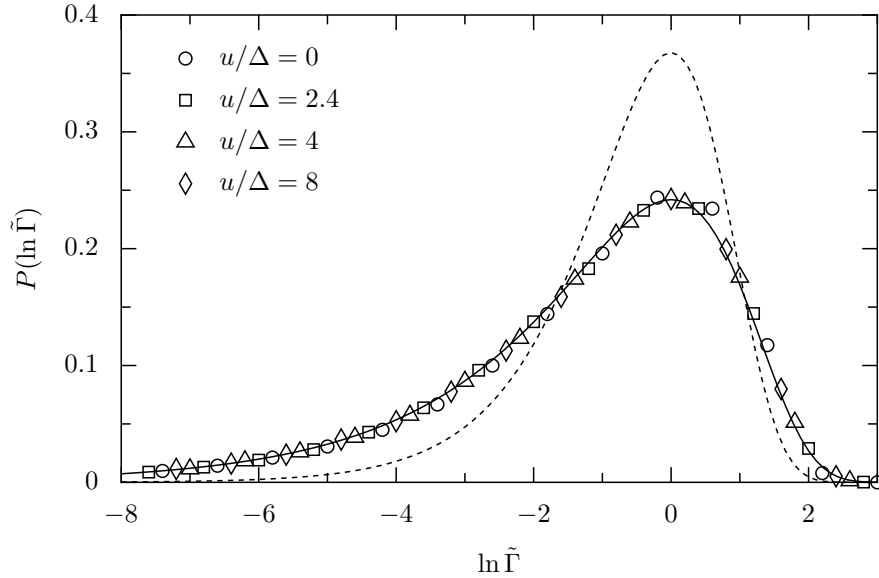


Abbildung 6.6: Verteilung des Logarithmus der dimensionslosen Tunnelraten $\tilde{\Gamma}$ gemäß dem Zufallsmatrixmodell mit Wechselwirkung (5.4) für das orthogonale Ensemble und nichtlokale Zweiteilchenwechselwirkung bei verschiedenen Wechselwirkungsstärken u gemessen in Einheiten des mittleren Einteilchenniveauabstands Δ . Die Einteilchenbasis bestand aus $m = 12$ Elementen und die Teilchenzahl betrug $n = 4$, was bedeutet, dass Vielteilchengrundzustandswellenfunktionen für 4 und 5 Teilchen in (6.8) verwendet wurden. Die durchgezogene beziehungsweise gestrichelte Linie zeigt die Porter-Thomas-Verteilung für das Gaußsche Orthogonale beziehungsweise Unitäre Ensemble. Für jede Wechselwirkungsstärke wurden 10 000 Realisierungen verwendet.

Wechselwirkung zu diskutieren. Dann lassen sich die Vielteilchenwellenfunktionen durch entsprechende Kombinationen von Einteilchenwellenfunktionen $|\phi_n\rangle$ erzeugen und es ergibt sich:

$$\langle i | \phi_{n+1} \rangle = \langle \psi_{\text{GZ}}(n+1) | c_i^\dagger | \psi_{\text{GZ}}(n) \rangle. \quad (6.9)$$

Die Betragsquadrate Γ_i dieser Projektionen sind also direkt aus der Einteilchenwellenfunktion des Zustands $n + 1$ gegeben. Für Zufallsmatrixverhalten des Einteilchenproblems treten an dieser Stelle Porter-Thomas-Verteilungen auf, wie es schon in [24] diskutiert wurde. Diese lauten für das Gaußsche Orthogonale Ensemble $P_{\text{GOE}}(\ln x) = \sqrt{x/2\pi} \exp(-x/2)$ und für das Gaußsche Unitäre Ensemble $P_{\text{GUE}}(\ln x) = x \exp(-x)$.

Nachdem der Fall ohne Wechselwirkung im Zufallsmatrixmodell die bekannten Ergebnisse reproduziert, ist nun interessant, was sich durch die Wechselwirkung verändert. Dazu sind in den Abbildungen 6.6 und 6.7 die Verteilungen der dimensionslosen Tunnelraten $\tilde{\Gamma} = \Gamma/\bar{\Gamma}$ bei orthogonaler und unitärer Invarianz des Einteilchenproblems gezeigt. Für die Wechselwirkungsmatrixelemente wurde in beiden Fällen eine nichtlokale Wechselwirkung mit orthogonaler Invarianz benutzt. Das bedeutet natürlich, dass sich die Verteilungen in Abbildung 6.6 und 6.7 für große

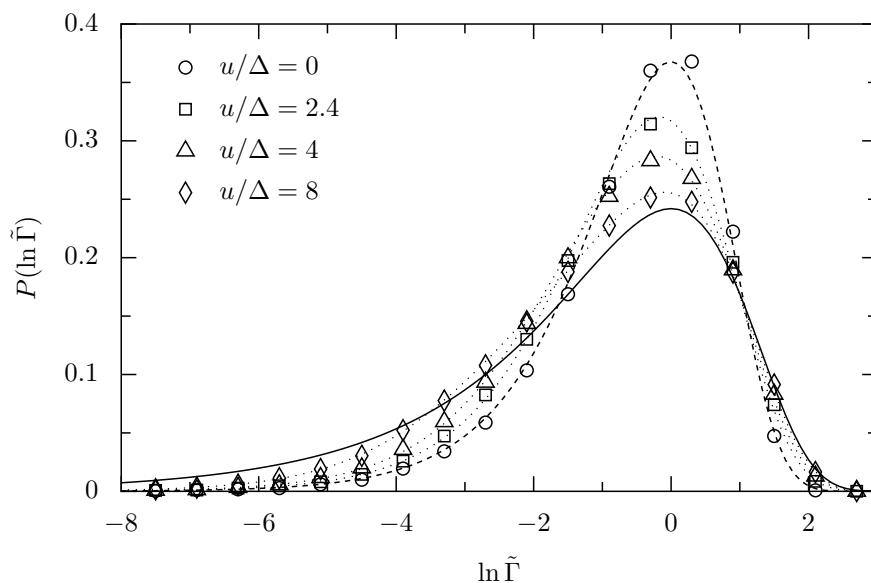


Abbildung 6.7: Verteilung des Logarithmus der dimensionslosen Tunnelraten $\tilde{\Gamma}$ analog zu Abbildung 6.6, wobei jedoch für das Einteilchenproblem Zufallsmatrizen aus dem Gaußschen Unitären Ensemble gewählt wurden. Die gepunkteten Linien zeigen die Verteilung (6.10) für $\lambda = 0.28, 0.17$ und 0.08 , die die numerisch bestimmten Verteilungen bei $u/\Delta = 2.4, 4$ und 8 hervorragend wiedergeben.

