2.1 Teilprojekt C1

Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen Materialien

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Michael Schreiber

Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme)
Institut für Physik
Technische Universität Chemnitz
D-09107 Chemnitz
Tel. (0371) 531-3142, Fax (0371) 531-3143
Email: schreiber@physik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

cand. phys. Phillip Cain
Dipl.-Phys. Frank Milde
Dr. Kirsten Müller
Dr. Thomas Rieth
Rudolf A. Römer, Ph.D.
F.M. Ville Uski
M.S. Cristine Villagonzalo

Die im SFB-Antrag 96-98 für Dr. M. Hertel beantragte volle Stelle wurde mit Dr. Römer besetzt, da Dr. Hertel noch vor Beginn des SFB in die Industrie wechselte. Dr. Müller hat die für sie beantragte halbe Stelle zunächst wie geplant eingenommen, ist aber nach 1 Jahr aufgrund ihrer Schwangerschaft ausgeschieden. Diese halbe Stelle ist z.Z. mit Herrn Milde im Rahmen seiner Doktorarbeit besetzt. Dr. Rieth (Grundausstattung) wechselte nach Abschluß seiner Doktorarbeit in die Industrie und nahm ein JSPS-Stipendium in Japan an. Herr Uski war zu Beginn seiner Tätigkeit aus SHK-Mitteln im SFB beschäftigt, z.Z. erhält er ein Stipendium des DAAD für finnische Staatsbürger zur Finanzierung seiner Doktorarbeit in Chemnitz. Frau Villagonzalo kam als SFB-Gast vom ICTP Trieste zu uns. Ihre Leistungen überzeugten uns, und sie arbeitet nun als Stipendiat des Graduiertenkollegs „Dünne Schichten und nichtkristalline Materialien“ an ihrer Doktorarbeit. Herr Cain wurde anfangs im Rahmen der SHK-Stelle im SFB beschäftigt und arbeitet z.Zt. an seiner Diplomarbeit.

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Gegenstand des Teilprojekts ist die computergestützte Untersuchung des durch Unordnung induzierten Metall-Isolator-Übergangs (MIÜ) in amorphen Materialien. Durch Beschreibung der Elektronenzustände in ungeordneten Strukturen soll das Auftreten des Übergangs und das kritische Verhalten in Abhängigkeit von den charakteristischen Eigenschaften des zugrundegelegten Systems untersucht werden. Die Charakterisierung des Phasenübergangs erfolgt über die Bestimmung des kritischen Exponenten, Untersuchungen zum multifraktalen Verhalten von Wellenfunktionen sowie durch Analyse von Energieniveaustatistiken (ENS). Weiterhin gilt das Interesse den verschiedenen Arten der Unordnungsrealisierung, wobei neben energetischer Unordnung insbesondere der Einfluß topologischer Unordnung untersucht wird. Mit Hilfe der Transfermatrixmethode (TMM), der ENS und der multifraktalen Analyse (MFA) ist es weiterhin möglich, die Gültigkeit der Einparameterskalenhypothese zu testen und Aussagen über das Verhalten der Systeme bei Anwesenheit eines Magnetfeldes und Vielteilchenwechselwirkung zu treffen.

Eine große Zahl dieser Untersuchungen beruht auf dem Anderson-Modell der Lokalisierung [1], in dem sich unkorrelierte Elektronen auf einem regelmäßigen Gitter bewegen, aber potentialenergetischer Unordnung, d.h. zufällig gewählten potentiellen Energien $\epsilon_i \in [-W/2, +W/2]$ an den Gitterplätzen i, ausgesetzt sind. Der Hamiltonoperator ist [1]

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle\langle j| \quad , \tag{2.1}$$

wobei die Transferintegrale t_{ij} das „Hüpfen" der Elektronen von i nach j beschreiben und zumeist auf nächste Nachbarplätze beschränkt werden.

In der numerischen Berechnung physikalischer Größen, z.B. unter Verwendung von Transfermatrix- und Lanczos-Algorithmus in Verbindung mit Finite-Size-Scaling-Methoden, ist ein hohes Maß an Rechenleistung und Speicherkapazität erforderlich, welches nur auf Höchstleistungsrechnern erzielt werden kann. Ein wichtiger Teil des Projekts ist deshalb die Anpassung der vorhandenen Algorithmen an massiv parallele Rechner, um so die Größe der betrachteten Systeme zu erhöhen und damit den Einfluß von Finite-Size-Effekten zu verringern. Dazu werden die genannten Algorithmen parallelisiert, insbesondere unter dem Aspekt der automatischen Adaption an die Anzahl der jeweils zur Verfügung stehenden Prozessoren. Das Projekt umfaßt dabei auch die Entwicklung neuer beziehungsweise abgewandelter Algorithmen, bei denen die Forderung nach einem möglichst geringen Kommunikationsbedarf zwischen den Prozessoren besser als bei den bisherigen Algorithmen erfüllt werden kann.

Die zwei wichtigsten numerischen Verfahren des vorliegenden Teilprojekts sind die TMM auf quasi-eindimensionalen (1D) Streifen oder Balken [2] und der Lanczos-Algorithmus zur iterativen Diagonalisierung einer Matrix [3]. Über beide Methoden gab es regen Erfahrungsaustausch mit den Teilprojekten A3 und A4 der numerischen Mathematik, die als Zielsetzung die Lösung großer linearer Gleichungssysteme haben. Zum Teilprojekt C2, in dem das dynamische Verhalten sowie die Glaseigenschaften unkorrelierter Vielteilchensysteme untersucht werden, bestand auf der physikalischen als auch auf der numerischen Seite eine rege Zusammenarbeit.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe „Das anisotrope Anderson-Modell der Lokalisierung“

Bei der detaillierten Analyse der Eigenfunktionen des Anderson-Modells in 3D Systemen ergab sich, daß die Eigenfunktionen am Phasenübergang multifraktalen Charakter aufweisen und das zugehörige Singularitätsspektrum unabhängig von den mikroskopischen Eigenschaften des Systems ist [4]. Somit ist eine Abschätzung der kritischen Unordnung W_c als auch eine Bestimmung der Mobilitätskante E_c möglich [5]. Dies legt die Vermutung nahe, daß die Transporteigenschaften sowie das spektroskopische Verhalten ungeordneter Systeme mit dem multifraktalen Charakter der Wellenfunktion verknüpft werden können.

Eine anisotrope Version des Anderson-Modells ist in letzter Zeit in Zusammenhang mit den beobachteten anisotropen Transporteigenschaften der Hochtemperatursupraleiter untersucht worden [6, 7]. Einige Arbeiten, basierend auf der TMM, sagen voraus, daß der MIÜ auch für sehr starke Anisotropien γ bestehen bleibt [7]. Insbesondere wird vorausgesagt, daß der Wert der kritischen Unordnung in der Bandmitte dem Potenzgesetz $W_c \propto (1-\gamma)^\beta$ folgt, und zwar unabhängig von der Richtung der Anisotropie in den quasi-1D Balken der TMM [2]. Desweiteren soll β unabhängig von γ sein.

Wir haben nun die Methoden der MFA im anisotropen Anderson-Modell mit (a) schwach gekoppelten Ebenen ($t_x = t_y = 1$, $t_z = 1-\gamma$) und (b) schwach gekoppelten Ketten ($t_x = t_y = 1-\gamma$, $t_z = 1$) angewandt. Damit können zum einen die Resultate der TMM mit einer unabhängigen numerischen Methode überprüft werden. Zum anderen bietet sich an diesem Modell natürlich auch die Möglichkeit, die im isotropen Anderson-Modell gesammelten Erfahrungen mit der MFA zu testen. Numerisch ist der dabei zu bewältigende Aufwand sehr groß, da wir natürlich nun mit der Anisotropie γ einen zusätzlichen Parameter variieren müssen. Deshalb mußte als erstes eine Überarbeitung und Parallelisierung der vorhandenen Eigenproblemlöser vorgenommen werden.

