

Teilprojekt

A14

Feinstruktur der Resonanzen im
Bernoulli–Anderson–Modell

2.1 Teilprojekt A14

Feinstruktur der Resonanzen im Bernoulli–Anderson–Modell

2.1.1 Antragsteller

PD Dr. Rudolf A. Römer	Prof. Dr. Peter Stollmann
22.02.1966	10.01.1961
Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme)	Professur Analysis
Institut für Physik	Fakultät für Mathematik
Technische Universität Chemnitz	Technische Universität Chemnitz
D-09107 Chemnitz	D-09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-3146	Tel.: (0371) 531-4126
Fax: (0371) 531-3151	Fax: (0371) 531-2141
r.roemer@physik.tu-chemnitz.de	peter.stollmann@mathematik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl.-Math. Steffen Klassert

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Der Effekt von Verunreinigungen in Festkörpern ist von fundamentaler Bedeutung für die Physik, sowohl in praktischer als auch in theoretischer Hinsicht. Die bahnbrechenden Arbeiten von P.W. Anderson [And58] sowie N.F. Mott und W.D. Twose [MT61] wurden aufgrund ihrer prinzipiellen Einsicht in diesen Themenkreis mit dem Nobelpreis gewürdigt.

Abhängig von der Dimension d des Systems erwartet man durch Unordnung eine mehr oder weniger drastische Verringerung der Mobilität, d.h. eine Unterdrückung der makroskopischen Transporteigenschaften [KM93]. Dabei geht man bei $d = 1, 2$ von Lokalisierung (kein Transport) und für $d \geq 3$ von einem Metall-Isolator-Übergang (MIÜ) aus. Letzteres bedeutet, dass es sowohl Energiebereiche mit lokalisierten als auch solche mit ausgedehnten Zuständen gibt.

Die rigorose analytische Behandlung dieses Phänomens ist sehr schwierig. Für das Auftreten von Energiebereichen mit gutem Transport gibt es noch keinen mathematischen Anhaltspunkt, obwohl sowohl die experimentellen als auch die numerischen Daten [KM93] überwältigende Hinweise darauf geben. Die ersten Lokalisierungsbeweise gehen auf Goldsheidt, Molchanov und Pastur [GMP77] in einer Dimension und Fröhlich und Spencer in $d \geq 2$ [FS83] zurück. Dabei muss man in letzterer Situation eine äußerst schwierige Multi-Skalen-Analyse bemühen. Für viele wichtige Modelle steht der Beweis für Lokalisierung noch aus. Für den aktuellen, mathematischen Kenntnisstand verweisen wir auf [Sto01].

Die Beschreibung ungeordneter Festkörper erfolgt typischerweise im Rahmen der Quantenmechanik unter Verwendung von Hamiltonoperatoren der Form

$$H(\omega) = H_0 + V_\omega, \quad (2.1)$$

die in $L^2(\mathbb{R}^d)$ (kontinuierlich) bzw. $l^2(\mathbb{Z}^d)$ (diskret) wirken. Der Einfachheit halber beschränken wir uns in der folgenden kurzen Beschreibung auf letzteren Fall. Dabei ist H_0 der diskrete Laplaceoperator,

$$H_0 u(n) = \sum_{|k-n|=1} u(k), \quad u \in l^2(\mathbb{Z}^d), \quad (2.2)$$

bei dem an jedem Punkt nur der Einfluss der nächsten Nachbarn eine Rolle spielt. Das zufällige Potential V_ω repräsentiert die Verunreinigung bzw. die Unordnung. Der Zufallsparameter ω durchläuft dabei einen Wahrscheinlichkeitsraum Ω , dessen Maß wir mit P bezeichnen. In der Zuordnung $\omega \mapsto V_\omega$ wird das spezielle Modell der Unordnung kodiert. Es handelt sich also in Wirklichkeit um eine ganze Klasse von Modellen, denn die Wahrscheinlichkeitsverteilung von $V_\omega(0)$ kann durch ein beliebiges Maß gegeben sein. Ein besonders wichtiges Modell ist das Anderson-Modell, bei dem die Werte von V_ω an den einzelnen Gitterpunkten unabhängig und identisch verteilt sind. Gebräuchlich ist hier die Gleichverteilung auf dem Intervall $[-W/2, W/2]$, wobei W die Stärke der Unordnung parametrisiert. Wir bezeichnen dieses Modell im Folgenden als gleichverteiltes Anderson-Modell (GAM).