Wechselwirkung u einander annähern müssen, weil der Unterschied im Einteilchenproblem vernachlässigbar wird.

Zunächst zeigt sich in Abbildung 6.6 aber, dass selbst für sehr große Wechselwirkung im Zufallsmatrixmodell keine Änderung der Verteilung der $\tilde{\Gamma}$ auftritt. Während also die Abstandsstatistik massiv von der Wechselwirkung beeinflusst wurde, ist dies für die Leitfähigkeitsverteilung nicht zu beobachten.

Wie nun aber zu erwarten, sind die Verteilungen in Abbildung 6.7 von der Wechselwirkungsstärke abhängig. Es wurde schon diskutiert, dass sich der wechselwirkungsfreie Fall unterscheidet, während für große Wechselwirkung kein Unterschied zu Abbildung 6.6 bestehen darf. Es stellt sich heraus, dass dazu eine große Wechselwirkung $u > \Delta$ benötigt wird.

Ein Übergang von orthogonaler zu unitärer Invarianz wurde auch im Rahmen der Zufallsmatrixtheorie schon diskutiert [20]. In diesem Zusammenhang lässt sich auch die Verteilung von $\tilde{\Gamma}$ analytisch als Funktion eines Übergangsparameters λ zwischen den Ensembles bestimmen [81, 82]:

$$P_\lambda(\tilde{\Gamma}) = \int_0^1 dt P_\lambda(t) \frac{1+t^2}{2t} \exp \left[- \left(\frac{1+t^2}{2t} \right)^2 \tilde{\Gamma} \right] I_0 \left(\frac{1-t^4}{4t^2} \tilde{\Gamma} \right). \quad (6.10)$$

I_0 bezeichnet die modifizierte Besselfunktion der Ordnung Null und die Verteilung

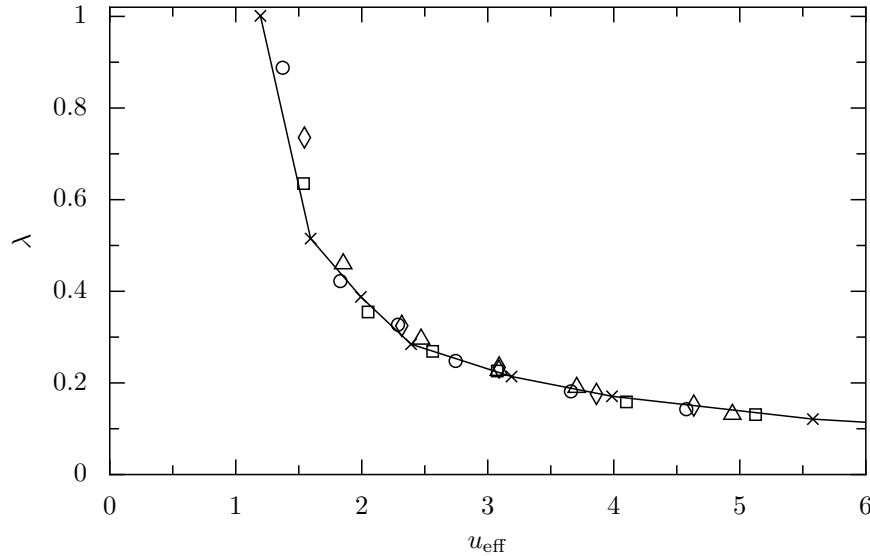


Abbildung 6.8: Abhängigkeit des Parameters λ , bestimmt aus der Anpassung der Verteilung (6.10) an die Leitfähigkeitsstatistiken im Zufallsmatrixmodell mit Wechselwirkung, wie es an Beispielen in Abbildung 6.7 dargestellt ist. Durch geeignete Wahl des Skalierungsparameters $f(m, n)$ fallen die Kurven für verschiedene m und n aufeinander. In den gezeigten Daten wurde $m = 10$ festgehalten, für n jedoch die Werte 4 (Kreise), 5 (Quadrate), 6 (Dreiecke) und 7 (Rauten) verwendet und mit dem nichtskalierten Referenzfall $m = 12$ und $n = 4$ (durchgezogene Linie mit Kreuzen) zur Deckung gebracht. Für den Referenzfall wurden 10 000 Realisierungen des Ensembles verwendet, für alle anderen Fälle 5 000 Realisierungen.

$P_\lambda(t)$ ist durch folgenden Ausdruck gegeben [81, 82, 83]:

$$P_\lambda(t) = \pi^2(t^{-3} - t)\lambda^2 \exp\left[-\frac{\pi^2}{2}\lambda^2(t - t^{-1})^2\right] \times \left[\phi_1(\lambda) + \left(\frac{(t + t^{-1})^2}{4} - \frac{1}{2\pi^2\lambda^2}\right)(1 - \phi_1(\lambda))\right] \quad (6.11)$$

mit

$$\phi_1(\lambda) = \int_0^1 dy \exp[-2\pi^2\lambda^2(1 - y^2)]. \quad (6.12)$$

Die Verteilung (6.10) reduziert sich für $\lambda = 0$ beziehungsweise $\lambda \gg 1$ auf die Porter-Thomas-Verteilung des Gaußschen Orthogonalen beziehungsweise Unitären Ensembles.