2.3.2 Teilaufgabe „Das Anderson-Modell mit zufälligem Hüpfen“

Wie oben erwähnt benutzen die meisten Arbeiten über das Lokalisierungsproblem das in Gl. (2.1) definierte Anderson-Modell mit potentialenergetischer Unordnung. Jedoch kann man sich auch vorstellen, daß die Unordnung in diesem Modell durch zufällig gewählte Transferintegrale $t_{ij} \in [c - w/2, c + w/2]$ gegeben ist. Ein System, in dem die Gitteratome zufällig aus ihren geordneten Ruhelagen ausgelenkt sind, ist z.B. durch ein solches Modell vernünftig beschrieben. Über das Anderson-Modell mit zufälligen Hüpfelementen existieren nur wenige Arbeiten [8, 9, 10]. In 1D wurde schon 1953 von Dyson [8] gezeigt, daß die Zustandsdichte eine Singularität bei $E = 0$ besitzt. Desweiteren sagen vor der Skalenhypothese entstandene Arbeiten über das 2D Modell [10] voraus, daß die Lokalisierungslängen viel größer als im Falle einer potentialenergetischen Unordnung sind. Selbst die Möglichkeit von ausgedehnten Zuständen in 2D wird in diesen Arbeiten diskutiert. Eine weitere Motivation zum Studium dieses Modelles ist durch die enge Verwandtschaft mit dem Anderson-Modell in einem zufälligen magnetischen Fluß gegeben [11, 12]. Der magnetische Fluß koppelt über den Peierlsphasenfaktor an die Transferintegrale t_{ij} an. Unser Modell kann deshalb auch als Anderson-Zufallsfluß-Modell mit konstantem Phasenfaktor 0, aber zufälligem Betrag angesehen werden. Obwohl sich schon einige Arbeiten mit diesem Modell beschäftigen, gibt es z.Z. jedoch widersprüchliche Resultate, die in 2D und bei $E = 0$ teils eine vollständige Unterdrückung der Diffusion, teils aber ausgedehnte Zustände vorhersagen [11].

Wir haben die 2D Version des Anderson-Modells mit zufälligem Hüpfen mit Hilfe der exakten Diagonalisierung, der MFA und der TMM untersucht.

2.3.3 Teilaufgabe „Einfluß von Wechselwirkung auf Zustände im Anderson-Modell“

In den obigen Arbeiten bildet die Skalenhypothese der Lokalisierung [13] das grundlegende Gerüst der theoretischen Untersuchungen. Jedoch ist die Skalenhypothese in ihrer derzeitigen Form nur für nichtwechselwirkende Elektronen gültig. Der Einfluß von Vielteilchenwechselwirkung auf die elektronischen Eigenschaften ungeordneter System ist ein heute vielseitig studiertes Problem, jedoch sind die Resultate noch nicht von der gleichen überzeugenden Qualität wie im Anderson-Modell nichtwechselwirkender Teilchen [14]. Daß Vielteilchenwechselwirkung jedoch von großem Interesse ist, zeigen neuere Resultate, die konträr zu den Aussagen der Skalentheorie [13] für 2D Elektronensysteme mit hoher Ladungsträgerbeweglichkeit experimentell einen MIÜ selbst bei Magnetfeld $B = 0$ finden [15]. In den untersuchten Systemen ist die charakteristische Coulombenergie wesentlich größer als die Fermienergie, und deshalb geht man zumeist davon aus, daß der beobachtete MIÜ durch die Wechselwirkung induziert wird [15]. Daß dies nicht notwendigerweise im Widerspruch zu allgemeinen Skalenargumenten ist, wurde kürzlich gezeigt [16]. Es gibt aber auch andere Erklärungsversuche, die z.B. die Ähnlichkeit des Überganges zu einem Isolator-Supraleiter-Übergang nutzen [17].

Die einfachste Erweiterung des Anderson-Modelles in Hinblick auf wechselwirkende Systeme ist das Problem *zweier* wechselwirkender Teilchen in potentialenergetischer Unordnung in 1D. Aufbauend auf Arbeiten von Dorokhov [18] hat Shepelyansky [19] argumentiert, daß eine abstoßende, lokale Hubbardwechselwirkung U der zwei in einer zufälligen Potentiallandschaft mit Lokalisierungslänge λ_1 lokalisierten Teilchen bei $E = 0$ zu Zuständen mit stark erhöhter Zwei-Teilchen-Lokalisierungslänge

$$\lambda_2 \sim (U/t)^2 \lambda_1^2 \qquad (2.2)$$

führt. Der wohl überraschendste Aspekt von Gl. (2.2) ist, daß das Verhältnis λ_2/λ_1 im Limes schwacher Unordnung, d.h., $\lambda_1 \to \infty$, divergiert und somit das Teilchen*paar* sich wesentlich weiter bewegen kann als ein einzelnes Teilchen. Dieses Resultat ist natürlich in Hinblick auf die obengenannten experimentellen Befunde eines MIÜ in 2D sehr suggestiv. Es sollte jedoch verglichen werden mit Resultaten für endliche Füllung, welche zeigen, daß der Grundzustand eines solchen ungeordneten Vielteilchensystems stark lokalisiert ist [20]. Desweiteren benutzen die analytischen Argumente Shepelyansky's Vereinfachung wie z.B. Vernachlässigungen der Phasenbeziehungen, die eine numerische Überprüfung nahelegen. Dabei benutzt man, daß das Problem zweier wechselwirkender Teilchen in 1D auf ein 2D Anderson-Modell mit korrelierter Unordnung und zusätzlicher Potentialbarriere abgebildet werden kann [19, 21]. Dieses 2D Problem kann man dann mit den schon erwähnten numerischen Methoden untersuchen. Arbeiten dieser Art ergaben aber untereinander abweichende Resultate und konnten so Gl. (2.2) nicht eindeutig bestätigen [22]. Insbesondere wurden Lokalisierungslängen λ_2 „gemessen", die teilweise deutlich über den verwendeten Systemgrößen lagen und damit natürlich auf ihre Systemgrößenabhängigkeit zu überprüfen waren [21].

Wir haben deshalb mit zwei verschiedenen TMM den Einfluß von Hubbard- und langreichweitiger Wechselwirkung für zwei Teilchen untersucht. Desweiteren haben wir die analytischen Argumente, insbesondere die Vernachlässigung der Phasenkorrelationen durch entsprechende numerische Rechnungen getestet. Unabhängig davon haben wir auch Untersuchungen bei endlicher Füllung durchgeführt.

2.3.4 Teilaufgabe „Topologische Unordnung"

Durch die Untersuchung des Eigenwertspektrums des Anderson-Hamiltonoperators war es möglich, interessante Resultate über die Existenz lokalisierter, multifraktaler und ausgedehnter Zustände zu erhalten [23]. Die Analyse der Fluktuationen des Eigenwertspektrums, wie sie sich aus der Theorie der Zufallsmatrizen ergibt, zeigt, daß in Bereichen des Spektrums, in denen lokalisierte Zustände vorliegen, also für $|E| > E_c$, die Abstandsverteilung der Energieniveaus durch viele kleine Abstände und — nach Entfaltung der Energiespektren — eine Poisson-Verteilung gekennzeichnet ist. Für $|E| < E_c$ ergibt sich jedoch Niveauabstoßung und die Wigner-Dyson-Verteilung des Gauß'schen orthogonalen Ensembles (GOE) [24]. Direkt am MIÜ, wo die Zustände multifraktal sind, ergibt sich eine neue Verteilung, der man einen universellen Charakter zubilligt [25]. Damit ist die ENS also eine weitere Größe, welche die Beschreibung des MIÜ ermöglicht.

Allen bis jetzt genannten Forschungsaufgaben liegt ein regelmäßiges Gitter zugrunde. Um zu verstehen, wie stark diese geordnete Struktur die Ergebnisse beeinflußt, haben wir als Realisierung eines nicht regelmäßigen Systems quasikristalline Gitter untersucht [26, 27]. In den betrachteten Vertex-Modellen sind die Abstände der Gitterplätze konstant, so daß auch die Transferintegrale konstant sind. Es ändert sich allerdings die Zahl der nächsten Nachbarn. In 1D Modellen von Quasikristallen konnte mathematisch exakt gezeigt werden, daß die Eigenzustände multifraktal sind [28]. Dies ist eng verbunden mit der in den quasiperiodischen Systemen vorhandenen Inflations/Deflationssymmetrie und der daraus resultierenden Selbstähnlichkeit der Parkettierungen. Es erscheint deshalb plausibel, daß in höherdimensionalen Quasikristallen, in denen die Selbstähnlichkeit ja auch vorliegt, die Eigenzustände durch Multifraktale beschrieben werden können. Desweiteren könnte man erwarten, daß die Multifraktalität der Zustände auf den quasiperiodischen

Parkettierungen zu einer Verteilung der Energieniveaus führt, die ähnlich wie für die multifraktalen Zustände am MIÜ weder den Poisson- noch den Wigner-Dyson-Vorgaben folgt. In der Tat wurde für die Amman-Beenker-Parkettierung und ihrem periodischen Approximanden über solche abweichenden Verteilungen berichtet [29].

Eine weitere Realisierung einer topologischen Unordnung bedeutet die Untersuchung des Anderson-Modells auf einem fraktalen Gitter. Insbesondere bietet sich damit die Möglichkeit mit geeignet zu wählenden Fraktalen die Lokalisierungseigenschaften von Systemen mit fraktaler Dimension zwischen den euklidischen Dimensionen 2 und 3 zu analysieren. Dies ist besonders interessant, da analytische Argumente im Rahmen der $2+\epsilon$ Entwicklung des nichtlinearen σ-Modelles [30] vorhersagen, daß in allen Systemen mit $\epsilon > 0$ ein MIÜ vorliegt und nicht erst in 3D Systemen, also für $\epsilon = 1$.

