

Teilprojekt

C1

Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen
Materialien

2.1 Teilprojekt C1

Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen Materialien

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Michael Schreiber	PD Dr. Rudolf A. Römer
22.04.1954	22.02.1966
Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme)	Professur Theoretische Physik III (Theorie ungeordneter Systeme)
Technische Universität Chemnitz	Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz	09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-3142	Tel.: (0371) 531-3146
Fax: (0371) 531-3143	Fax: (0371) 531-3151
schreiber@physik.tu-chemnitz.de	r.roemer@physik.tu-chemnitz.de

Dr. Römer ist Ende September 2002 ausgeschieden, da er eine unbefristete Stelle als Lecturer an der Universität Warwick angenommen hat.

Prof. Schreiber war von Februar 2002 bis Januar 2003 beurlaubt, um eine Professur an der International University Bremen wahrzunehmen.

2.1.2 Projektbearbeiter

Philipp Cain
Dr. Viktor Cerovski
Alexander Croy
Rajkumar Brojen Singh
Sambasiva Rao Chinnamsetty
Dr. Inna Plyuchshay
Dr. Ahmed Jellal
M.Sc. Macleans Ndawana
Dr. Hassan Satori

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Gegenstand dieses Teilprojektes ist die computergestützte Untersuchung des durch Unordnung induzierten Metall-Isolator-Übergangs in ungeordneten und amorphen Materialien. Das Auftreten des Phasenübergangs und das kritische Verhalten in seiner Nähe wird durch höchst präzise numerische Methoden analysiert und charakterisiert. Es wurden die folgenden physikalischen Fragestellungen untersucht: Ändert sich das universelle Verhalten für ungeordnete Systeme, wenn man das zu Grunde liegende Anderson-Modell der Lokalisierung verändert? Haben Änderungen der Topologie des zu Grunde liegenden Gitters einen Einfluss? Gibt es Abweichungen von den universellen Vorhersagen der Theorie der Zufallsmatrizen, wenn man sich dem Phasenübergang nähert? Wie wirkt sich Vielteilchenwechselwirkung zwischen den elektronischen Zuständen auf die

Lokalisierungseigenschaften in ungeordneten Systemen aus? Wie lassen sich thermische und andere Transportgrößen im Anderson-Modell numerisch berechnen? Lässt sich der Lokalisierungs-Delokalisierungs-Übergang beim ganzzahligen Quanten-Hall-Effekt mit den von uns beim Anderson-Übergang benutzten Methoden beschreiben?

Die numerische Charakterisierung der elektronischen Zustände geschieht durch Bestimmung der Lokalisierungslängen und des kritischen Exponenten durch die Transfer-Matrix-Methode mit anschließendem "finite-size-scaling", durch Untersuchungen des multifraktalen und statistischen Verhaltens der Wellenfunktionsamplituden sowie durch Analyse der Energieniveaustatistiken, wofür die Eigenwerte und Eigenzustände mit dem Lanczos-Algorithmus bestimmt werden. Der Einfluss der Wechselwirkung wird ebenfalls mit exakten Diagonalisierungsverfahren, aber auch mit einer speziellen Dezimationsmethode und mit Renormierungsgruppen-Methoden behandelt. Der Renormierungsgruppenansatz wird auch bei der Beschreibung des Quanten-Hall-Effektes benutzt. Die direkte Berechnung der thermischen Transportgrößen geschieht mit Hilfe der linearen Antwort-Theorie.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Teilaufgabe "Test und Entwicklung von Algorithmen"

Wie wir bereits in der vergangenen Förderperiode gezeigt hatten, lässt sich der Hamilton-Operator des Anderson-Modells der Lokalisierung sehr effektiv durch den Lanczos-Algorithmus in der Cullum-Willoughby-Implementation diagonalisieren. Obwohl verschiedene andere Algorithmen getestet wurden, hat sich der Lanczos-Algorithmus bisher als die beste zur Verfügung stehende Methode bewährt. Für wechselwirkende Elektronen mussten aufwändigere Algorithmen entwickelt werden.