Es zeigt sich nun, dass die Verteilungen in Abbildung 6.7 für endliche Wechselwirkungsstärke u bei geeigneter Wahl von λ hervorragend reproduziert werden, wie an den in der Abbildung gezeigten Beispielen durch gepunktete Linien verdeutlicht ist. In Abbildung 6.8 sind die so gewonnenen Werte λ als Funktion der

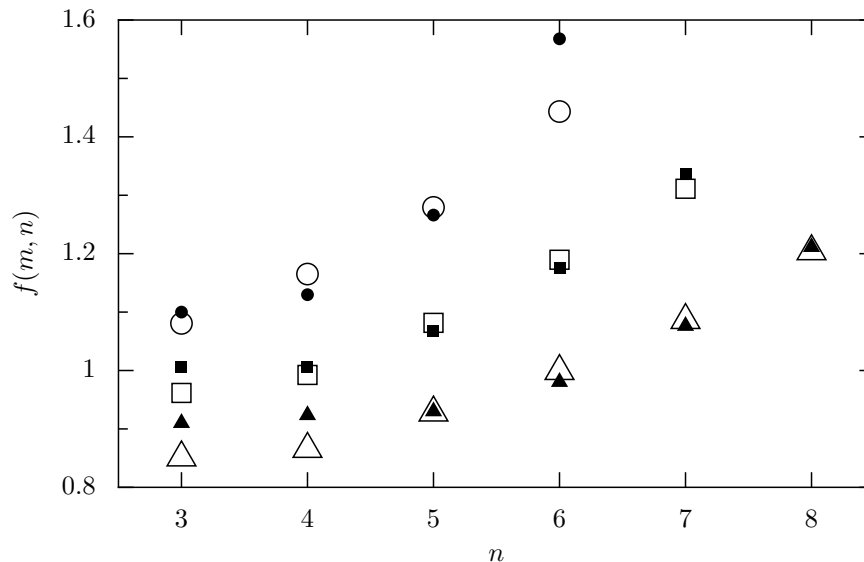


Abbildung 6.9: Skalierungsparameter $f(m, n)$ für verschiedene Teilchenzahlen n und unterschiedliche Größen der Einteilchenbasis $m = 10$ (Kreise), 12 (Quadrate) und 14 (Dreiecke). Die vollen Symbole zeigen den Skalierungsparameter, wie er sich für die Leitfähigkeitsstatistik aus Abbildung 6.8 ergibt, während die offenen Symbole identisch zu Abbildung 6.5 sind.

Wechselwirkungsstärke u gezeigt, wobei ähnlich wie bei der Abstandsstatistik eine effektive Wechselwirkungsstärke eingeführt werden muss (6.6), um die Kurven aufeinander zu skalieren. Der Skalierungsparameter $f(m, n)$, der dabei auftritt, ist in Abbildung 6.9 gezeigt. Dort ist zum Vergleich auch der Skalierungsparameter aufgetragen, wie er sich bei der Abstandsstatistik ergeben hat. Obwohl sich dabei gewisse Abweichungen zeigen, ist die prinzipielle Abhängigkeit von der Größe der Einteilchenbasis m und der Teilchenzahl n gleich. An dieser Stelle sollte auch hervorgehoben werden, dass sich die verschiedenen Skalierungsparameter durch recht unterschiedliche Analysen des Zufallmatrixmodells mit Wechselwirkung ergeben haben. Während in die Abstandsstatistik die Grundzustandsenergie für drei aufeinanderfolgende Teilchenzahlen einfließt, ist die Leitfähigkeitsstatistik durch die Grundzustandswellenfunktionen für zwei aufeinanderfolgende Teilchenzahlen bestimmt. Nun geht beispielsweise der mittlere Energieniveauabstand des Einteilchenproblems in die Auswertungen der beiden Statistiken ein. Andererseits ist der mittlere Niveauabstand für diese kleinen Zufallsmatrizen erheblich von m und n abhängig. Die übliche Entfaltung des Zufallmatrixspektrums, die zur Korrektur dieser Effekte bei der numerischen Untersuchung kleiner Zufallsmatrizen normalerweise eingesetzt wird, kann hier nicht durchgeführt werden, weil die Teilchenzahl des Vielteilchenproblems variiert wird. Als ein weiteres Problem sollte genannt werden, dass der Parameter λ in der Verteilung (6.10) nur im Fall $\lambda \ll 1$ genau bestimmt werden kann, weil sich andernfalls die Verteilung (6.10) nur sehr wenig von der Porter-Thomas-Statistik für das Gaußsche Unitäre Ensemble unterscheidet. Für kleine λ wird wiederum die

Bestimmung des Skalierungsfaktors der Wechselwirkungsstärke durch Suche einer gemeinsamen Kurve ungenau, denn wie in Abbildung 6.8 gezeigt ist, ändert sich λ als Funktion der Wechselwirkungsstärke für kleine λ nur noch langsam.

An dieser Stelle ist hervorzuheben, dass die hier gefundenen Eigenschaften des Zufallsmatrixmodells mit Wechselwirkung in der Anwendung auf das Problem der Coulomb-Blockade auch bei der Untersuchung des Anderson-Modells mit mehreren Teilchen und Coulomb-Wechselwirkung auftreten. Für die Abstandsstatistik kann dabei ein Übergang von Zufallsmatrixverhalten zu gauß-förmigen Verteilungen beobachtet werden [21]. Allerdings ist die Wahl von Modellparametern wie der Unordnungsstärke, der Teilchenzahlen und auch der Randbedingungen sehr viel problematischer. Beispielsweise muss man sicherstellen, dass sich das Anderson-Modell im diffusiven Transportbereich befindet. Gleichzeitig führen die Änderungen der Teilchenzahlen bei den numerisch zugänglichen sehr kleinen Systemgrößen zu erheblichen nichtgenerischen Effekten. Skalierungsanalysen wie für das Zufallsmatrixmodell sind deshalb für das Anderson-Modell bisher nicht erfolgreich [21].