2.3.5 Teilaufgabe „Fluktuationen von Wellenfunktionen in komplexen Quantensystemen“

Die Analyse der Fluktuationen des Eigenwertspektrums, die sich aus der Theorie der Zufallsmatrizen ergibt, kann schließlich ausgedehnt werden auf die Untersuchung der Fluktuationen der Wellenfunktionen [31] und die Statistik von allgemeineren Matrixelementen von geeignet gewählten Störungen, beispielsweise des Dipoloperators, mit dem Aussagen über spektroskopische Eigenschaften möglich werden. Es ist zu erwarten, daß die Fluktuationen der Wellenfunktionen im metallischen Bereich des Anderson-Modells auch durch die Porter-Thomas-Rosenzweig-Verteilung gegeben sind [32]. Besonders interessant ist die Untersuchung der Abweichungen von diesem Verhalten für stärkere Unordnung, z.B. in der Nähe des MIÜ. Untersucht werden soll in diesem Zusammenhang, ob der MIÜ in Abhängigkeit von der Energie oder der Unordnung durch eine charakteristische Verteilung der Wellenfunktionen oder der Matrixelemente beschrieben werden kann, in Analogie zu der im Abschnitt 3.4 geschilderten Beschreibung durch ein intermediäres Ensemble für die ENS. Weiterhin soll die Erfahrung bei der semiklassischen Beschreibung derartiger Matrixelemente in einem chaotischen Billardsystem genutzt werden, um die Transporteigenschaften des Systems zu charakterisieren. Um die elektrische Leitfähigkeit zu bestimmen, wird hierbei die Kubo-Greenwood-Formel mit Hilfe einer Spektralfunktion ausgewertet, wodurch sich ein semiklassischer Ausdruck für die elektrische Leitfähigkeit ergibt. Desweiteren werden die semiklassischen Formeln für den Übergang des GOE bei Magnetfeld $B = 0$ zum Gauß'schen unitären Ensemble (GUE) bei $B > 0$ in einem geeigneten Parameterbereich mit den numerischen Daten aus den Anderson-Modell verglichen.

2.3.6 Teilaufgabe „Test und Entwicklung paralleler Algorithmen“

Die Diagonalisierung des Hamiltonoperators für das Anderson-Modell der Lokalisierung kann mit Hilfe des Lanczos-Algorithmus in der Cullum-Willoughby-Implementation (CWI) [3] zur Diagonalisierung dünn besetzter Matrizen sehr effektiv durchgeführt werden. Trotzdem sind die Anforderungen an die Rechner enorm, da z.B. schon für *eine* Realisierung der Unordnung auf einem System der Größe $N^3 = 48^3$ rund 35 Stunden Rechenzeit auf einer HP 735 Workstation benötigt werden und mindestens 10 solcher Realisierungen zur Unterdrückung zu großer statistischer Schwankungen nötig sind. Im Rahmen dieses Projekts soll deshalb geklärt werden, ob sich der Algorithmus sinnvoll parallelisieren läßt. Desweiteren stellt sich die Frage, ob der Lanczos-Algorithmus für das Anderson-Modell die effektivste Methode unter Verwendung massiv paralleler Rechner darstellt, oder ob es andere, besser parallelisierbare Algorithmen gibt. Insbesondere moderne Eigenproblemmethoden [33] basierend auf Konvergenzbeschleunigern, iterativen Gleichungssystemlösern [34] und Präkonditionierern [35] für schwach besetzte Matrizen sind hierfür vielversprechende Kandidaten. Auch für die TMM mußte eine parallele Version entwickelt werden, um für die benötigten Größen der quasi-1D Streifen und Balken eine entsprechende Genauigkeit erzielen zu können.

Literaturverzeichnis

[1] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).

[2] A. MacKinnon, B. Kramer, Z. Phys. B **53**, 1 (1983).

[3] J. Cullum, R. A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations, Volume 1 & Volume 2*, Birkhäuser, Boston (1985).

[4] W. Pook, M. Janssen, Z. Phys. **82**, 295 (1991).

[5] M. Schreiber, H. Grußbach, Mod. Phys. Lett. **B 6**, 851 (1992).

[6] A. G. Rojo, K. Levin, Phys. Rev. **B 48**, 16861 (1993); A. A. Abrikosov, Phys. Rev. **B 50**, 1415 (1994).

[7] Q. Li, C. M. Soukoulis, E. N. Economou, G. S. Grest, Phys. Rev. **B 40**, 2835 (1989); I. Zambetaki, Qiming Li, E. N. Economou, C. M. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. **76**, 3614 (1996); N. A. Panagiotides, S. N. Evangelou, Phys. Rev. **B 49**, 14122 (1994).

[8] F. J. Dyson, Phys. Rev. **92**, 1331 (1953).

[9] H. Hermann, J. Schreiber, phys. stat. sol. **67**, K93 (1975); E. N. Economou, P. D. Antoniou, Solid State Commun. **21**, 285 (1977).

[10] D. C. Licciardello, D. J. Thouless, J. Phys. C **8**, 4157 (1975); **11**, 925 (1978); D. Weaire, V. Srivastava, J. Phys. C **12**, 4309 (1977); J. Stein, U. Krey, Z. Phys. B **37**, 13 (1980); Physica A **106**, 326 (1981).

[11] D. K. K. Lee, J. T. Chalker, Phys. Rev. Lett. **72**, 1510, (1994); T. Kawarabayashi, Phys. Rev. B **51**, 10897 (1995); D. N. Sheng, Z. Y. Weng, Phys. Rev. Lett. **75**, 2388, (1995);

[12] M. Batsch, Doktorarbeit, Universität Hamburg, 1997.

[13] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).

[14] P. A. Lee, T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985); D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **66**, 261 (1994).

[15] S. V. Kravchenko, D. Dimonian, M. P. Sarachik, Phys. Rev. Lett. **77**, 4938 (1996).

[16] V. Dobrosavljević, E. Abrahams, E. Miranda, and S. Chakravarty, Preprint (1997, cond-mat/9704091).

[17] D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, Preprint (1997, cond-mat/9705023).

[18] O. N. Dorokhov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **98**, 646 (1990) [Sov. Phys. JETP **71**, 2 (1990)].

[19] D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **73**, 2607 (1994); —, Proc. Moriond Conf., Jan. 1996, cond-mat/9603086; F. Borgonovi, D. L. Shepelyansky, Nonlinearity **8**, 877 (1995); —, J. Phys. I France **6**, 287 (1996).

[20] T. Giamarchi, H. J. Schulz, Phys. Rev. B **37**, 325 (1988).

[21] K. Frahm, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard, D. Weinmann, Europhys. Lett. **31**, 169 (1995).

[22] Y. Imry, Europhys. Lett. **30**, 405 (1995); Ph. Jacquod, D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **75**, 3501 (1995); D. Weinmann, J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **77**, 1556 (1996); K. Frahm, A. Müller-Groeling, Europhys. Lett. **32**, 385 (1995); K. Frahm, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **76**, 1509 (1996); F. v. Oppen, T. Wettig, J. Müller, Phys. Rev. Lett. **76**, 491 (1996); P. H. Song, D. Kim, Phys. Rev. B **56**, 12217 (1997); D. Weinmann, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard, K. Frahm, Phys. Rev. Lett. **75**, 1598 (1995); I. V. Ponomarev, P. G. Silvestrov, Phys. Rev. B **56**, 3742 (1997); Ph. Jacquod, D. L. Shepelyansky, O. P. Sushkov, Phys. Rev. Lett. **78**, 923 (1997), K. Frahm, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard, D. Weinmann, Phys. Rev. Lett. **78**, 4889 (1997).

[23] H. Kunz, B. Souillard, Commun. Math. Phys. **78**, 201 (1980); J. Fröhlich, J. Martinelli, E. Scopolla, T. Spencer, Commun. Math. Phys. **101**, 21 (1985).

[24] E. Hofstetter, M. Schreiber, Phys. Rev. B **48**, 16979 (1993); **49**, 14726 (1994); Phys. Rev. Lett. **73**, 3137 (1994).

[25] I. K. Zharekeshev, B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **79**, 717 (1997).

[26] T. Rieth, Diplomarbeit, Universität Mainz (1993).

[27] T. Rieth, M. Schreiber, Phys. Rev. B **51**, 15827 (1995).

[28] T. Fujiwara, H. Tsunetsugu, in: *Quasicrystals: The State of the Art*, Hrsg. D. P. DiVincenzo, P. J. Steinhardt, World Scientific, Singapore (1991), S. 343.

[29] V. G. Benza, C. Sire, Phys. Rev. B **44**, 10343 (1991); F. Piéchon, A. Jagannathan, Phys. Rev. B **51**, 179 (1995); J. X. Zhong, H. Q. Yuan, in *Quasicrystals: Proceedings of the 6th Int. Conference*, Hrsg. S. Takeuchi, T. Fujiwara, World Scientific, Singapore (1998).