Ein besonders attraktives Modell zur Beschreibung von Kristallen mit Defekten oder von metallischen Legierungen ergibt sich, wenn man für $V_\omega(0)$ nur zwei Werte annimmt, o.E. -1 und 0 , mit jeweils Wahrscheinlichkeit $1/2$. Dabei bedeutet $V_\omega(k) = 0$ gerade, dass z.B. am Gitterpunkt k kein Defekt-Ion sitzt. Da die Folge der $V_\omega(k)$, $k \in \mathbb{Z}^d$ in diesem Fall einen Bernoulli-Prozess darstellt, spricht man vom BAM, welches in der physikalischen Literatur auch unter den Stichworten *binäres Anderson-Modell* und *binäre Unordnung* zu finden ist.

Ein wichtiger Schritt in Lokalisierungs-Beweisen ist unter dem Namen *Wegner-Ungleichung* bekannt [Weg81] und bedeutet eine Abschätzung, dass in gewissen Energie-Intervallen die zufälligen Eigenwerte nur moderate Resonanzen aufweisen. Dies ist eng mit einer gewissen Glattheit der Zustandsdichte verbunden. Solche Ungleichungen sind für das GAM leicht zu zeigen [Sto00], für das BAM in $d = 1$ aber sehr schwer [CKM87, SVW98]. Für $d \geq 2$ war kein solcher Beweis bekannt. Dies war der Ausgangspunkt des vorliegenden Antrags, bei dem durch numerische Simulation die Grundlage für einen rigorosen Beweis geschaffen werden soll.

Da beim erst kürzlich gelungenen Beweis von Lokalisierung für das kontinuierliche BAM in einer Dimension [DSS04] festgestellt wurde, dass resonante Ausnahmenergien mit ausgedehnten Zuständen auftreten können, bestand die Frage, ob solche Resonanzen der integrierten Zustandsdichte auch in höheren Dimensionen auftreten können.

Diese Frage sollte unter Einsatz numerischer Simulationen in Verbindung mit analytischen Techniken geklärt werden.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Es sollten im Rahmen des vorliegenden Teilprojekts durch eine Abschätzung von Spitzen in der Zustandsdichte die numerischen Grundlagenuntersuchungen für einen mathe-

matisch rigorosen Beweis von Lokalisierung (oder eben Delokalisierung in bestimmten Energiebereichen) mit Hilfe der Wegner-Ungleichung durchgeführt werden.

Das haben wir im Antrag in folgende Einzelziele gegliedert:

- Numerische Überprüfung der Grundlagen zu einem analytischen Beweis für die Gültigkeit der Wegner-Ungleichung (und damit von Lokalisierung) im diskreten BAM in $d = 2, 3$.
- Entwicklung und Parallelisierung eines neuen Verfahrens zur Berechnung der Eigenwertverteilung des BAM und Vergleich mit den bereits für das GAM verwendeten parallelen Algorithmen.
- Gibt es in $d = 2, 3$ resonante Ausnahmeenergien und/oder ausgedehnte Zustände?
- Falls es solche ausgedehnten Zustände gibt, können diese ein Spektrum tragen, d.h., kann man Wellenpakete konstruieren, die zu einem endlichen Transport von Ladung führen?
- Welche Unterschiede ergeben sich zwischen diskretem und kontinuierlichem BAM? Führen diese zu anderen Aussagen bzgl. der Lokalisierungseigenschaften?

Hierbei sind in den verschiedenen Punkten analytische und numerische Fragen kombiniert. Ausgehend von bekannten und bewährten Verfahren sollte eine neue Methode zur effizienten parallelen Berechnung der Eigenwerte im BAM entwickelt werden, die, wie im Antrag beschrieben, die spezielle Struktur des BAM nutzt. Gleichzeitig war es das Traumziel, aus den so gewonnenen Einsichten über die Struktur der Eigenwertverteilung im BAM einen rigorosen Beweis für Lokalisierung zu erhalten.