Ganz ähnlich verhält es sich auch bei der Untersuchung der Leitfähigkeitsstatistik für das Anderson-Modells [26]. Dabei stellt sich heraus, dass bei gebrochener Zeitumkehrsymmetrie durch ein Magnetfeld im Anderson-Modell ebenfalls ein Wechsel zwischen der Porter-Thomas-Statistik des Gaußschen Unitären Ensembles und der Porter-Thomas-Statistik des Gaußschen Orthogonalen Ensembles mit zunehmender Wechselwirkungsstärke auftritt. Allerdings muss dazu die Wechselwirkung sehr groß gewählt werden, ähnlich wie dies auch im Zufallsmatrixmodell beobachtet wurde. Der typische experimentelle Befund, dass eine gauß-förmige Abstandsstatistik zusammen mit Zufallsmatrixverhalten in Form von Porter-Thomas-Statistiken auftritt, ist für mäßige Wechselwirkungsstärken also vollauf plausibel.

In diesem Zusammenhang wäre es nun auch interessant, den Fall unitärer Invarianz der Wechselwirkung im Zufallsmatrixmodell zu behandeln oder überhaupt die verschiedenen möglichen Wechselwirkungsensembles zu studieren. Dabei sollte insbesondere auch der Spin berücksichtigt werden, wodurch auch δ -förmige Wechselwirkungen auftreten können. Hierbei ist anzumerken, dass im Fall mit Spin eine Untersuchung für das Anderson-Modell noch sehr viel schwieriger wird, weil die Größe des Hilbert-Raumes noch schneller an die numerisch behandelbaren Grenzen stößt. Dadurch könnte das Zufallsmatrixmodell mit Wechselwirkung in Zukunft erheblich an Interesse gewinnen. Vorläufige Untersuchungen haben nämlich beispielsweise bereits gezeigt [84], dass neben Magnetisierungseigenschaften verbunden mit der Stoner-Instabilität [85] auch Phänomene wie die Spinblockade [86, 87, 88] oder der Wechsel der Magnetisierung einzelner Grundzustände [89, 90] bei kontinuierlicher Veränderung des Einteilchenoperators durch einen zusätzlichen Parameter im Zufallsmatrixmodell beobachtet werden können.

Eine weitere interessante Richtung zeichnet sich ab [91], wenn man die Hartree-Fock-Approximation des Zufallsmatrixmodells mit Wechselwirkung studiert. Beispielsweise ergibt sich auch in diesem Modell ein sogenannter Hartree-Fock-Energieabstand zwischen besetzten und unbesetzten Zuständen des effektiven Einteilchen-

modells. Die Analyse dieses Hartree-Fock-Energieabstands ist nicht nur numerisch möglich, sondern kann auch in Störungstheorie in der Wechselwirkung analysiert werden. Dazu ist die Invarianz des Wechselwirkungsensembles zur Bestimmung der in bestimmten Fällen nichtverschwindenden Mittelwerte der Wechselwirkungsmatrixelemente in der Hartree-Fock-Basis essentiell. Darüber hinaus lassen sich beispielsweise auch die Auswirkungen des Hinzufügens zusätzlicher Teilchen im Rahmen der Hartree-Fock-Approximation diskutieren. Es sind also zahlreiche interessante Einsatzbereiche des Zufallsmatrixmodells mit Wechselwirkung für zukünftige Untersuchungen vorhanden, die weit über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehen.

7 Zusammenfassung

Im Rahmen der Untersuchung chaotischer Eigenschaften von physikalischen Problemen sind in unterschiedlichen Bereichen der Physik verschiedene Methoden wohl-etabliert. In diesem Zusammenhang wurden in der vorliegenden numerisch orientierten Arbeit zwei komplementäre Zugänge untersucht. Dies sind einerseits Phasenraummethoden, bei denen geometrische Eigenschaften des zugrundeliegenden physikalischen Problems von zentraler Bedeutung sind, und andererseits die geometriefreie Zufallsmatrixmethode.

Zunächst wurde anhand zweier eindimensionaler Modelle, des Anderson-Modells eines ungeordneten Festkörpers und des Aubry-André-Modells mit quasiperiodischem Potential, der Nutzen quantenmechanischer Phasenraumdarstellungen vorgeführt. Bemerkenswert ist dabei, dass sowohl Orts- als auch Impulsinformationen gleichberechtigt erfasst werden. Diese Informationen sind aber aufgrund der Heisenbergschen Unschärferelation nur mit endlicher Auflösung im Phasenraum verfügbar. Diesem Sachverhalt trägt die Husimi-Funktion als Betrag der Projektion auf Zustände minimaler Unschärfe im Phasenraum in besonderer Weise Rechnung. So entsteht eine positive Phasenraumfunktion, welche die Definition einer Inversen Besetzungszahl im Phasenraum ermöglicht. Mit ihrer Hilfe lassen sich dann auch höherdimensionale Probleme gut untersuchen.

Im Vergleich der Inversen Besetzungszahlen im Orts-, Impuls und Phasenraum stellte sich heraus, dass die endliche Auflösung im Phasenraum zu einer deutlich unterschiedlichen Interpretation der physikalischen Gegebenheiten führt. Die Phasenraumdarstellung analysiert die Kopplung im Ort oder im Impuls lokalisierter Zustände unter Berücksichtigung des Abstands der beteiligten lokalisierten Zustände, was sich deutlich in der Inversen Besetzungszahl niederschlägt. In einer Orts- oder Impulsdarstellung sind diese Unterscheidungen anhand der Inversen Besetzungszahlen hingegen nicht möglich. Es zeigte sich, dass man diese Eigenschaften detailliert im Rahmen eines Zwei-Zustands-Modells analysieren kann, bei dem die Kopplung von im Ort oder im Impuls lokalisierten Zuständen betrachtet wird. Anhand der Ergebnisse aus den Untersuchungen sowohl des Anderson-Modells in verschiedenen Dimensionen als auch des eindimensionalen Aubry-André-Modells stellte sich heraus, dass solche Kopplungseigenschaften einen erheblichen Einfluss auf das Auftreten von Metall-Isolator-Übergängen haben. Entsprechend deutlich sind die Auswirkungen im Phasenraum, während diese Unterschiede im Orts- oder Impulsraum insbesondere anhand von Besetzungszahlen nicht offensichtlich sind.