[30] F. Wegner, Nucl. Phys. B **316**, 663 (1989).

[31] C. E. Porter, R. G. Thomas, Phys. Rev. **104**, 483 (1956); T. A. Brody *et al.*, Rev. Mod. Phys. **53**, 385 (1981);

[32] V. I. Fal'ko, K.B: Efetov, Phys. Rev. B **50**, 11267 (1994).

[33] R. B. Lehoucq, J. A. Scott, *An evaluation of software for computing eigenvalues of sparse nonsymmetric matrices*, Tech. Rep. MCS-P547-1195, Argonne National Laboratory, Argonne, 1996, eingereicht bei ACM Trans. Math. Software.

[34] Y. Saad, *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems: Theory and Algorithms*, Wiley, New York, 1992; G. H. Golub, C. F. v. Loan, *Matrix Computations*, Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, 3rd ed., 1996.

[35] R. Barrett, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. van der Vorst, *Templates for the solution of linear systems*, SIAM Publications, Philadelphia, 1994.

[36] G. Haase, T. Hommel, A. Meyer, M. Pester, *Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen*, SPC 95-20, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, (1995).

[37] C.J. Lambert and D. Weaire, phys. stat. sol. (b) **101**, 591 (1980)

[38] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1993).

[39] J. M. Ottino, *The Kinematics of Mixing: Stretching, Chaos and Transport*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1989).

[40] R. B. Lehoucq, D. Sorensen, C. Yang, ARPACK *users guide: Solution of large scale eigenvalue problems by implicitly restarted Arnoldi methods*, tech. rep., Rice University, Department of Computational and Applied Mathematics, Houston (1996).

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe „Das anisotrope Anderson-Modell der Lokalisierung“

Mitarbeiter: Milde, Römer, Schreiber
Stichworte: Anisotropie, ENS, MFA, TMM, Lanczos, Parallelisierung

Wir haben Eigenzustände des Anderson-Hamiltonoperators für Systemgrößen von $N^3 = 48^3$ Gitterplätzen mit Hilfe der von uns parallelisierten Version der CWI [3] berechnet und auf ihre Multifraktalität untersucht [D96ms, S96, L96mrs, MRS97]. Wir fanden, daß die Eigenzustände des anisotropen Anderson-Modells (siehe Abb. 2.1) auch für starke Anisotropien γ noch multifraktales Verhalten zeigen. Wir bestimmten die kritische Unordnungsstärke W_c von der Systemgrößenabhängigkeit der Singularitätsspektren und konnten zeigen, daß unsere Ergebnisse für $W_c(\gamma)$ gut mit den TMM Resultaten für schwach gekoppelte Ebenen und Ketten übereinstimmen [D97murs]. Wenn wir jedoch W_c durch einen Vergleich mit dem kritischen Singularitätsspektrum, welches am MIÜ des isotropen Systems vorliegt, vergleichen, so finden wir abweichende Resultate. Dies zeigt, daß die multifraktalen Eigenschaften des anisotropen Systems stark von denen des isotropen Systems abweichen. Insbesondere ist also das kritische Singularitätsspektrum am MIÜ nicht universell, sondern hängt sehr wohl von den mikroskopischen Parametern wie der Stärke der t_{ij} ab.

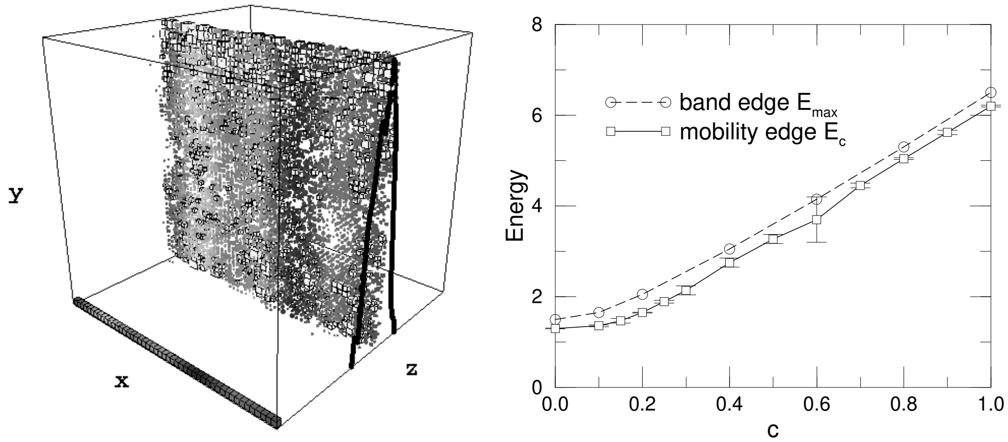

Abbildung 2.1: Wellenfunktionsamplitude $|\psi_i|^2$ in der Nähe des MIÜ für schwachgekoppelte Ebenen mit $\gamma = 0.99$, $N^3 = 48^3$ und $W = 4.5$. An jedem Gitterplatz i zeigen wir einen Würfel mit Volumen $|\psi_i|^2 N$ (links). Variation von Bandkante $E_{\max}$ und Mobilitätskante E_c mit c für zufällige Hüpfelemente $t_{ij} \in [c - 1/2, c + 1/2]$. $E_{\max}$ wurde durch exakte Diagonalisierung berechnet, E_c durch TMM Rechnungen an quasi-1D Balken mit Balkenquerschnitt bis zu 14×14 Gitterplätzen (rechts).

Durch exakte numerische Diagonalisierung mit einem Standardalgorithmus haben wir auch die Zustandsdichten für starke Anisotropien berechnet [MRS97, D97murs]. Wir fanden, daß die Zustandsdichten von schwachgekoppelten Ebenen und Ketten für $\gamma = 0.9$ schon sehr ähnlich zu den Zustandsdichten der ungekoppelten Systeme ($\gamma = 1$), also den 2D Ebenen und 1D Ketten sind. Desweiteren haben wir mit Hilfe der Kubo-Formel die Wechselstromleitfähigkeit des anisotropen Anderson-Modelles berechnet und gezeigt, daß die Leitfähigkeit parallel zu den Ebenen und Ketten wesentlich größer ist als senkrecht zu diesen [MRS97]. Obwohl wir hier nur kleine Systemgrößen ($N^3 = 12^3$) erreichen, konnten wir zeigen, daß die Richtungsabhängigkeit der Leitfähigkeit ein Effekt der unordnungsinduzierten Lokalisierung ist.

In derzeit laufenden Arbeiten untersuchen wir den MIÜ in diesem Modell mit Hilfe der ENS und der TMM. Erste Resultate zeigen, daß auch hier das kritische Ensemble am MIÜ des isotropen Systems den MIÜ im anisotropen System nicht mehr richtig beschreibt [A98murs, W98mrs, D98mrs] und W_c zumindest für $\gamma > 0.9$ von der Richtung der Anisotropie abhängt [D97murs, A98murs].

2.4.2 Teilaufgabe „Das Anderson-Modell mit zufälligem Hüpfen“

Mitarbeiter: Cain, Eilmes (Kraków), Römer, Schreiber, Villagonzalo, Zekri (Oran)
Stichworte: topologische Unordnung, MFA, TMM, exakte Diagonalisie-

rung

Wir haben das 2D Anderson-Modell mit zufälligen Transferintegralen mit der MFA [D96se] und der TMM [KS96, D97ers, H97ers, ERS98a, ERS98b] untersucht. Eine Betrachtung der Zustände und ihrer Fouriertransformierten zeigte, daß die Unterschiede zum normalen Fall der potentialenergetischen Unordnung nicht allzu groß sein können. Wir berechneten die Zustandsdichte und zeigten, daß die Dyson-Singularität bei $E = 0$ auch für das 2D System vorliegt. Die Partizipationszahl $P_N(j)$ ist ein Maß für die Anzahl der zu einem Zustand ψ_j beitragenden Gitterplätze und stellt somit eine weitere numerische Meßgröße der Lokalisierung dar [ERS98a]. Für ein festes N deuteten die P_N des Zustandes bei $E = 0$ auf eine stärkere Lokalisierung hin. Jedoch ergab eine Analyse der Singularitätsstärken (Lipshitz-Hölder-Exponenten) bei gleichem N genau die gegenteilige Aussage. Wir betrachteten darum die Systemgrößenabhängigkeit der P_N und konnten zeigen, daß in der Tat die Zustände bei $E = 0$ die stärkste N-Abhängigkeit zeigen und somit weniger lokalisiert sein müssen. Zum genauen Studium der Natur der Zustände bei $E = 0$ haben wir dann die Lokalisierungslängen mit Hilfe der TMM berechnet. Es zeigt sich, daß die Zustände bei $E = 0$ Lokalisierungslängen haben, die, ähnlich wie am MIÜ im 3D Anderson-Modell mit potentialenergetischer Unordnung, kritisches Verhalten zeigen. Jedoch zerstört schon eine sehr kleine zusätzliche potentialenergetische Unordnung diesen kritischen Zustand, so daß er wohl für Systeme, für die das Anderson-Modell mit Zufallshüpfen ein vernünftiges Modell ist, keine Rolle spielen wird.