2.3.2 Teilaufgabe "Anisotrope Systeme und Schichtsysteme"

Im Anderson-Modell wird den Transferintegralen, die das Hüpfen der Elektronen zwischen benachbarten Gitterplätzen beschreiben, üblicherweise ein konstanter Wert zugewiesen. Die Abweichung vom kristallinen, perfekt geordneten System wird dann durch die zufällige Wahl der potentiellen Energien an den Gitterplätzen modelliert. Im Rahmen dieser Teilaufgabe haben wir die Frage untersucht, inwieweit sich die Lokalisierungseigenschaften ändern, wenn wir andere physikalisch mindestens genauso relevante Arten von Unordnung oder Störungen der Transferintegrale im System berücksichtigen. Dabei wurden zunächst anisotrope periodische Systeme untersucht, bei denen die Transferintegrale in einer oder in zwei Richtungen wesentlich kleiner als in den verbleibenden Richtungen gewählt werden. Dadurch werden schwach gekoppelte Ebenen bzw. schwach gekoppelte Ketten simuliert. Dies ist von experimenteller Relevanz, da eine Reihe von Messungen zum kritischen Verhalten uniaxiale Druckveränderung nutzten, was anisotropen Änderungen der Transferintegrale entspricht. Interessant ist hierbei unter anderem die Frage, ob durch genügend schwache Kopplung zwischen den Ebenen ein quasi-zweidimensionales Verhalten erreicht werden kann. Dies ist von besonderer Relevanz, um den Phasenübergang zu beschreiben, der experimentell in zweidimensionalen Systemen gefunden wurde. In diesem Zusammenhang stellt sich natürlich auch die Frage,

ob ein derartiger Phasenübergang im Anderson-Modell beobachtet werden kann, wenn man Schichtstrukturen endlicher Dicke simuliert.

2.3.3 Teilaufgabe “Nichtdiagonale Unordnung”

Das Anderson-Modell mit zufällig gewählten Transferintegralen modelliert sehr gut die unterschiedlichen Hüpfraten auf Grund variabler Atomabstände in amorphen Substanzen. Im entsprechenden zweidimensionalen Modell ohne Potentialunordnung ist die Lokalisierungslänge der elektronischen Zustände im thermodynamischen Limes wesentlich größer als im Fall reiner Potentialunordnung. In der Mitte des Bandes divergiert die Lokalisierungslänge sogar, es ergibt sich ein kritischer Zustand, der jedoch bereits durch kleine zusätzliche Potentialunordnung lokalisiert wird.

2.3.4 Teilaufgabe “Topologische Unordnung”

Quasiperiodische Systeme stehen gewissermaßen zwischen geordneten Kristallen und ungeordneten Strukturen, da sie deterministisch aufgebaut sind, aber keine Translationsinvarianz zeigen. Diese topologische Unordnung hat Einfluss auf die Lokalisierungseigenschaften der elektronischen Zustände, beispielsweise treten an den Bandkanten vergleichsweise ausgedehnte Zustände auf, während in der Bandmitte extrem lokalisierte Zustände gefunden werden. Die Energieniveaustatistik von zweidimensionalen quasiperiodischen Systemen zeigt bereits kritisches Verhalten, ohne dass Potentialunordnung eingeführt werden muss.

2.3.5 Teilaufgabe “Wechselwirkende Systeme”

Der in zweidimensionalen Elektronensystemen mit hoher Ladungsträgerbeweglichkeit experimentell gefundene Metall-Isolator-Übergang wird vermutlich durch die Coulomb-Wechselwirkung induziert, denn eine einfache Abschätzung der relevanten Energieskalen ergibt bereits, dass die charakteristische Coulomb-Energie wesentlich größer als die Fermi-Energie ist. Die Frage, ob die Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen zu einer Vergrößerung der Lokalisierungslänge führt und damit möglicherweise in zweidimensionalen Systemen ein Metall-Isolator-Übergang auftritt, ist in der Vergangenheit kontrovers diskutiert worden. Interessant sind in diesem Zusammenhang auch einige quasiperiodische Systeme, bei denen ein Metall-Isolator-Übergang bereits für nichtwechselwirkende Elektronen auf eindimensionalen Strukturen auftritt.

Für sehr große Systeme, insbesondere im thermodynamischen Grenzfall, erscheint jedoch die Untersuchung von zwei wechselwirkenden Teilchen uninteressant, vielmehr stellt sich die Frage, wie sich eine große Zahl wechselwirkender Teilchen verhält. Da die Anzahl der Vielteilchenzustände in derartigen Systemen allerdings mit der Zahl der betrachteten Teilchen stark anwächst, ist die Größe der Systeme, die numerisch behandelt werden können, stark eingeschränkt.

2.3.6 Teilaufgabe “Transporteigenschaften”

Die Thermokraft ist ein Beispiel einer Transportgröße, deren Verhalten am Anderson-Übergang noch nicht gut verstanden ist, obwohl zahlreiche experimentelle Resultate

vorliegen. Die Temperaturabhängigkeit der Thermokraft kann ebenso wie die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit im Rahmen der linearen Antwort-Theorie beschrieben werden.