Literaturverzeichnis (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [And58] P.W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, 1958.
- [CKM87] R. Carmona, A. Klein, and F. Martinelli. Anderson localization for Bernoulli and other singular potentials. *Commun. Math. Phys.*, 108:41–55, 1987.
- [DSS04] D. Damanik, R. Sims, and G. Stolz. Localization for one dimensional, continuum, Bernoulli–Anderson models. *J. Funct. Anal.*, 208:423–445, 2004.
- [FS83] J. Fröhlich and T. Spencer. Absence of diffusion in the Anderson tight binding model for large disorder or low energy. *Commun. Math. Phys.*, 88:151–184, 1983.
- [GMP77] I.Ya. Goldsheidt, S.A. Molchanov, and L.A. Pastur. Typical one-dimensional Schrödinger operator has pure point spectrum. *Funktsional. Anal. i Prilozhen*, 11:1–10, 1977.
- [KM93] B. Kramer and A. MacKinnon. Localization: theory and experiment. *Rep. Prog. Phys.*, 56:1469–1564, 1993.
- [MT61] N.F. Mott and W.D. Twose. The theory of impurity conduction. *Adv. Phys.*, 10:107–163, 1961.

- [Sto00] P. Stollmann. A short proof of a Wegner estimate and localization. *Arch. Math.*, 75:307–311, 2000.
- [Sto01] P. Stollmann. *Caught by disorder: bound states in random media*. Birkhäuser, Boston, 2001.
- [SVW98] C. Shubin, R. Vakilian, and T. Wolff. Some harmonic analysis questions suggested by Anderson–Bernoulli models. *Geom. Funct. Anal.*, 8:932–964, 1998.
- [Weg81] F. Wegner. Bounds on the density of states in disordered systems. *Z. Phys. B*, 44:9–15, 1981.

2.4 Ergebnisse

Bereits im ersten Jahr des Berichtszeitraumes, Oktober 2002, hat PD R. Römer einen Ruf an die University of Warwick angenommen, was die Schwerpunkte im vorliegenden Teilprojekt erheblich verschoben hat. Er hat, wie im Antrag ausgeführt, maßgeblich die numerische Kompetenz eingebracht und sein Fehlen hat die Arbeit an diesem Teil stark verzögert.

Numerische Ergebnisse

Zu untersuchen ist die Eigenwertverteilung (Zustandsdichte) des Bernoulli-Anderson-Modells in Dimensionen $d = 1, 2, 3$. Es sind die Eigenwerte einer Matrix zu berechnen, die durch Einschränkung eines zufälligen diskreten Schrödingeroperators auf einen Würfel mit Kantenlänge L entsteht. Zur Anwendung sollten iterative Verfahren wie z.B. Lanczos, Arnoldi kommen. Hierfür wurde die numerische Funktionsbibliothek Arpack eingesetzt. Desweiteren wurden direkte Löser benötigt. Hierfür wurde SuperLU eingesetzt. Zur Verringerung der effektiven Matrixgrößen sollte ein diskretes Birmann-Schwinger-Prinzip zur Anwendung kommen.

Das Programmierproblem ist in 3 Schritte unterteilt:

- Berechnung der Eigenwerte des BAM-Modells mit Hilfe der implicitly restarted Arnoldi Method (Arpack standard mode)
- Berechnung der Eigenwerte des BAM-Modells mit Hilfe der implicitly restarted Arnoldi Method (Arpack shift and invert mode)
- Berechnung der Eigenwerte des BAM-Modells mit Hilfe der oben genannten Verfahren und des Birmann-Schwinger-Prinzips

Die Programmierarbeiten für den ersten Schritt sind weitgehend abgeschlossen. Das Programm ist lauffähig auf den HP-UX und Linux Rechnern (PIII 500MHz) der Physik sowie auf dem Itanium IA64 basierten 4 Prozessorsystem der Fakultät für Mathematik. Die maximale Matrixgröße, für die das Programm Ergebnisse liefert, liegt in Abhängigkeit von der gewählten Anzahl der zu berechnenden Eigenwerte und der Anzahl der verwendeten Lanczos-Basisvektoren bei ca. 8000×8000 . Dies entspricht einem BAM-Modell mit Kantenlänge $L = 20$.