Mittlerweile haben wir unter Verwendung der SHK-Stelle und seit kurzem im Rahmen einer laufenden Diplomarbeit die Untersuchungen auf die 3D Version dieses Modelles ausgedehnt [D98crs]. Wie im 2D Modell gelernt, ist die Wirkung der Hüpfunordnung schwächer als eine vergleichbare Potentialunordnung. Wir finden deshalb in 3D, wie in Abb. 2.1 gezeigt, keine Hüpfunordnung, die stark genug wäre, *alle* Zustände zu lokalisieren. Jedoch beobachten wir wie im gewöhnlichen Fall Mobilitätskanten und können so einen MIÜ als Funktion der Energie betrachten.

2.4.3 Teilaufgabe „Einfluß von Wechselwirkung auf lokalisierte Zustände“

Mitarbeiter: Römer, Schreiber, Vojta (C2), Punnoose (Bangalore)
Stichworte: Wechselwirkung, Dezimationsmethode, TMM, Parallelisierung

Mit Hilfe der Abbildung des Problems zweier wechselwirkender Teilchen in einem 1D Unordnungspotential auf ein Problem eines nichtwechselwirkenden Teilchens in 2D mit korrelierter Unordnung und einem zusätzlichen Potential entlang der Diagonale kann die TMM eingesetzt werden, um die Lokalisierungseigenschaften der zwei Teilchen zu studieren [19, 21]. Wir zeigten, daß die von uns entwickelte TMM [L96rs, RS97b, D97rs, RS97a] für Hubbard-Wechselwirkung $U = 1$ die Resultate aus [21] reproduziert und $\lambda_2(U = 1)$ durch Gl. (2.2) gut beschrieben werden kann. Jedoch ist dasselbe für $\lambda_2(0)$ der Fall. Betrachtet man dann richtigerweise zur Ermittelung der Änderung der Lokalisierungslänge durch Wechselwirkung das Verhältnis $\lambda_2(1)/\lambda_2(0)$, so erhält man in einem endlichen System kaum eine

Erhöhung. Desweiteren fanden wir, daß (a) die Erhöhung λ_2/λ_1 mit steigender Systemgröße M abnimmt, daß (b) $\lambda_2(0)$ nur für $M \to \infty$ gleich λ_1 ist, und daß (c) die Erhöhung λ_2/λ_1 in diesem Grenzfall verschwindet. Wir schließen daraus, daß diese TMM eine Erhöhung der Lokalisierungslängen mißt, die im wesentlichen durch die Endlichkeit der Systeme bedingt ist. Eine Rechnung mit langreichweitiger Wechselwirkung ergibt entsprechende Resultate [L96rs, RS97b, D97egrs, D97rs]. Wichtig für die Ermittlung des korrekten Verhaltens für $M \to \infty$ war das Erreichen großer Systeme. Dafür haben wir unsere TMM Programme parallelisiert und konnten so Resultate bis zu $M = 360$ erhalten, wie in Abb. 2.2 gezeigt.

In einer anderen Untersuchung zeigen wir, daß auch eine TMM, die den Transfer entlang der Diagonalen des 2D Problems beschreibt und die Symmetrie der Wellenfunktion berücksichtigen kann, ganz ähnliche Probleme aufweist [M97rs, H97rs, RS98a]. Insbesondere ist $\lambda_2(0)$ wieder wesentlich größer als λ_1. Diesmal kann λ_1 jedoch nicht als Grenzwert im Falle großer Systeme erhalten werden, da die Einschränkung der TMM entlang der Diagonalen eine zusätzliche unendlich große Anziehung der Teilchen aufgrund der endlichen maximal möglichen Teilchenseparation bedingt. Wieder ist auch im Falle einer langreichweitigen Wechselwirkung kein wesentlicher Unterschied in den Resultaten zu erkennen.

Wie oben erwähnt benutzen die analytischen Argumente, die eine Erhöhung der Lokalisierungslänge durch Wechselwirkung erkennen lassen, einige Vereinfachungen. Insbesondere werden Annahmen über die lokalisierten Wellenfunktionen ψ_i gemacht, in denen die Phasenbeziehungen vernachlässigt werden. Wichtig wird dies (A) bei der Abschätzung der typischen Größe der Wechselwirkungsmatrixelemente zu $u = \langle \psi_i \psi_j | U | \psi_k \psi_l \rangle \propto U \lambda_1^{-3/2}$ und (B) dem Aufbau des effektiven Paar-Hamiltonoperators als Zufallsbandmatrix. Wir haben deshalb die Matrixelemente u numerisch berechnet und können in Zusammenarbeit mit T. Vojta (C2) zeigen, daß (a) die Vernachlässigung der Phasenkorrelationen zu einer anderen Verteilung der Matrixelemente führt, (b) die typischen Matrixelemente wie in Abb. 2.2 gezeigt mit $U\lambda_1^{-2}$ abfallen und deshalb (c) die Erhöhung von λ_2 nach Abbildung auf das effektive Zufallsbandmatrixmodell verschwindet [VRS97, G97rs, A98rs, W98rsv, D98rs].

Zur Überprüfung der Verläßlichkeit der Näherung (B) haben wir desweiteren zwei Gegenbeispiele konstruiert [VRS97, W98rsv], in denen Annahme (A) gerechtfertig ist, wie wir numerisch zeigen. Jedoch ergibt sich nach Anwendung von (B) wieder eine Erhöhung der Lokalisierungslänge, obwohl dies physikalisch falsch ist. Diese Argumente schließen aber natürlich die Existenz einer Erhöhung der Lokalisierungslänge durch Wechselwirkung nicht aus, obwohl diese dann eine andere funktionale Abhängigkeit als in Gl. (2.2) haben sollte.

Zusammen mit Mark Leadbeater (MPI Dresden) rechnen wir z.Z. mit Hilfe der Dezimations-Methode [37] die Greenfunktion entlang der Diagonalen aus und können dann durch Finite-Size-Scaling eine Lokalisierungslänge ξ_2 für den Limes $M \to \infty$ angeben. Unsere derzeitigen Resultate zeigen [D98lrs], daß

$$\xi_2 \sim \lambda_1/2 + c\lambda_1^{\alpha(U)} \tag{2.3}$$

mit einem Exponenten $\alpha(U)$, der zwischen $\alpha(0) = 1$ und $\alpha(1) = 1.8$ variiert. Insbesondere ist nun wie erwartet $\xi_2(0) \approx \lambda_1/2$, was die numerische Stabilität der Dezimationsmethode zeigt.

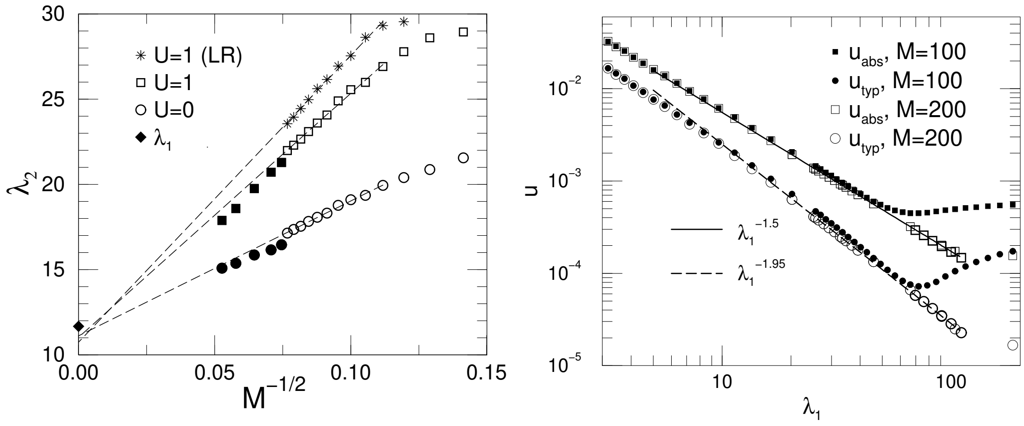

Abbildung 2.2: Systemgrößenabhängigkeit von λ_2 für die TMM aus [RS97b], die gefüllten Symbole wurden mit der parallelisierten TMM berechnet (links). λ_1-Abhängigkeit des typischen $u_{\rm typ}$ und des mittleren Matrixelements $u_{\rm abs}$ (rechts).