Für eindimensionale Strukturen kann man Transporteigenschaften leicht mit Hilfe der Transmissionswahrscheinlichkeit iterativ bestimmen. Dies haben wir für den Magnetotransport eines mesoskopischen Systems von in einer Kette angeordneten Ringstrukturen benutzt.

2.3.7 Teilaufgabe “Quanten-Hall-Effekt”

Der unordnungsgetriebene Lokalisierungs-Delokalisierungs-Übergang beim quantisierten ganzzahligen Hall-Effekt kann durch das Netzwerkmodell von Chalker und Coddington simuliert werden. Mit Hilfe eines Renormierungsgruppenansatzes berechnen wir die Statistik von Transmissionsamplituden. Die Motivation der Untersuchung basiert auf experimentellen Arbeiten, in denen Abweichungen vom erwarteten Skalenverhalten gefunden wurden. Insbesondere stellt sich die Frage, ob derartige Abweichungen durch makroskopische Inhomogenitäten innerhalb der Probe hervorgerufen werden.

2.3.8 Teilaufgabe “Statistik der Wellenfunktionen von seltenen Zuständen”

Die Verteilung der Wellenfunktionsamplituden im metallischen Bereich des Anderson-Modells ist näherungsweise durch die Porter-Thomas-Verteilung gegeben. Sie folgt aus der Annahme, dass die Quantenlokalisierung, die mit wachsender Unordnung schließlich zum Phasenübergang führt, vernachlässigbar ist. Für endliche Werte des Unordnungsparameters gibt es natürlich Abweichungen von der Porter-Thomas-Verteilung auch im metallischen Bereich. Außerdem treten so genannte anormale Zustände auf, die Lokalisierung zeigen und sich stark von den typischen ausgedehnten Wellenfunktionen unterscheiden. Sie verursachen große relative Abweichungen in den Ausläufern der Verteilungsfunktionen. Das Ziel unserer entsprechenden Untersuchungen ist es, durch Vergleich der numerischen Daten mit analytischen Vorhersagen die mikroskopische Elektronenbewegung in ungeordneten Metallen besser zu verstehen. Die analytischen Vorhersagen beruhen auf dem nicht-linearen Sigma-Modell, das den Elektronentransport semiklassisch beschreibt, wobei sich die Elektronen lokal diffusiv bewegen, aber der Quantenlokalisierung unterliegen.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe “Test und Entwicklung von Algorithmen”

Wir führten noch einige abschließende Arbeiten zur Parallelisierung durch [CMRS01, CMRS02, cmrs01, s02c, skc⁺02]. Untersuchungen von Mehrgitterverfahren zeigten erneut, dass eine derartige iterative Herangehensweise mit den derzeit vorhandenen Glättungsverfahren keinen effizienten Ersatz für den Lanczos-Algorithmus ermöglicht. Zur Beschreibung von Vielteilchensystemen mit Wechselwirkung ist ein Diagonalisierungsverfahren entwickelt worden [SV03], das nur eine Teilmenge der energetisch günstigsten

Zustände berücksichtigt, aber die Wechselwirkung zwischen diesen Zuständen dann exakt enthält.

Eine neuartige Transfer-Matrix-Methode, bei der die Konvergenz durch vielfaches Betrachten desselben ungeordneten quasieindimensionalen Systems erreicht wird, haben wir entwickelt, um langreichweitig korrelierte Unordnungspotentiale im Anderson-Modell verwenden zu können [NRS04, nrs03a]. Auf diese Weise ist es möglich geworden, die Abhängigkeit des kritischen Exponenten von der Potenz, mit der die Korrelationsstärke des Potentials abfällt, zu bestimmen. Es zeigt sich, dass für feste Unordnung ein kritischer Wert dieser Potenz existiert, oberhalb dessen der kritische Exponent dem des Modells mit unkorrelierter Unordnung entspricht, was mit dem erweiterten Harris-Kriterium übereinstimmt [nrs03b, nrs04a].

Die üblicherweise verwendete Transfer-Matrix-Methode haben wir andererseits erweitert auf ein dreidimensionales Anderson-Modell mit zwei Bändern, wobei ein binäres Unordnungspotential benutzt wurde, um mit experimentellen Ergebnissen für amorphe metallische Legierungen vergleichen zu können [PRS03].

Einen Überblick auch über die methodischen Aspekte geben die Übersichtsartikel [RS03, SM02].