In der Anwendung auf das Problem wechselwirkender Teilchen in ungeordneten Systemen, das aufgrund verschiedener experimenteller Befunde in letzter Zeit

auf besonderes Interesse stößt, wurde allerdings deutlich, dass experimentell relevante Delokalisierungseffekte zumindest an dieser Stelle aufgrund numerischer Einschränkungen hinsichtlich Systemgröße und Teilchenzahl nicht beobachtet werden konnten. Gleichwohl sind aber die im Phasenraum gewonnenen physikalischen Einblicke in Metall-Isolator-Übergänge und diffusiven Transport sicherlich auch bei wechselwirkenden Problemen von erheblicher Bedeutung.

Anhand eines Zufallsmatrixmodells mit Wechselwirkung wurde daraufhin gezeigt, dass numerische Arbeiten trotz der Einschränkungen hinsichtlich Systemgröße und Teilchenzahl auch für wechselwirkende Probleme überaus interessante und relevante Beiträge liefern. Es ist gerade eine Stärke der Zufallsmatrixbeschreibung, bereits bei kleinen Systemen gute Approximationen generischen Verhaltens zu zeigen. Um den Einfluss von Wechselwirkungen zu analysieren, wurden dazu zunächst verschiedene Ensembles für Zweiteilchenwechselwirkungen mit Invarianz unter orthogonalen oder unitären Transformationen diskutiert. Ähnliche Betrachtungen werden in der Zufallsmatrixtheorie für Gaußsche Ensembles angestellt. Mit dem so entstandenen Vielteilchenmodell wurden anschließend experimentell zugängliche Statistiken der Leitfähigkeitsspitzen der Coulomb-Blockade in Quantenpunkten ohne Berücksichtigung des Elektronenspins analysiert. Bereits anhand dieser Untersuchungen ergab sich, dass die Abstandsstatistik deutlich vom Einteilchen-Zufallsmatrixverhalten abweicht, während in der Leitfähigkeitsstatistik auch mit Wechselwirkung ein Einteilchen-Zufallsmatrixverhalten auftritt. Diese Beobachtungen decken sich hervorragend mit zahlreichen experimentellen Befunden. Gleichwohl ergibt sich im Rahmen dieses Modells beispielsweise durch Erweiterung auf Systeme mit Spin noch sehr viel Potential für weitere Untersuchungen.

Literaturverzeichnis

- [1] P. W. ANDERSON, *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*, Phys. Rev. **109**, 1492–1505 (1958).
- [2] B. KRAMER and A. MACKINNON, *Localization: theory and experiment*, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469–1564 (1993).
- [3] D. L. SHEPELYANSKY, *Coherent Propagation of Two Interacting Particles in a Random Potential*, Phys. Rev. Lett. **73**, 2607–2610 (1994).
- [4] E. ABRAHAMS, D. V. KRAVCHENKO, and M. O. SARACHIK, *Metallic behavior and related phenomena in two dimensions*, Rev. Mod. Phys. **73**, 251–266 (2001).
- [5] E. WIGNER, *On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium*, Phys. Rev. **40**, 749–759 (1932).
- [6] K. HUSIMI, *Some formal properties of the density matrix*, Proc. Phys. Math. Soc. Jpn. **22**, 264–314 (1940).
- [7] H.-W. LEE, *Theory and Application of the Quantum Phase-Space Distribution Functions*, Phys. Rep. **259**, 147–211 (1995).
- [8] D. WEINMANN, S. KOHLER, G.-L. INGOLD, and P. HÄNGGI, *Disordered Systems in Phase Space*, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, SI277–SI280 (1999).
- [9] A. WOBST, G.-L. INGOLD, P. HÄNGGI, and D. WEINMANN, *From ballistic motion to localization: a phase space analysis*, Eur. Phys. J. B **27**, 11–14 (2002).
- [10] G.-L. INGOLD, A. WOBST, C. AULBACH, and P. HÄNGGI, *Delocalization and Heisenberg’s uncertainty relation*, Eur. Phys. J. B **30**, 175–179 (2002).
- [11] C. AULBACH, *Phasenraumanalyse des Harper-Modells*, Diplomarbeit, Universität Augsburg (2002).
- [12] G.-L. INGOLD, A. WOBST, C. AULBACH, and P. HÄNGGI, *What do phase space methods tell us about disordered quantum systems?*, arXiv:cond-mat/0212035.