Schließlich haben wir in Zusammenarbeit mit R.V. Pai (Goa University) und A. Punnoose (IISc Bangalore) den Einfluß von Anderson-Unordnung auf die Mott-Lücke im Ladungssektor des halbgefüllten 1D Hubbard-Modelles [D96rp] mit Hilfe der numerischen Dichtematrixrenormierungsgruppenmethode (DMRG) untersucht [38] und können zeigen, daß das Schließen der Lücke bei $W_c \approx U/2$ erfolgt [D97ppr, PPR97]. Außerdem zeigten wir in Zusammenarbeit mit H.-P. Eckle und A. Punnoose, daß die adiabatischen Transporteigenschaften Bethe-Ansatz-lösbarer Quantenvielteilchensysteme mit integrablen Verunreinigungen in 1D durch das vollständige Verschwinden der Rückstreuung an den Störstellen bestimmt werden [EPR97]. Diese Modelle können deshalb nur in Ausnahmefällen Erklärungen von Transportmessugen liefern [D96epr] und beschreiben nicht den generischen Fall ohmschen Transports.

2.4.4 Teilaufgabe „Topologische Unordnung“

Mitarbeiter: Milde, Rieth, Römer, Schreiber, Schlottmann (Tübingen), Zhong (Xiangtan)

Stichworte: topologische Unordnung, ENS, MFA, Lanczos

Wir haben die Existenz von lokalisierten und multifraktalen Zuständen auf 2D und 3D Vertexmodellen von Quasikristallen mit Hilfe des Anderson-Hamiltonoperators untersucht. Hierbei zeigten wir, daß die sogenannten „Confined States“ eine Eigenschaft der lokalen Topologie und damit des quasikristallinen Trägers sind [RS97, RGS98]. Im Gegensatz zu lokalisierten Zuständen im Anderson-Modell mit energetischer Unordnung befinden sich die „Confined States“ nicht an der Bandkante sondern in der Bandmitte [RS98].

Desweiteren haben wir die ENS des Anderson-Modells auf quasiperiodischen Approximanden der Ammann-Beenker-Parkettierung durch exakte Diagonalisierung berechnet [ZGRS98, D98zgrs]. Wir konnten zeigen, daß die ENS zu denen des

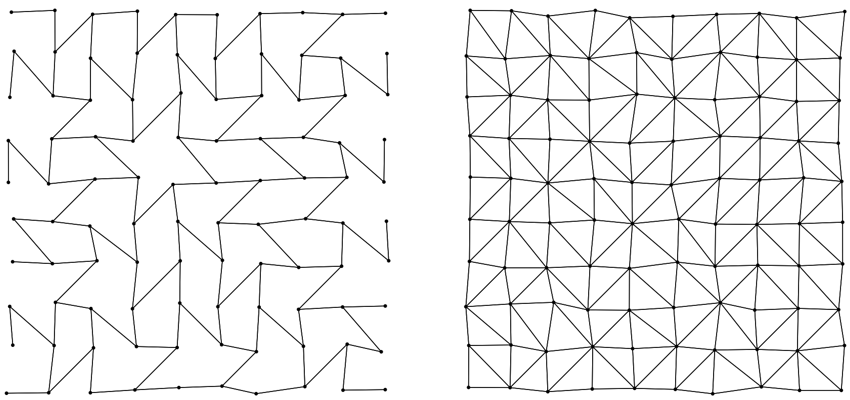

Abbildung 2.3: Zufallsmosaik und -triangulation mit 10×10 Gitterplätzen.

GOE der Theorie der Zufallsmatrizen gehören, obwohl die Hamiltonoperatoren vollständig deterministisch sind. Indem wir die Symmetrien des quasiperiodischen Modelles richtig berücksichtigt haben, konnten wir die unterschiedlichen Aussagen früherer Arbeiten korrigieren [29]. Insbesondere konnten wir zeigen, daß die Energieverteilungen nicht der kritischen Verteilung am MIÜ des 3D Anderson-Modelles entsprechen. Die Genauigkeit unserer Daten ist so groß, daß wir sogar den Unterschied zwischen der exakten Formel des GOE und der für die meisten numerischen Arbeiten herangezogenen sehr guten Wigner-Näherung auflösen können.

Mit Hilfe von Bifraktalen, die in der Grundebene entweder auf zufälligen Clustern, entstanden in einem diffusionsbegrenzten Anlagerungsprozeß, oder exakten Fraktalen, wie z.B. dem Sierpinski-Dreieck, aufbauen und entlang der dritten Dimension regelmäßig wiederholt werden, realisierten wir ungeordnete Systeme mit fraktalen Dimensionen zwischen 2 und 3, und ermittelten damit die fraktale Grenzdimension für die Existenz beziehungsweise Nichtexistenz des MIÜ [SG96a, SG96b, L96sg, S96sg]. Aufgrund der Regelmäßigkeit in der dritten Dimension ließ sich die TMM problemlos anwenden. Wir konnten zeigen, daß alle Systeme mit Dimension $D = 2+\epsilon > 2$ einen MIÜ zeigen in Übereinstimmung mit [30]. Mit Hilfe des Finite-Size-Scaling bestimmten wir den kritischen Exponenten ν. Wir fanden, daß ν für kleine ϵ durch die Vorhersagen des nichtlinearen σ-Modelles korrekt beschrieben wird [SG96a].

Um den Einfluß der topologischen Unordnung noch weiter zu untersuchen, berechnen wir in einer Zusammenarbeit mit G. Schliecker (MPI Dresden) die ENS von einem Anderson-Modell definiert auf einem Zufallsgitter wie z.B. in Abb. 2.3 dargestellt. Erste Resultate bezüglich der ENS zeigen Niveauabstoßung.

2.4.5 Teilaufgabe „Fluktuationen von Wellenfunktionen in komplexen Quantensystemen“

Mitarbeiter: Milde, Mehlig (MPI Dresden), Müller, Schreiber, Uski

Stichworte: Magnetfelder, Wellenfunktionsstatisik, MFA, Lanczos

Hier haben wir die Verteilung von Wellenfunktionsamplituden im 2D Anderson-Modell und im Wasserstoffatom in einem starken Magnetfeld betrachtet [D96m^{3}s^2, L96m^{3}s, D97m^{3}s, MMMS97]. Das letztere Modell ist im klassischen Grenzfall chaotisch. Für genügend schwache Unordnung, oder genügend starkes klassisches Chaos, finden wir ausgedehnte Zustände, welche eine Porter-Thomas-Verteilung der Wellenfunktionsintensitäten zeigen. Lokalisierung durch Unordnung oder durch stabile Regionen im klassischen Phasenraum ergibt Abweichungen vom universellen Verhalten [MM98, MME98]. Für das 2D Anderson-Modell finden wir in der Nähe des Delokalisierungs/Lokalisierungsüberganges eine Log-Normal-Verteilung der Wellenfunktionsintensitäten.

Um den Einfluß eines Magnetfelds auf die Charakteristika des Anderson-Modells besser zu verstehen und den Zusammenhang mit dem Übergang GOE nach GUE herauszuarbeiten, betrachten wir z.Z. im Rahmen einer Doktorarbeit verschiedene Korrelationsfunktionen der Energien als auch der Matrixelemente als Funktion der Stärke eines äußeren Flusses im 2D Anderson-Modell [A98umrs, W98umrs, D98umrs]. Die so numerisch durch den Lanczos-Algorithmus erhaltenen Daten werden dann mit Vorhersagen einer von uns erarbeiteten semiklassischen Theorie und numerischen Resultaten für die Quantenversion der klassisch chaotischen Bäcker-Transformation [39] verglichen.

2.4.6 Teilaufgabe „Test und Entwicklung paralleler Algorithmen“

Mitarbeiter: Elsner (A4), Mehrmann (A4), Milde, Römer, Schreiber
Stichworte: Lanczos, TMM, Parallelisierung

Wir haben in einer Vergleichsstudie verschiedenste moderne Eigenproblemlöser mit der 1985er CWI des Lanczos-Algorithmus im Hinblick auf ihre Anwendbarkeit für das Anderson-Modell getestet [EMMRS97]. Wir haben uns dabei auf das für die MFA wichtige Problem der Ermittelung einiger weniger Eigenzustände in der Bandmitte beschränkt. Das Anderson-Modell ist in Matrixdarstellung eine große, schwach besetzte, reelle, symmetrische und indefinite Matrix. Zielstellung des Vergleichs war es, eine Methode zu finden, die in der Rechenzeit wesentlich schneller sein sollte als die CWI, jedoch gleichzeitig nur wenig mehr Speicherplatz verbrauchen durfte. Als geeigneter Kandidat erschien uns dabei die implizitwiederstartende Arnoldi-Methode. Weitere Verbesserungen waren polynomiale Konvergenzbeschleuniger und die Verwendung von shift-and-invert Techniken. Desweiteren haben wir noch eine hybride Tridiagonalisierungs-Methode betrachtet. Wir finden jedoch, daß bis auf eine Ausnahme keine der neueren Methoden schneller ist als die CWI. Dieser eine Algorithmus benötigt aber 2.6 GByte Speicher für Systemgrößen, bei denen die CWI nur 27 MByte braucht und ist somit auch nicht praktikabel [EMMRS97]. Natürlich haben wir uns in der Auswahl der zu vergleichenden Algorithmen zumeist auf solche beschränkt, die sich leicht parallelisieren lassen sollten. Da jedoch schon die seriellen Versionen so wesentlich schlechter abschneiden, erscheint ein Vergleich der parallelen Versionen z.Z. nicht sehr vielversprechend.