2.4.2 Teilaufgabe “Anisotrope Systeme und Schichtsysteme”

Bei den Untersuchungen des Metall-Isolator-Übergangs im Anderson-Modell der Lokalisierung mit anisotropen Transferintegralen wurde in allen Fällen die Gültigkeit der Einparameterskalenhypothese bestätigt. Die Abhängigkeit der Mobilitätskante von der Anisotropie wurde bestimmt [MRS01, smr01, sr02, s02b]. Dabei wurden neben der Niveau-Abstandsverteilung auch die Varianz, die die globale spektrale Steifheit misst, und deren Ableitung zur Beschreibung des Phasenübergangs und zur Bestimmung der kritischen Exponenten eingesetzt [NRS02, NRS03, nrs01, nrs02].

Schichtstrukturen unterschiedlicher Dicke wurden mit Hilfe der Transfer-Matrix-Methode untersucht [SK01, SK02, SK04]. Dabei wurde bereits für relativ dünne Schichten ein Metall-Isolator-Übergang gefunden.

2.4.3 Teilaufgabe “Nichtdiagonale Unordnung”

Für das Anderson-Modell mit zufällig gewählten Transferintegralen wurden die Zustandsdichte und die multifraktalen Eigenschaften der Eigenzustände auf zweidimensionalen Quadratgittern berechnet [ers02a]. Dabei wurde auch der Spezialfall eines bipartiten Systems analysiert, der in die so genannte chirale Universalitätsklasse fällt [ERS01a]. Durch Skalierung der Zustandsdichte in der Bandmitte wurde die Bestimmung des kritischen Exponenten in einem Modell mit zufälligem magnetischem Fluss vorgenommen [Cer01], was die bisher einzige quantitative Abschätzung der Divergenz der Lokalisierungslänge in der Bandmitte für dieses Modell ist. Eine Skalierung der Lokalisierungslängen führte dabei nicht zu einer genaueren Bestimmung des Wertes des Exponenten, da die Lokalisierungslängen sehr groß werden. Trotzdem konnte das Phasendiagramm des Modells in zwei Dimensionen bestimmt werden [Cer01].

2.4.4 Teilaufgabe “Topologische Unordnung”

Die Energiespektren und Eigenzustände von quasiperiodischen Systemen wurden mit Hilfe der Multifraktalanalyse und der Energieniveaustatistik beschrieben [s01c], wodurch sich die universellen Eigenschaften der Spektren nachweisen ließen [GS03, gs03]. In dreidimensionalen Systemen deuten erste Rechnungen zur Propagation von Wellenpaketen [CGS04, cgs03, cgs04, s01b] möglicherweise auf eine Mobilitätskante hin.

2.4.5 Teilaufgabe “Wechselwirkende Systeme”

Für das Problem von zwei wechselwirkenden Teilchen in einem Zufallspotential auf einer linearen Kette haben wir die Dezimationsmethode benutzt. Wir konnten zeigen, dass eine wechselwirkungsinduzierte Vergrößerung der Lokalisierungslängen auftritt, dass die Stärke der Delokalisierung jedoch weniger dramatisch ist als in analytischen Abschätzungen vermutet [s02a]. Die numerisch sehr anspruchsvolle Erweiterung dieser Arbeiten auf zweidimensionale Systeme zeigte eine vollständige Delokalisierung der Zweiteilchen-Lokalisierungslängen für bestimmte Zustände [RSV01, rsv01].

Auch in quasiperiodischen Systemen, die einen Metall-Isolator-Übergang schon in einer Dimension aufweisen, wie die Aubry-Andre-Kette, haben wir die Lokalisierungseigenschaften mit Hilfe der Dezimationsmethode untersucht [ERS01b, ERS02, ers02b, ers03, srs02]. Eine Änderung des kritischen Verhaltens wurde dabei nicht beobachtet. Dies gilt auch für entsprechende Untersuchungen mit Hilfe eines Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Ansatzes, mit dem es möglich ist, eine endliche Dichte von wechselwirkenden Teilchen zu beschreiben [SRS02, SRS03, erss01].

Ein anderer Zugang zur Beschreibung der Lokalisierung von wechselwirkenden Vielteilchensystemen, der in der vergangenen Förderperiode im Rahmen des nicht weitergeführten Teilprojektes C2 entwickelt worden war, beruht auf der exakten Berechnung der niederenergetischen Vielteilchenzustände [EKS⁺01, VS01, svm01]. Die bisherigen Untersuchungen zum Quanten-Coulomb-Glas [mrs01], bei dem die Wechselwirkung sehr vieler Elektronen untereinander mit Unordnung konkurriert, wurden auf Systeme mit Berücksichtigung des Spins ausgedehnt [VS01]. Dabei wurden auch die Transporteigenschaften bestimmt [EKS⁺01]. Es hat sich gezeigt, dass im stark lokalisierten Bereich die Wechselwirkungen zur Erhöhung der Leitfähigkeit führen, wogegen sie für schwache Unordnung die Leitfähigkeit verringern. Diese Methode wurde nun auch für die Beschreibung von mehreren wechselwirkenden Elektronen in Quantenpunkten eingesetzt [SSV01a, SSV01b, SSV01c, s01a, ssv01, sv01].