- [13] A. WOBST, G.-L. INGOLD, P. HÄNGGI, and D. WEINMANN, *Phase space signatures of the Anderson transition*, arXiv:cond-mat/0303274.
- [14] S. AUBRY and G. ANDRÉ, *Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices*, Ann. Israel Phys. Soc. **3**, 133–164 (1980).
- [15] P. G. HARPER, *Single Band Motion of Conduction Electrons in a Uniform Magnetic Field*, Proc. Phys. Soc. London Sect. A **68**, 874–878 (1955).
- [16] M. KOHMOTO, *Metal-Insulator Transition and Scaling for Incommensurate Systems*, Phys. Rev. Lett. **51**, 1198–1201 (1983).
- [17] E. ABRAHAMS, P. W. ANDERSON, D. C. LICCIARDELLO, and T. V. RAMAKRISHNAN, *Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **42**, 673–676 (1979).
- [18] P. A. LEE and T. V. RAMAKRISHNAN, *Disordered electronic systems*, Rev. Mod. Phys. **57**, 287–337 (1985).
- [19] A. MACKINNON and B. KRAMER, *One-Parameter Scaling of Localization Length and Conductance in Disordered Systems*, Phys. Rev. Lett. **47**, 1546–1549 (1981).
- [20] M. L. METHA, *Random matrices*, Academic Press, New York (1991).
- [21] Y. ALHASSID, P. JACQUOD, and A. WOBST, *Random matrix model for quantum dots with interactions and the conductance peak spacing distribution*, Phys. Rev. B **61**, R13357–R13360 (2000).
- [22] Y. ALHASSID, P. JACQUOD, and A. WOBST, *Fluctuations of interaction and the peak spacing distribution in Coulomb blockade quantum dots*, Physica E **9**, 393–396 (2001).
- [23] C. W. J. BEENAKKER, *Theory of Coulomb-blockade oscillations in the conductance of a quantum dot*, Phys. Rev. B **44**, 1646–1656 (1991).
- [24] R. A. JALABERT, A. D. STONE, and Y. ALHASSID, *Statistical Theory of Coulomb Blockade Oscillations: Quantum Chaos in Quantum Dots*, Phys. Rev. Lett. **68**, 3468–3471 (1992).
- [25] Y. ALHASSID, *The statistical theory of quantum dots*, Rev. Mod. Phys. **72**, 895–968 (2000).
- [26] Y. ALHASSID and A. WOBST, *Interaction effects on the conductance peak height statistics in quantum dots*, Phys. Rev. B **65**, 041304(R)-1–4 (2002).
- [27] U. SIVAN, R. BERKOVITS, Y. ALONI, O. PRUS, A. AUERBACH, and G. BEN-YOSEPH, *Mesoscopic Fluctuations in the Ground State Energy of Disordered Quantum Dots*, Phys. Rev. Lett. **77**, 1123–1126 (1997).

- [28] S. R. PATEL, S. M. CRONENWETT, D. R. STEWART, A. G. HUIBERS, C. M. M. C. I. DURUÖZ, J. J. S. HARRIS, K. CAMPMAN, and A. C. GOSSARD, *Statistics of Coulomb Blockade Peak Spacings*, Phys. Rev. Lett. **80**, 4522–4525 (1998).
- [29] A. M. CHANG, H. U. BARANGER, L. N. PFEIFFER, K. W. WEST, and T. Y. CHANG, *Non-Gaussian Distribution of Coulomb Blockade Peak Heights in Quantum Dots*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1695–1698 (1996).
- [30] J. A. FOLK, S. R. PATEL, S. F. GODIJN, A. G. HUIBERS, S. M. CRONENWETT, C. M. MARCUS, K. CAMPMAN, and A. C. GOSSARD, *Statistics and Parametric Correlations of Coulomb Blockade Peak Fluctuations in Quantum Dots*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1699–1702 (1996).
- [31] P. W. ANDERSON, *Localized Magnetic States in Metals*, Phys. Rev. **124**, 41–53 (1961).
- [32] C. E. SHANNON, *Communication in the Presence of Noise*, Proceedings Institute of Radio Engineers **37**, 10–21 (1949).
- [33] N. F. MOTT and W. D. TWOSE, *The Theory of Impurity Conduction*, Adv. Phys. **10**, 107–163 (1961).
- [34] N. F. MOTT, *Electrons in Disordered Structures*, Adv. Phys. **16**, 49–144 (1967).
- [35] K. B. EFETOV, *Level spacing distribution in small metallic particles*, J. Phys. C **15**, L909–L914 (1982).
- [36] U. SIVAN and Y. IMRY, *Energy-level correlation function and ac conductivity of a finite disordered system*, Phys. Rev. B **35**, 6074–6083 (1987).
- [37] D. R. HOFSTADTER, *Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields*, Phys. Rev. B **14**, 2239–2249 (1976).
- [38] C. TANG and M. KOHMOTO, *Global scaling properties of the spectrum for a quasiperiodic Schrödinger equation*, Phys. Rev. B **34**, 2041–2044 (1986).
- [39] A. D. ZDETSIS, C. M. SOUKOULIS, and E. N. ECONOMOU, *Fractal character of wave functions in one-dimensional incommensurate systems*, Phys. Rev. B **33**, 4936–4940 (1986).
- [40] J. AVRON and B. SIMON, *Singular Continuous Spectrum for a Class of Almost Periodic Jacobi Matrices*, Bull. Amer. Math. Soc. **6**, 81–85 (1982).
- [41] S. Y. JITOMIRSKAYA, *Metal-insulator transition for the almost Mathieu operator*, Ann. Math. **150**, 1159–1175 (1999).

- [42] D. J. THOULESS, *Bandwidths for a quasiperiodic tight-binding model*, Phys. Rev. B **28**, 4272–4276 (1983).
- [43] T. DITTRICH, P. HÄNGGI, G.-L. INGOLD, B. KRAMER, G. SCHÖN, and W. ZWERGER, *Quantum Transport and Dissipation*, Wiley-VCH, Weinheim (1998).
- [44] M. HILLERY, R. F. O’CONNELL, M. O. SCULLY, and E. P. WIGNER, *Distribution functions in physics: Fundamentals*, Phys. Rep. **106**, 121–167 (1984).
- [45] K. E. CAHILL and R. J. GLAUBER, *Density Operators and Quasiprobability Distributions*, Phys. Rev. **177**, 1882–1902 (1969).
- [46] P. LEBOEUF and A. VOROS, *Chaos-revealing multiplicative representation of quantum eigenstates*, J. Phys. A **23**, 1765–1774 (1990).
- [47] H. J. KORSCH, C. MÜLLER, and H. WIESCHER, *On the zeros of the Husimi distribution*, J. Phys. A **30**, L677–L684 (1997).
- [48] T. GORIN, H. J. KORSCH, and B. MIRBACH, *Phase-space localization and level spacing distributions for a driven rotor with mixed regular/chaotic dynamics*, Chem. Phys. **217**, 145–153 (1997).
- [49] S. FISHMAN, D. R. GREMPEL, and R. E. PRANGE, *Chaos, Quantum Recurrences, and Anderson Localization*, Phys. Rev. Lett. **49**, 509–512 (1982).
- [50] G. MANFREDI and M. R. FEIX, *Entropy and Wigner functions*, Phys. Rev. E **62**, 4665–4674 (2000).
- [51] A. SUGITA and H. AIBA, *Second moment of the Husimi distribution as a measure of complexity of quantum states*, Phys. Rev. E **65**, 036205 (2002).
- [52] J. REICHL, *Statistical Analysis of Regular and Irregular Wave Functions*, Europhys. Lett. **6**, 669–675 (1988).
- [53] V. ZELEVINSKY, B. A. BROWN, N. FRANZIER, and M. HOROI, *The nuclear shell model as a testing ground for the many-body quantum chaos*, Phys. Rep. **276**, 85–176 (1996).
- [54] J. PIPEK and I. VARGA, *Universal classification scheme for the spatial-localization properties of one-particle states in finite, d-dimensional systems*, Phys. Rev. A **46**, 3148–3163 (1992).
- [55] I. VARGA and J. PIPEK, *Information length and localization in one dimension*, J. Phys.: Condens. Matter **6**, L115–L122 (1994).
- [56] D. J. THOULESS, *Electrons in disordered systems and the theory of localization*, Phys. Rep. **13**, 93–142 (1974).