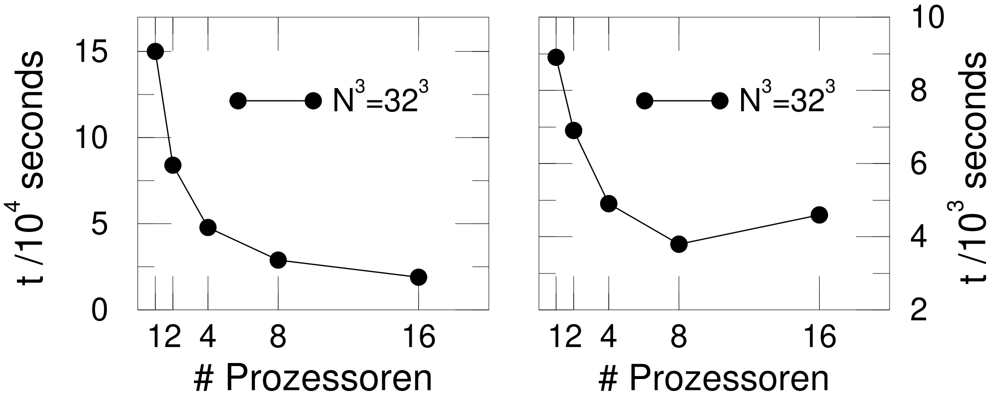

Abbildung 2.4: Rechenzeiten der von uns parallelisierten CWI auf dem GCC 128 bei der Berechnung aller Eigenwerte (linkes Bild) und der Berechnung von 4 Eigenvektoren bei $E = 0$ (rechtes Bild).

Wie schon zu Beginn dieses Abschnitts erwähnt, haben wir die CWI mit den uns vorliegenden Bibliotheken paralleler Routinen für den GCC 128 [36] parallelisiert. Dabei wurde besonderes Augenmerk auf die Skalierbarkeit des resultierenden Programmes gelegt. Für Systeme der Größe $N^3 = 48^3$ konnten wir so die Rechenzeiten von 35 Stunden auf unseren HP Workstationen auf nur 11 Stunden auf dem GCC 128 senken. Die Veröffentlichung [MRS97] wäre ohne diese parallele Version nicht in der nötigen Genauigkeit durchzuführen gewesen und auch die derzeit laufenden Arbeiten wie in den obigen Kapiteln angerissen, nutzen diese parallele CWI intensiv. Derzeit arbeiten wir zusammen mit A. Meyer (A3) und V. Mehrmann (A4) an einer ersten Implementation eines Mehrgitterverfahren für das Anderson-Modell. Für andere Matrizen als den Anderson-Hamiltonoperator benutzen wir und auch T. Vojta (C2) einige der in [EMMRS97] angesprochenen parallelen Algorithmen, insbesondere PArPack [40]. Schließlich haben wir eine parallele Version der TMM für den GCC 128 progammiert, die in der Veröffentlichung [RS97b] eingesetzt wurde und zur Zeit für das 3D Anderson-Modell mit zufälligem Hüpfen adaptiert wird (siehe Kapitel 2.4.2).

Literatur zu 2.4/(eigene Veröffentlichungen im Berichtszeitraum)

Referierte Publikationen

[EPR97] H.-P. Eckle, A. Punnoose, R.A. Römer, *Absence of backscattering at integrable impurities in one-dimensional quantum many-body systems*, Europhys. Lett. **39**, 293 (1997).

[ERS98a] A. Eilmes, R.A. Römer, M. Schreiber, *Critical behavior in the two-dimensional Anderson model of localization with random hopping*, phys. stat. sol. (b) **205**, 229 (1998).

[ERS98b] A. Eilmes, R.A. Römer, M. Schreiber, *The two-dimensional Anderson model of localization with random hopping*, Eur. Phys. J. B **1**, 29 (1998).

[KS96] B. Kramer, M. Schreiber, *Transfer Matrix Methods and Finite Size Scaling for Disordered Systems*, in *Computational Physics: Selected Methods - Simple Exercises - Serious Applications*, Hrsg. K.H. Hoffmann, M. Schreiber, Springer, Berlin, Heidelberg (1996).

[MMMS97] K. Müller, B. Mehlig, F. Milde, M. Schreiber, *Statistics of Wave Functions in Disordered and in Classically Chaotic Systems*, Phys. Rev. Lett. **78**, 215 (1997).

[MRS97] F. Milde, R.A. Römer, M. Schreiber, *Multifractal analysis of the metal-insulator transition in anisotropic systems*, Phys. Rev. B **55**, 9463 (1997).

[RS97] T. Rieth, M. Schreiber, *The Anderson Transition in Three-dimensional Quasiperiodic Lattices: Finite-Size Scaling and Critical Exponent*, Z. Phys. B **104**, 99 (1997).

[RS97a] R.A. Römer, M. Schreiber, *No enhancement of the localization length for two interacting particles in a random potential*, Phys. Rev. Lett. **78**, 515 (1997).

[RS97b] R.A. Römer, M. Schreiber, *The enhancement of the localization length for two-interacting particles is vanishingly small in transfer-matrix calculations* (Reply), Phys. Rev. Lett. **78**, 4890 (1997).

[RS98] T. Rieth, M. Schreiber, *Numerical investigation of electronic wave functions in quasiperiodic lattices*, J. Phys. Cond. Matter **10**, 783 (1998).

[RS98a] R.A. Römer, M. Schreiber, *Weak delocalization due to long-range interaction for two electrons in a random potential chain*, phys. stat. sol. (b) **205**, 275 (1998).

[RGS98] T. Rieth, U. Grimm, M. Schreiber *Localization of electronic wave functions on quasiperiodic lattices*, in *Quasicrystals*, Hrsg: S. Takeuchi, T. Fujiwara, World Scientific, Singapore (1998).

[S96] M. Schreiber, *Multifractal Characteristics of Electronic Wave Functions in Disordered Systems*, in *Computational Physics: Selected Methods - Simple Exercises - Serious Applications*, Hrsg. K.H. Hoffmann, M. Schreiber, Springer, Berlin, Heidelberg (1996).

[SG96a] M. Schreiber, H. Grussbach, *Dimensionality Dependence of the Metal-Insulator Transition in the Anderson Model of Localization*, Phys. Rev. Lett. **76**, 1687 (1996).

[SG96b] M. Schreiber, H. Grussbach, *The Metal-Insulator Transition in the Anderson Model of Localization on Fractal Lattices*, in *Physics of Semiconductors*, Hrsg. M. Scheffler, R. Zimmermann, World Scientific, Singapore (1996).

[ZSQBB96] N. Zekri, M. Schreiber, R. Quasti, R. Bouamrane, A. Brezini, *Nature of the Electronic States in a Chain of Potential Wells in Presence of an Electric Field*, Z. Phys. B **99**, 381 (1996).

Eingereichte Manuskripte

[EMMRS97] U. Elsner, V. Mehrmann, F. Milde, R.A. Römer, M. Schreiber, *The Anderson model of localization: a challenge for modern eigenvalue methods*, SFB 97-31, eingereicht bei SIAM, J. Sci. Comp, (1997).

[MM98] B. Mehlig, K. Müller, *Non-universal properties of a complex quantum spectrum*, SFB 98-03, eingereicht bei Phys. Rev. B, (1998).

[MME98] K. Müller, B. Mehlig, B. Eckhardt, *Phase space localization and matrix element distributions in systems with mixed classical phase space*, SFB 98-04, eingereicht bei Phys. Rev. Lett., (1998).

[PPR97] R. Pai, A. Punnoose, R.A. Römer, *The Mott-Anderson transition in the disordered one-dimensional Hubbard model*, SFB 97-12, eingereicht bei Phys. Rev. Lett., (1997).

[VRS97] T. Vojta, R.A. Römer, M. Schreiber, *Two-interacting particles in a random potential: The random matrix model revisited*, SFB 98-02, eingereicht bei Phys. Rev. B, (1997).

[ZGRS98] J. X. Zhong, U. Grimm, R.A. Römer, M. Schreiber, *Level Spacings Distributions of Planar Quasiperiodic Tight-Binding Models*, SFB 97-21, im Druck bei Phys. Rev. Lett., (1998).

Konferenzbeiträge

[A98murs] F. Milde, V. Uski, R.A. Römer, M. Schreiber, *Metall-Isolator-Übergang im anisotropen Anderson-Modell der Lokalisierung*, Alexander von Humboldt Seminarkolleg, Kurort Gohrisch, Januar 1998.

[A98rs] R.A. Römer, M. Schreiber, *Two interacting particles in a one-dimensional random potential: delocalization due to interaction?*, ibid.