2.4.6 Teilaufgabe “Transporteigenschaften”

Mit Hilfe der Greensfunktionsmethode konnten wir die thermoelektrischen Transporteigenschaften von amorphen Systemen in der Nähe des Metall-Isolator-Übergangs untersuchen und deren kritisches Verhalten beschreiben [VRSM01, crms04, vrsm01a]. Alle kinetischen Koeffizienten der linearen Antwort-Theorie lassen sich durch eine rekursive Formulierung der Methode berechnen [VRSM01, rsvm01, vrsm01b, vrsm02].

Ein anderer Zugang wurde benutzt, um Magnetotransport auf mesoskopischen Strukturen zu beschreiben, wobei der Transmissionskoeffizient berechnet wurde [CRS03, crs02, crs03].

2.4.7 Teilaufgabe “Quanten-Hall-Effekt”

Der Phasenübergang beim ganzzahligen quantisierten Hall-Effekt wurde für ein langreichweitig korreliertes Unordnungspotential beschrieben [CRSR01, crrs01, crs01]. Zur Charakterisierung des Übergangs wurde auch die Energieniveaustatistik benutzt [crs02, crrs03a, crsr02]. Dabei wurde wieder ein Renormierungsgruppenansatz verwendet [crsr03, crs04, crrs03b].

2.4.8 Teilaufgabe “Statistik der Wellenfunktionen von seltenen Zuständen”

Wir haben die Verteilung von Wellenfunktionsamplituden im Anderson-Modell untersucht [UMS01]. Dabei wurden auch Korrekturen zu den aus der Zufallsmatrizentheorie gewonnenen Resultaten berücksichtigt. Insbesondere wurde der Gültigkeitsbereich von störungstheoretischen Korrekturen analysiert [URS02]. In ihren Ausläufern kann die Verteilung der Intensitäten der Eigenzustände in quasieindimensionalen Systemen gut durch die Zufallsmatrizentheorie mit den erwähnten Korrekturen wiedergegeben werden, in zweidimensionalen Systemen stimmt die Verteilung mit Ergebnissen der Methode optimaler Fluktuationen überein [ums01]. Für dreidimensionale Systeme zeigen numerische Untersuchungen ebenfalls die Gültigkeit der Methode optimaler Fluktuationen [NC02], obwohl nur kleine Systemgrößen im metallischen Bereich untersucht wurden.

Die räumliche Struktur der anormalen lokalisierten Zustände großer dreidimensionaler Systeme wurde ebenfalls numerisch bestimmt [UMS02, umrs01, rusm01], dabei wurden insbesondere die Intensitäten außerhalb des anormalen Bereiches untersucht und mit analytischen Resultaten verglichen. Es zeigt sich, dass der Einfluss von ballistischen Effekten auf die statistischen Eigenschaften der Wellenfunktionen in quasieindimensionalen Systemen wichtig sein kann [UMS01].

Literaturverzeichnis

- [Cer01] V. Z. Cerovski. Critical exponent of the random flux model on an infinite two-dimensional square lattice and anomalous critical states. *Phys. Rev. B*, 64:161101(R)/1–4, 2001.
- [CGS04] V. Z. Cerovski, U. Grimm, and M. Schreiber. Spectral and diffusive properties of silver-mean quasicrystals in 1, 2, and 3 dimensions. *Phys. Rev. B*, 2004. (submitted for publication).
- [CMRS01] P. Cain, F. Milde, R. A. Römer, and M. Schreiber. Applications of cluster computing for the Anderson model of localization. in *Recent Research Developments in Physics*, ed. S. G. Pandalai. (*Transworld Research Network, Trivandrum, Indien*), 2:171–184, 2001.
- [CMRS02] P. Cain, F. Milde, R. A. Römer, and M. Schreiber. Use of cluster computing for the Anderson model of localization. *Comp. Phys. Comm.*, 147:246–250, 2002.
- [CRS03] A. Chakrabarti, R. A. Römer, and M. Schreiber. Magnetotransport on periodic and quasiperiodic arrays of mesoscopic rings. *Phys. Rev. B*, 68:195417/1–9, 2003.