- [57] C. AULBACH, A. WOBST, G.-L. INGOLD, P. HÄNGGI, and I. VARGA, unveröffentlicht.
- [58] I. VARGA and J. PIPEK, *On Renyi entropies characterizing the shape and the extension of the phase space representation of quantum wave functions in disordered systems*, cond-mat/0204041.
- [59] J. HUBBARD, *Electron correlations in narrow energy bands*, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238–257 (1963).
- [60] J. KANAMORI, *Electron correlation and ferromagnetism of transition metals*, Proc. Roy. Soc. A **30**, 275–289 (1963).
- [61] M. C. GUTZWILLER, *Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals*, Phys. Rev. Lett. **10**, 159–162 (1963).
- [62] E. H. LIEB and F. Y. WU, *Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension*, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445–1448 (1968).
- [63] M. IMADA, A. FUJIMORI, and Y. TOKURA, *Metal-insulator transitions*, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039–1263 (1998).
- [64] Y. IMRY, *Coherent Propagation of Two Interacting Particles in a Random Potential*, Europhys. Lett. **30**, 405–408 (1995).
- [65] D. WEINMANN, A. MÜLLER-GROELING, J.-L. PICHARD, and K. FRAHM, *$h/2e$ Oscillations for Correlated Electron Pairs in Disordered Mesoscopic Rings*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1598–1601 (1995).
- [66] D. WEINMANN and J.-L. PICHARD, *Level Statistics and Localization for Two Interacting Particles in a Random Potential*, Phys. Rev. Lett. **77**, 1556–1559 (1996).
- [67] D. WEINMANN, J.-L. PICHARD, and Y. IMRY, *Thouless Numbers for Few-Particle Systems with Disorder and Interaction*, J. Phys. I **7**, 1559–1581 (1997).
- [68] A. WOBST, *Energieniveaustatistik weniger wechselwirkender Teilchen in ungeordneten Systemen*, Diplomarbeit, Universität Augsburg (1998).
- [69] R. A. RÖMER and M. SCHREIBER, *No Enhancement of the Localization Length for Two Interacting Particles in a Random Potential*, Phys. Rev. Lett. **78**, 515–518 (1997).
- [70] K. FRAHM, A. MÜLLER-GROELING, J.-L. PICHARD, and D. WEINMANN, *Comment on “No Enhancement of the Localization Length for Two Interacting Particles in a Random Potential”*, Phys. Rev. Lett. **78**, 4889 (1997).

- [71] J. RICHERT and H. A. WEIDENMÜLLER, *Two Interaction Electrons in a Disorder Potential: Localization Properties*, arXiv:cond-mat/0212210.
- [72] L. P. LÉVY, G. DOLAN, J. DUNSMUIR, and H. BOUCHIAT, *Magnetization of mesoscopic copper rings: Evidence for persistent currents*, Phys. Rev. Lett. **64**, 2074–2077 (1990).
- [73] V. CHANDRASEKHAR, R. A. WEBB, M. J. BRADY, M. B. KETCHEN, W. J. GALLAGHER, and A. KLEINSASSER, *Magnetic response of a single, isolated gold loop*, Phys. Rev. Lett. **67**, 3578–3581 (1991).
- [74] J. K. CULLUM and R. A. WILLOUGHBY, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations Vol. I & II*, Birkhäuser, New York (1985).
- [75] I. PESCHEL, X. WANG, M. KAULKE, and K. HALLBERG (Herausgeber), *Density-Matrix Renormalization: A New Numerical Method in Physics*, Band 528, Lecture Notes in Physics, Springer, Berlin (1998).
- [76] P. J. FORRESTER, N. C. SNAITH, and J. J. M. VERBAARSCHOT, *Developments in random matrix theory*, J. Phys. A **36**, R1–R10 (2003).
- [77] C. E. PORTER and N. ROSENZWEIG, *Statistical Properties of Atomic and Nuclear Spectra*, Ann. Acad. Sci. Fennicae A-VI **44**, 1–66 (1960).
- [78] J. B. FRENCH and S. S. M. WONG, *Validity of random matrix theories for many-particle systems*, Phys. Lett. B **33**, 449–452 (1970).
- [79] O. BOHIGAS and J. FLORES, *Two-body random hamiltonian and level density*, Phys. Lett. B **34**, 261–263 (1971).
- [80] M. A. KASTNER, *The single-electron transistor*, Rev. Mod. Phys. **64**, 849–858 (1992).
- [81] V. I. FAL’KO and K. B. EFETOV, *Statistics of fluctuations of wave functions of chaotic electrons in a quantum dot in an arbitrary magnetic field*, Phys. Rev. B **50**, 11267–11270 (1994).
- [82] Y. ALHASSID, J. N. HORMUZDIAR, and N. D. WHELAN, *Coulomb blockade conductance peak distributions in quantum dots and the crossover between orthogonal and unitary symmetry*, Phys. Rev. B **58**, 4866–4875 (1998).
- [83] S. A. VAN LAGEN, P. W. BROUWER, and C. W. BEENAKKER, *Fluctuating phase rigidity for a quantum chaotic system with partially broken time-reversal symmetry*, Phys. Rev. E **55**, R1–R4 (1997).
- [84] Y. ALHASSID and A. WOBST, unveröffentlicht.
- [85] E. C. STONER, *Ferromagnetism*, Rep. Prog. Phys. **11**, 43–112 (1947).