[A98umrs] V. Uski, B. Mehlig, R.A. Römer, M. Schreiber, *Universal parametric correlations in complex quantum systems*, ibid.

[D96epr] H.-P. Eckle, A. Punnoose, R.A. Römer, *Adiabatische Transporteigenschaften exakt lösbarer eindimensionaler Quanten-Vielteilchensysteme mit Verunreinigungen*, DY 9.6, DPG-Tagung, Regensburg, März 1996.

[D96se] M. Schreiber, A. Eilmes, *Fractal eigenstates of the Anderson Hamiltonian with off-diagonal disorder*, CP 14.81, ibid.

[D96ms] F. Milde, M. Schreiber, *Multifraktalanalyse von Eigenfunktionen des Anderson-Modells der Lokalisierung mit anisotroper Wechselwirkung bzw. räumlicher Unordnung*, DY 5.32, ibid.

[D96m^{3}s^2] K. Müller, B. Mehlig, F. Milde, M. Schreiber, G. Somesfalean *Wavefunction statistics in disordered and classical chaotic systems*, DY 21.22, ibid.

[D96rp] R.A. Römer, A. Punnoose, *Enhanced Charge and Spin Currents in the One-Dimensional Disordered Mesoscopic Hubbard Ring*, TT 19.12, ibid.

[D97egrs] A. Eilmes, U. Grimm, R.A. Römer, M. Schreiber, *Zwei wechselwirkende Teilchen am Metall-Isolator-Übergang*, TT 14.61, DPG-Tagung, Münster, März 1997.

[D97ers] A. Eilmes, R.A. Römer, M. Schreiber, *Das Anderson-Unordnungsmodell mit nicht-diagonalem Hüpfen*, TT 14.55, ibid.

[D97m^{3}s] K. Müller, B. Mehlig, F. Milde, M. Schreiber*Statistics of wave functions in disordered and classical chaotic systems*, TT 14.59, ibid.

[D97murs] F. Milde, V. Uski, R.A. Römer, M. Schreiber, *Metall-Isolator-Übergang im Anderson-Modell der Lokalisierung mit anisotroper Wechselwirkung*, DY 19.66, ibid.

[D97ppr] A. Punnoose, R.V. Pai, R.A. Römer, *Das ungeordnete eindimensionale Hubbard-Modell bei halber Füllung*, TT 14.4, ibid.

[D97rs] R.A. Römer, M. Schreiber, *No enhancement of the localization length for two interacting particles in a random potential*, TT 10.10, ibid.

[D98crs] P. Cain, R.A. Römer, M. Schreiber, *Das dreidimensionale Anderson-Unordnungsmodell mit zufälligem Hüpfen*, TT 21.23, DPG-Tagung in Regensburg, März 1998.

[D98lrs] M. Leadbeater, R.A. Römer, M. Schreiber, *Interaction-dependent enhancement of the localization length for two-interacting particles in a one-dimensional random potential*, SYD 3.3, ibid.

[D98mrs] F. Milde, R.A. Römer, M. Schreiber, *Eigenwertstatistik im Anderson-Modell der Lokalisierung mit anisotropen Hüpfelementen*, DY 53.7, ibid.

[D98rs] R.A. Römer, M. Schreiber, *Zwei wechselwirkende Teilchen in einem eindimensionalen Zufallspotential: Delokalisierung durch Wechselwirkung?*, SYD 2.1, ibid.

[D98umrs] V. Uski, B. Mehlig, R.A. Römer, M. Schreiber, *Universal parametric correlations in complex quantum systems*, DY 18.35, ibid.

[D98zgrs] J.X. Zhong, U. Grimm, R.A. Römer, M. Schreiber, *Level-Spacing Distributions of Planar Quasi-periodic Tight-Binding Models*, DY 18.31, ibid.

[G97rs] R.A. Römer, M. Schreiber, *Zwei Teilchen in einem Zufallspotential: Delokalisierung durch Wechselwirkung?*, Seminar des Graduiertenkollegs „Dünne Schichten und nichtkristalline Materialien", Hohenstein-Ernstthal, November 1997.

[G97s] M. Schreiber, *Statistische Analyse von Wellenfunktionen und Zustandsdichten in ungeordneten Materialien*, ibid.

[H97ers] A. Eilmes, R.A. Römer, M. Schreiber, *The 2D Anderson model of disorder with random hopping*, Int. Conf. *Hopping and related phenomena*, Rackeve, Ungarn, August 1997.

[H97rs] R.A. Römer, M. Schreiber, *Weak delocalization due to long-range interaction for two electrons in a random potential chain*, ibid.

[L96m^{3}s] K. Müller, B. Mehlig, F. Milde, M. Schreiber, *Distribution of wavefunction amplitudes in disordered and classically chaotic systems*, MoP25, Int. Conf. *Localization '96*, Jaszowiec, Poland, August 1997.

[L96mrs] F. Milde, R.A. Römer, M. Schreiber, *Multifractal analysis of eigenfunctions of the Anderson model with anisotropic hopping*, SuP26, ibid.

[L96rs] R.A. Römer, M. Schreiber, *Transfer matrix method for two interacting particles in a random potential*, SuP25, ibid.

[L96sg] M. Schreiber, H. Grussbach, *Dimensionality dependence of the critical behavior in the Anderson model of localization*, MoO10, ibid.

[M97rs] R.A. Römer, M. Schreiber, *Two interacting particles in a 1-D random potential: delocalization due to interaction ?*, Int. Symposium *From Correlated Electrons to the Quantum Mechanics of Complex Systems*, MPI PKS Dresden, Juni 1997.

[S96sg] M. Schreiber, H. Grussbach, *The Metal-Insulator Transition in the Anderson Model of Localization in Fractal Lattices*, Int. Conf. *Physics of Semiconductors* (ICPS 23), Berlin, Juli 1996.

[W96rs] R.A. Römer, M. Schreiber, *Enhanced Charge and Spin Currents in the One-Dimensional Disordered Mesoscopic Hubbard Ring*, 9th Int. Winterschool on New Developments in Solid State Physics *Nanostructure Physics and Technology*, Mauterndorf, Österreich, Februar 1996.

[W98mrs] F. Milde, R.A. Römer, M. Schreiber, *Energy level statistics at the metal-insulator transition in the Anderson model of localization with anisotropic hopping*, III/56, 10th Int. Winterschool on New Developments in Solid State Physics *New Frontiers in Low-Dimensional Physics*, Mauterndorf, Österreich, Februar 1998.

[W98rsv] R.A. Römer, M. Schreiber, T. Vojta, *Two interacting particles in a random potential: delocalization due to interaction?*, III/60, ibid.

[W98umrs] V. Uski, B. Mehlig, R.A. Römer, M. Schreiber, *Universal parametric correlations in complex quantum systems*, III/63, ibid.

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Die Anzahl der offenen physikalischen Fragestellungen ist groß. Wie schon oben angerissen, untersuchen wir z.Z. das anisotrope Anderson-Modell mit Hilfe der ENS. Erste Resultate zeigen, daß vielleicht doch eine Richtungsabhängigkeit von W_c vorliegt, was im Widerspruch zu publizierten TMM-Rechnungen wäre, oder auf unerwartete Probleme mit dem statistischen Zugang hindeuten würde. Der Einfluß einer topologischen Unordnung, sei sie durch Variation der Hüpfelemente, durch quasiperiodische, fraktale oder zufällige Anordnung der Gitterplätze erzeugt, ist noch sehr unvollständig verstanden und insbesondere in 3D noch nicht ernsthaft untersucht worden. Über den Einfluß von Wechselwirkung auf die elektronischen

Eigenschaften ungeordneter Systeme wird in Hinblick auf die genannten experimentellen und theoretischen Resultate noch viel diskutiert. Eine fundierte Numerik hat hier viele Möglichkeiten der Überprüfung der vorgestellten Theorien insbesondere in Hinblick auf höhere Dimensionen. Der Vergleich mit der Theorie der Zufallsmatrizen und den semiklassischen Analoga hat sich als sehr fruchtbar erwiesen. Auch hier kann die Numerik sehr schön Gültigkeitsbereiche der Theorien aufdecken.

In all diesen Gebieten muß zumindestens ein Parameter mehr variiert werden als im „normalen“ Anderson-Modell üblich, sei es die Stärke der Anisotropie, der Wechselwirkung, des Magnetfeldes, usw.. Deshalb werfen alle physikalischen Fragestellungen — insbesondere in 3D — gleichzeitig die Frage nach leistungsfähigeren numerischen Algorithmen auf. Ein Schwerpunkt der weiteren Arbeit wird es also sein, die parallelen Versionen unserer Eigenwertlöser und der TMM, z.B. in Hinblick auf Mehrgitterverfahren, weiter zu verbessern und andere Algorithmen wie z.B. die Dezimations-Methode, die DMRG oder die hier noch nicht erwähnte rekursive Green-Funktionsmethode [2] auf ihre Parallelisierbarkeit hin zu testen.