- [CRSR01] P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, and M. E. Raikh. Integer quantum Hall transition in the presence of a long-range-correlated quenched disorder. *Phys. Rev. B*, 64:235326/1–9, 2001.
- [EKS⁺01] F. Epperlein, S. Kilina, M. Schreiber, S. Uldanov, and T. Vojta. Fock space localization, return probability, and conductance of disordered interacting electrons. *Physica B*, 296:52–55, 2001.
- [ERS01a] A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. Exponents of the localization lengths in the bipartite Anderson model with off-diagonal disorder. *Physica B*, 296:46–51, 2001. *Physica B* 324:429, 2002 (Erratum).
- [ERS01b] A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. Localization properties of two interacting particles in a quasi-periodic potential with a metal-insulator transition. *Eur. Phys. J. B*, 23:229–234, 2001.
- [ERS02] A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. Localization properties of two interacting particles in a quasi-periodic potential with a metal-insulator transition, in *Proc. 26th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 26), Edinburgh 2002*, ed. A. R. Long and J. H. Davies. *Inst. Phys. Conf. Ser. (Inst. of Physics, Bristol)*, 171:P9/1–8, 2002.
- [GS03] U. Grimm and M. Schreiber. Energy spectra and eigenstates of quasiperiodic tight-binding Hamiltonians, in *Quasicrystals–Structure and Physical Properties*, ed. H.-R. Trebin. (Wiley-VCH, Berlin, 2003) pages 210–235.
- [MRS01] F. Milde, R. A. Römer, and M. Schreiber. Metal-insulator transition in anisotropic systems, in *Proc. 25th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 25), Osaka 2000*, ed. N. Miura and T. Ando. *Proceedings in Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg), 87:148–149, 2001.
- [NC02] B. K. Nikolić and V. Z. Cerovski. Structure of quantum disordered wave functions: weak localization, far tails, and mesoscopic transport. *Eur. Phys. J. B*, 30:227–238, 2002.
- [NRS02] M. L. Ndawana, R. A. Römer, and M. Schreiber. Finite-size scaling of the level compressibility at the Anderson transition. *Eur. Phys. J. B*, 27:399–407, 2002.
- [NRS03] M. Ndawana, R. A. Römer, and M. Schreiber. Scaling of the level compressibility at the Anderson metal-insulator transition. *J. Phys. Soc. Japan*, 72:A131–A132, 2003.
- [NRS04] M. L. Ndawana, R. Römer, and M. Schreiber. Effects of scale-free disorder on the Anderson metal-insulator transition. *Europhys. Lett.*, 2004. (submitted for publication).
- [PRS03] I. V. Plyushchay, R. A. Römer, and M. Schreiber. The three-dimensional Anderson model of localization with binary random potential. *Phys. Rev. B*, 68:064201/1–9, 2003.
- [RS03] R. A. Römer and M. Schreiber. Numerical investigations of scaling at the Anderson transition, in *Anderson Localization and Its Ramifications–Disorder, Phase Coherence, and Electron Correlations*, ed. T. Brandes and S. Kettmann. *Lecture Notes in Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg), 630:3–19, 2003.