Da die implicitly restarted Arnoldi Method nur an den Rändern des Spektrums effizient rechnet, wurde im zweiten Schritt die implicitly restarted Arnoldi Method im shift and invert mode verwendet. Hier werden beliebige Portionen des Spektrums an den

Rand geshiftet, berechnet und wieder zurück transformiert. Für diese Methode werden Funktionen benötigt, die Matrix-Vektor-Multiplikationen durchführen und Gleichungssysteme lösen. Hierfür wurde die Funktionsbibliothek SuperLU benutzt. Als Grundlage diente hier das Programm aus Schritt 1.

Wir können mit dieser Methode Ergebnisse erzielen für Matrixgrößen 36000×36000 . Dies entspricht etwa einem dreidimensionalen Modell mit Kantenlänge $L = 33$. Hier ist jedoch zu erwarten, dass man durch einige systematische Änderungen im Programm und durch den Austausch der Funktionsbibliothek SuperLU gegen UMFPACK auch größere Modelle berechnen kann.

Für die Realisierung des dritten Programmierschrittes wurden die Programme aus Schritt 1 und 2 benötigt. Hier wurden grundlegende numerische und analytische Überlegungen zur numerischen Realisierung des diskreten Birmann-Schinger Prinzips angestellt. Durch anfänglich massive Probleme mit der Funktionsbibliothek SuperLU und durch den Wechsel von PD R. Römer an die University of Warwick im Oktober 2002 hat sich der Zeitplan verschoben. Daher ist dieser Programmteil zur Zeit noch nicht einsetzbar.

Es waren umfangreiche Programmieraufgaben zu erledigen, die sich in einigen tausend Zeilen Code substantiieren. Zur Illustration mögen einige Beispielsamples dienen, die in den Abbildungen graphisch dargestellt sind. Hierbei sind verschiedene Realisierungen des Zufallspotentials gerechnet worden. Die Berechnungen sowie die Auswertung der Ergebnisse werden gemäß dem ursprünglichen Antrag weitergeführt und in die Dissertation [Klang] von S. Klassert einfließen.