- [86] D. WEINMANN, W. HÄUSLER, W. PFAFF, B. KRAMER, and U. WEISS, *Spin Blockade in Non-linear Transport through Quantum Dots*, Europhys. Lett. **26**, 467–472 (1994).
- [87] D. WEINMANN, *Quantum Transport in Nanostructures*, Dissertation, Universität Hamburg (1994).
- [88] A. HÜTTEL, H. QIN, A. HOLLEITNER, R. BLICK, K. NEUMAIER, D. WEINMANN, K. EBERL, and J. KOTTHAUS, *Spin blockade in ground state resonance of a quantum dot*, Europhys. Lett. **62**, 712–718 (2003).
- [89] H. U. BARANGER, D. ULLMO, and L. I. GLAZMAN, *Interactions and interference in quantum dots: Kinks in Coulomb-blockade peak positions*, Phys. Rev. B **61**, R2425–R2428 (2000).
- [90] S. LÜSCHER, T. HEINZEL, K. ENSSLIN, W. WEGSCHEIDER, and M. BICHLER, *Signatures of Spin Pairing in Chaotic Quantum Dots*, Phys. Rev. Lett. **86**, 2118–2121 (2000).
- [91] Y. ALHASSID, H. A. WEIDENMÜLLER, and A. WOBST, unveröffentlicht.

Danksagung

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

Ein herzliches Dankeschön gilt Prof. Ingold, der die Betreuung und Erstberichterstattung dieser Arbeit übernommen hat. Gleichmaßen sei auch Prof. Hänggi gedankt. Beide haben durch ihre freundliche, nette und offene Art sehr zu einer ausgesprochen zwanglosen Zusammenarbeit beigetragen, die ich als sehr wohltuend empfand. Eine besondere Freude war auch die überaus fruchtbare Zusammenarbeit mit Christian Aulbach, der sich im Rahmen seiner Diplomarbeit mit Details der Phasenraumeigenschaften des Aubry-André-Modells beschäftigt hat. Darüber hinaus danke ich Dietmar Weinmann für seine Diskussionsfreudigkeit und Unterstützung, die ich schon während meiner Diplomarbeit erfahren durfte und die mir unter anderem meinen Aufenthalt bei Prof. Alhassid an der Yale University ermöglicht hat. Auch sei das Engagement von Prof. Hänggi, Prof. Ingold, Dietmar Weinmann und Sigmund Kohler bei der Erarbeitung eines Themas für meine Promotion und der Organisation der Finanzierung hervorgehoben.

Herrn Höck möchte ich für die Übernahme der Zweitberichterstattung dieser Arbeit danken. Seine überaus freundliche und verständnisvolle Art war eine sehr angenehme Erfahrung.

Dank gebührt auch Prof. Alhassid, durch den ich bereits direkt im Anschluß an mein Diplom ein Jahr an der Yale University verbringen konnte, das für mich wissenschaftlich wie persönlich überaus lehrreich und gewinnbringend war. An dieser Stelle bedürfen auch die freundschaftlichen Diskussionen mit Philippe Jacquod und Prof. Weidenmüller eine besondere Erwähnung. Der Studienstiftung des Deutschen Volkes danke ich für die Förderung, die mir insbesondere den Aufenthalt in Yale ermöglicht hat.

Darüber hinaus sei allen Mitarbeitern am Lehrstuhl von Prof. Hänggi gedankt. Das freundschaftliche Klima war in jeglicher Hinsicht überaus wohltuend. Besondere Erwähnung gebührt Jörg Lehmann, Gerhard Schmid, Michael Schindler und Michael Straß. Mit Jörg Lehmann verbindet mich darüber hinaus eine langjährige gemeinsame Arbeit am Software-Projekt \mathbb{R}^X , das übrigens beispielsweise zur der Erstellung aller Abbildungen dieser Arbeit zum Einsatz kam.

Schließlich möchte ich mich ganz herzlich bei meinen Eltern bedanken, die mich stets in allen Belangen unterstützt und mir gleichzeitig schon seit Beginn meines Studienlebens sehr viel Eigenständigkeit ermöglicht haben. Meiner Freundin Claudia danke ich für viel Geduld und Unterstützung.

Lebenslauf

persönliche Daten

Name: André Wobst
Anschrift: Luitpoldstr. 9
82256 Fürstenfeldbruck
Geburtsdatum und -ort: 17.05.1975, Dresden
Eltern: Prof.-Ing. Eberhard Wobst, Abteilungsleiter
Renate Wobst, geb. Schlegel, Lehrerin
Geschwister: Thomas, 17.09.1972

Ausbildung

09/1981–07/1989 54. Polytechnische Oberschule, Dresden
09/1989–07/1993 Martin-Anderson-Nexö-Gymnasium mit vertieftem
mathematisch-naturwissenschaftlichen Profil, Dresden
07/1993: Erlangung der allgemeinen Hochschulreife
10/1993–12/1998 Physikstudium an der Universität Augsburg
08/1995: Diplomvorprüfung
10/1997–10/1998: Diplomarbeit bei Prof. Ingold
*Energieniveaustatistik weniger
wechselwirkender Teilchen
in ungeordneten Systemen*
12/1998: Diplom
01/1999–12/1999 Forschungsaufenthalt an der Yale University
bei Prof. Alhassid
seit 01/2000 Promotion an der Universität Augsburg