- [RSV01] R. A. Römer, M. Schreiber, and T. Vojta. Disorder and two-particle interaction in low-dimensional quantum systems. *Physica E*, 9:397–404, 2001.
- [SK01] R. K. Brojen Singh and D. Kumar. Localization in thin films: Cross-over from two dimensions to three dimensions. *Int. J. Mod. Phys. B*, 19:2627–2639, 2001.
- [SK02] R. K. Brojen Singh and D. Kumar. Self-consistent study of localization in thin films. *Phys. Rev. B*, 66:075123/1–5, 2002.
- [SK04] R. K. Brojen Singh and D. Kumar. Self-consistent study of localization in thin films. *Phys. Rev. B*, 69:115420/1–12, 2004.
- [SM02] M. Schreiber and F. Milde. Characterization of the metal-insulator transition in the Anderson model of localization, in *Computational Statistical Physics—From Billiards to Monte Carlo*, ed. K. H. Hoffmann and M. Schreiber. (Springer, Berlin, Heidelberg, 2002) pages 259–278.
- [SRS02] C. Schuster, R. A. Römer, and M. Schreiber. Interacting particles at a metal-insulator transition. *Phys. Rev. B*, 65:115114/1–7, 2002.
- [SRS03] C. Schuster, R. A. Römer, and M. Schreiber. Commensurate and incommensurate transitions for interacting particles. *J. Phys. Soc. Japan*, 72:A129–A130, 2003.
- [SSV01a] M. Schreiber, J. Siewert, and T. Vojta. Interacting electrons in parabolic quantum dots: energy levels, addition energies, and charge distributions. *Int. J. Mod. Phys. B*, 15:3641–3645, 2001.
- [SSV01b] M. Schreiber, J. Siewert, and T. Vojta. Interacting electrons in parabolic quantum dots: Energy levels, addition energies, and charge distributions, in *Excitonic Processes in Condensed Matter*, ed. K. Cho and A. Matsui. (World Scientific, Singapore, 2001) pages 73–77.
- [SSV01c] J. Siewert, M. Schreiber, and T. Vojta. Interacting electrons in parabolic quantum dots, in *Proc. 25th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 25), Osaka 2000*, ed. N. Miura and T. Ando. *Proceedings in Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg), 87:1061–1062, 2001.
- [SV03] M. Schreiber and T. Vojta. The Hartree-Fock based diagonalization—an efficient algorithm for the treatment of interacting electrons in disordered solids. *Mathematics and Computers in Simulation*, 62:243–254, 2003.
- [UMS01] V. Uski, B. Mehlig, and M. Schreiber. Signature of ballistic effects in disordered conductors. *Phys. Rev. B*, 63:241101(R)/1–4, 2001.
- [UMS02] V. Uski, B. Mehlig, and M. Schreiber. Spatial structure of anomalously localized states in disordered conductors. *Phys. Rev. B*, 66:233104/1–4, 2002.
- [URS02] V. Uski, R. A. Römer, and M. Schreiber. Numerical study of eigenvector statistics for random banded matrices. *Phys. Rev. E*, 65:056204/1–4, 2002.
- [VRSM01] C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, and A. MacKinnon. Critical behavior of the thermoelectric transport properties in amorphous systems near the metal-insulator transition, in *Proc. 25th Int. Conf. Physics of Semiconductors (ICPS 25), Osaka 2000*, ed. N. Miura and T. Ando. *Proceedings in Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg), 87:166–167, 2001.

- [VS01] T. Vojta and M. Schreiber. Localization and conductance in the quantum Coulomb glass. *Phil. Mag. B*, 81:1117–1129, 2001.

Konferenzbeiträge:

- [cgs03] V. Z. Cerovski, U. Grimm, and M. Schreiber. Anomalous diffusion of the octonacci quasicrystals in $d = 1, 2$, and 3 . Workshop “Elementary Excitations in Quasicrystals” Chemnitz, 10/03.
- [cgs04] V. Z. Cerovski, U. Grimm, and M. Schreiber. Spectral properties and anomalous diffusion in octonacci quasicrystals. Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 03/04.
- [cmrs01] P. Cain, F. Milde, R. A. Römer, and M. Schreiber. Applications of cluster computing for the Anderson model of localization. Conf. Computational Physics (CCP) 2001, Aachen, 09/01.
- [crms04] A. Croy, R. A. Römer, A. MacKinnon, and M. Schreiber. Thermoelectric properties of disordered systems. Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 03/04.
dito: CMMP04, Cond. Matter and Materials Physics Conf., Warwick, 04/04.
- [crrs01] P. Cain, M. E. Raikh, R. A. Römer, and M. Schreiber. Localization-delocalization quantum Hall transition in the presence of a quenched disorder. 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 07/01.
- [crrs02] P. Cain, M. E. Raikh, R. A. Römer, and M. Schreiber. Energy level spacing distribution at the quantum Hall transition. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/02.
dito: 26th Int. Conf. Physics of Semiconductors, Edinburgh, UK, 08/02.
dito: 23rd Int. Conf. on Low Temperature Physics, Hiroshima, Japan, 08/02.
dito: APS March Meeting, Indianapolis, USA, 03/02.
- [crrs03a] *dito*: SPP-Kolloquium Quanten-Hall-Systeme, Bad Honnef, 01/03.
- [crrs03b] P. Cain, M. E. Raikh, R. A. Römer, and M. Schreiber. Renormalization group approach to energy level statistics at the integer quantum Hall transition. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.
- [crs01] P. Cain, R. A. Römer, and M. Schreiber. Localization-delocalization quantum Hall transition in the presence of a quenched disorder. Int. Symp. Quantum-Hall-Effect and Heterostructures (266. WEH-Seminar), Würzburg, 12/01.
- [crs02] A. Chakrabarti, R. A. Römer, and M. Schreiber. Magneto-transport in periodic and quasiperiodic arrays of mesoscopic rings. APS March Meeting, Indianapolis, USA, 03/02.
- [crs03] *dito*: DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.
dito: CMMP03, Cond. Matter and Materials Physics Conf., Belfast, 04/03.
dito: Workshop Off-shell Effects in Quantum Transport, MPI PKS Dresden, 05/03.
- [crs04] P. Cain, R. A. Römer, and M. Schreiber. Renormalizing into the mesoscopic quantum Hall insulator. Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 03/04.