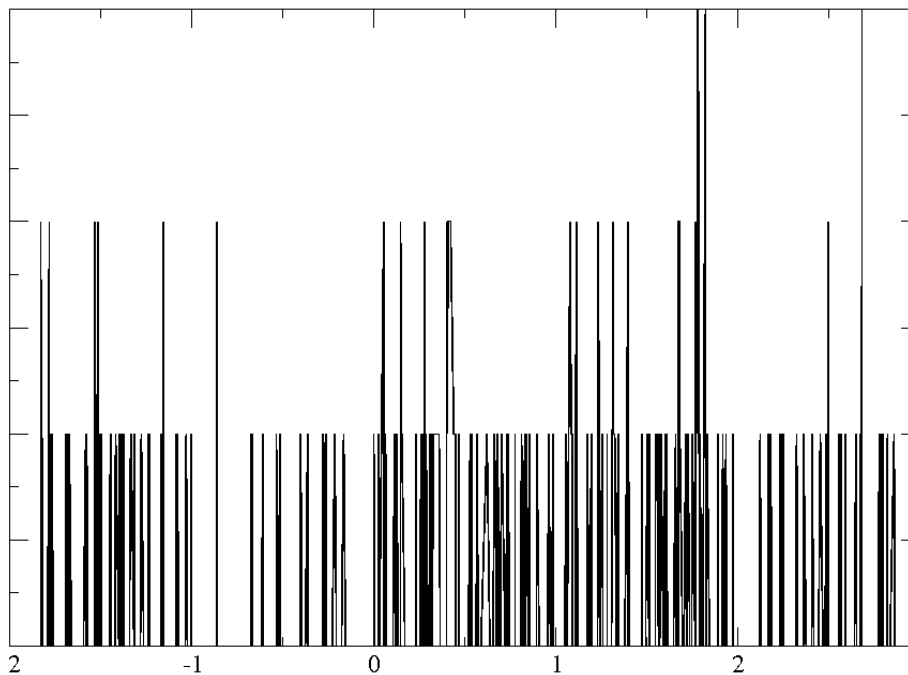


Abbildung 2.1: Eine Dimension, Kantenlänge 1000

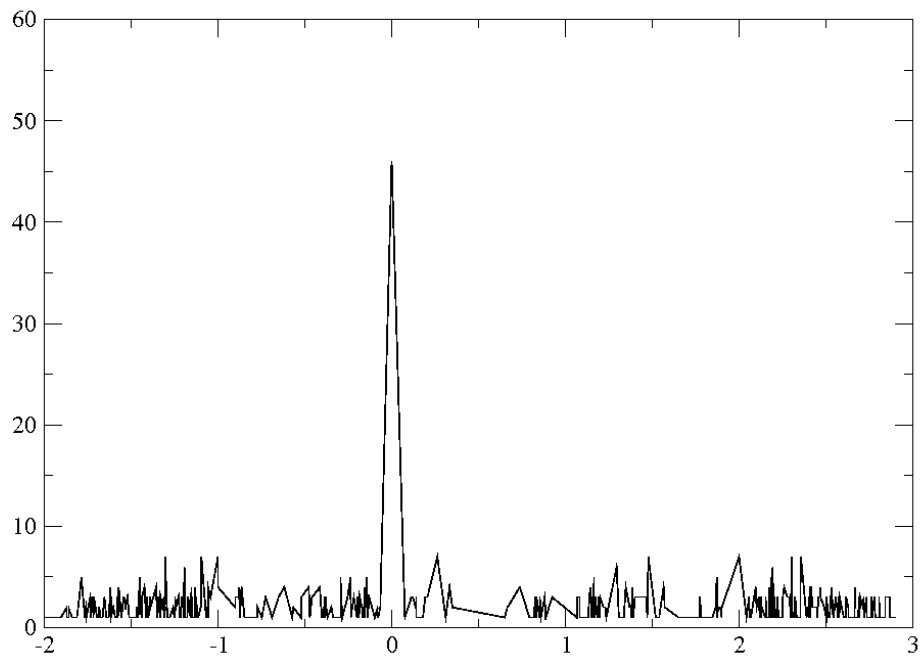


Abbildung 2.2: Drei Dimensionen, Kantenlänge 10, Realisierung 1

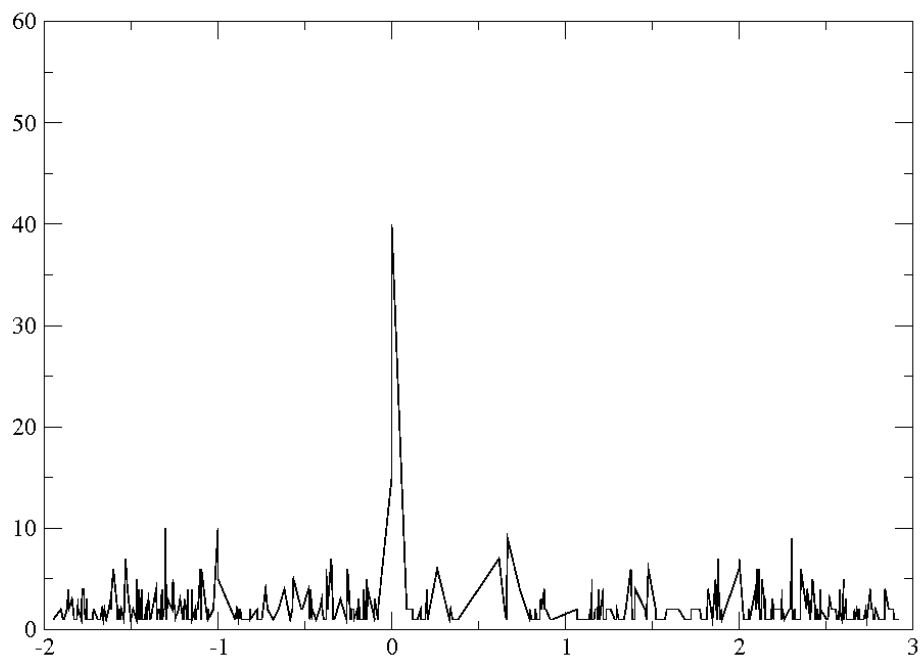


Abbildung 2.3: Drei Dimensionen, Kantenlänge 10, Realisierung 2

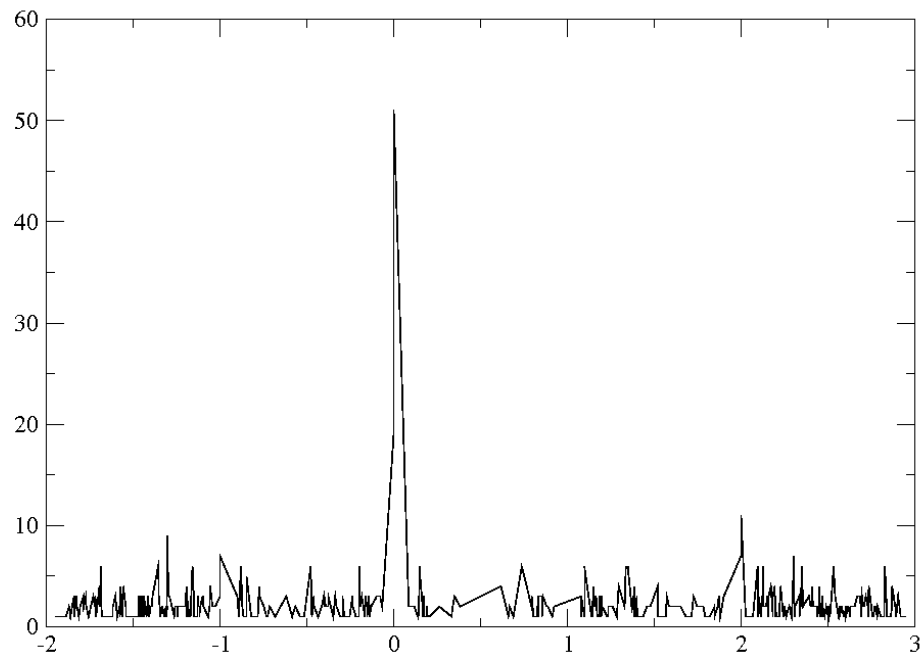


Abbildung 2.4: Drei Dimensionen, Kantenlänge 10, Realisierung 3

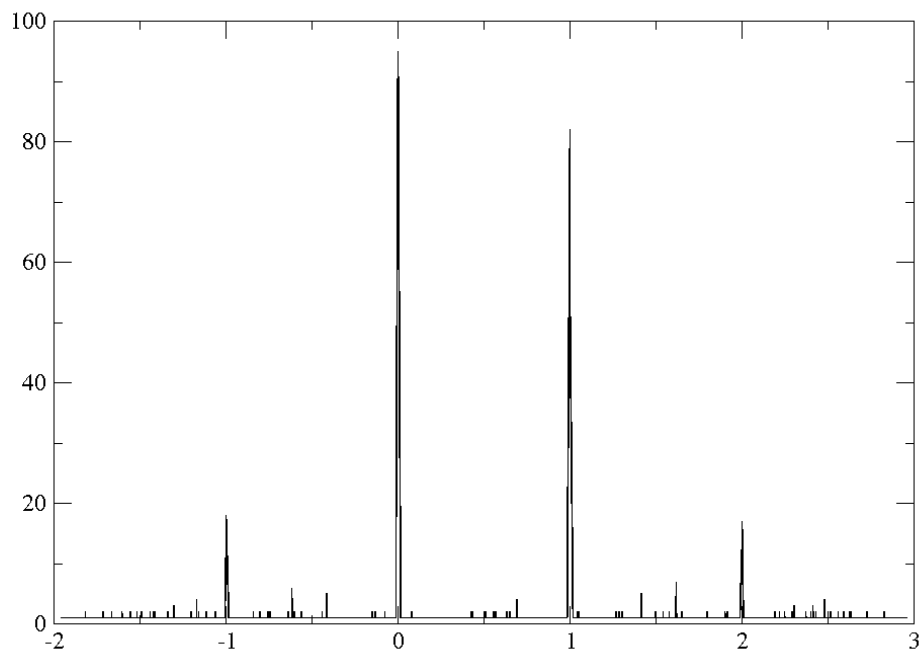


Abbildung 2.5: Drei Dimensionen, Kantenlänge 20

Weitere Ergebnisse sind in [PRS03] veröffentlicht. Mit den analytischen Grundlagen zu Wegner-Ungleichungen und Lokalisierung sind die Arbeiten [dMS03a, dMS03b, dMSS04, BKS03, Stont] befasst. Die Kooperation, die zum Teil diesen Arbeiten zugrunde liegt, wurde innerhalb des SFB gefördert.

Ein Schritt in die Richtung, geeignete Stetigkeitsaussagen der integrierten Zustandsdichte für singuläre Maße zu erhalten, wurde in der Arbeit [HKN⁺04] geleistet.

Das spektakulärste Ergebnis im Zusammenhang mit dem hier vorliegenden Teilprojekt wurde aber außerhalb des SFB erzielt. Mit J. Bourgain (Träger der Fields-Medaille) und C. Kenig haben zwei herausragende Mathematiker die positive Lösung des Problems angekündigt, [BK04]: Auch in $d \geq 2$ liegt im kontinuierlichen Bernoulli-Anderson-Modell Lokalisierung für kleine Energien vor.

Literaturverzeichnis

- [BK04] J. Bourgain and C. Kenig. On localization in the continuous Anderson-Bernoulli model in higher dimensions. *submitted*, 2004.
- [BKS03] S. Böcker, W. Kirsch, and P. Stollmann. Spectral theory for nonstationary random models. *Preprint*, 2003.
- [dMS03a] A. Boutet de Monvel and P. Stollmann. Dynamical localization for continuum random surface models. *Arch. Math.*, 80:87 – 97, 2003.
- [dMS03b] A. Boutet de Monvel and P. Stollmann. Eigenfunction expansions for generators of dirichlet forms. *J. Reine Angew. Math.*, 561:131 – 144, 2003.
- [dMSS04] A. Boutet de Monvel, P. Stollmann, and G. Stolz. Absence of continuous spectral types for certain nonstationary random models. *Preprint*, 2004.
- [HKN⁺04] D. Hundertmark, R. Killip, S. Nakamura, P. Stollmann, and I. Veselic. Bounds on the spectral shift function and the density of states. *Preprint*, 2004.
- [Klang] S. Klassert. Spektraleigenschaften diskreter Schrödinger-Operatoren mit zufälligem Potential. Doktorarbeit, TU Chemnitz, in Vorbereitung.
- [PRS03] I. Plyushchay, R. A. Römer, and M. Schreiber. The three-dimensional Anderson model of localization with binary random potential. *Phys. Rev. B* 68, 064201, 2003.
- [Stont] P. Stollmann. Localization and delocalization for nonstationary models. In P. Blanchard and G. Dell’Antonio, editors, *Multiscale Methods in Quantum Mechanics: Theory and Experiment*, Boston, in print. Birkhäuser.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Es stehen noch Antworten auf einige der Fragen aus dem zugrunde liegenden Antrag aus. Nach Beheben der Probleme im Zusammenhang mit der Programmierung sollen nun die geplanten Produktionsläufe stattfinden. Auch nach der Lösung des Ausgangsproblems durch Bourgain und Kenig bleiben wichtige Fragen offen, da dort ausschließlich das kontinuierliche Modell behandelt wurde.