- [crsr02] P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, and M. E. Raik. Energy level spacing distribution at the quantum Hall transition. 12th Int. Winterschool New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf, Österreich, 03/02.
dito: 19th EPS/CMD conference, Brighton, Grossbritannien, 04/02.
dito: Localisation 2002: Int. Conf. on Quantum Transport and Quantum Coherence, Tokyo, Japan, 08/02.
- [crsr03] P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, and M. E. Raikh. Renormalization group approach to energy level statistics at the integer quantum Hall transition. CMMP03, Cond. Matter and Materials Physics Conf., Belfast, 04/03.
dito: Workshop Off-shell Effects in Quantum Transport, MPI PKS Dresden, 05/03.
- [ers02a] A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. Exponents of the localization lengths in the Anderson model with off-diagonal disorder. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/02.
dito: APS March Meeting, Indianapolis, USA, 03/02.
dito: Localisation 2002: Int. Conf. on Quantum Transport and Quantum Coherence, Tokyo, Japan, 08/02.
- [ers02b] A. Eilmes, R. A. Römer, and M. Schreiber. Localization properties of two interacting particles in a quasi-periodic potential with a metal-insulator transition. 26th Int. Conf. Physics of Semiconductors, Edinburgh, UK, 08/02.
dito: DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/02.
- [ers03] *dito*: Workshop Off-shell Effects in Quantum Transport, MPI PKS Dresden, 05/03.
- [erss01] A. Eilmes, R. A. Römer, C. Schuster, and M. Schreiber. Two and more interacting particles at a metal-insulator transition. 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 07/01.
- [gs03] U. Grimm and M. Schreiber. Energy spectra and eigenstates of quasiperiodic tight-binding Hamiltonians. Joint Colloquium GDR-CINQ and SPQK, Nancy, Frankreich, 05/03.
- [mrs01] A. Möbius, U. K. Rössler, and M. Schreiber. Phase transition in the lattice Coulomb glass without disorder. Conf. Hopping and Related Phenomena 2001, Tel Aviv, Israel, 09/01.
- [nrs01] M. Ndawana, R. A. Römer, and M. Schreiber. Finite size scaling of the level compressibility at the Anderson transition. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Hamburg, 01/01.
- [nrs02] *dito*: 12th Int. Winterschool New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf, Österreich, 03/02.
dito: DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/02.
dito: APS March Meeting, Indianapolis, USA, 03/02.
dito: 19th EPS/CMD conference, Brighton, Grossbritannien, 04/02.
dito: 26th Int. Conf. Physics of Semiconductors, Edinburgh, UK, 08/02.
dito: Localisation 2002: Int. Conf. on Quantum Transport and Quantum Coherence, Tokyo, Japan, 08/02.
- [nrs03a] M. Ndawana, R. A. Römer, and M. Schreiber. The Anderson model of localization with scale-free disorder. CMMP03, Cond. Matter and Materials Physics Conf., Belfast, 04/03.
dito: DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Dresden, 03/03.

- [nrs03b] M. Ndawana, R. A. Römer, and M. Schreiber. The extended-Harris criterion and scale-free disorder in the 3d Anderson model of localization. IOP TCM group meeting, Warwick, 12/03
- [nrs04a] *dito*: Spring Meeting German Physical Society, Regensburg, 03/04.
dito: CMMP04, Cond. Matter and Materials Physics Conf., Warwick, 04/04.
- [rsv01] R. A. Römer, M. Schreiber, and T. Vojta. Disorder and two-particle interaction in low-dimensional quantum systems. 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 07/01.
- [rsvm01] R. A. Römer, M. Schreiber, C. Villagonzalo, and A. MacKinnon. Thermoelectric transport properties in amorphous materials at the metal-insulator transition. 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 07/01.
- [rusm01] R. A. Römer, V. Uski, M. Schreiber, and B. Mehlig. An exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors. MAR01 March Meeting APS, Seattle, USA, 03/01.
- [s01a] M. Schreiber. Application of the Hartree-Fock based diagonalization algorithm to the quantum Coulomb glass and to quantum dots. Dynamics Days Europe 2001, Dresden, 06/01.
- [s01b] M. Schreiber. Computer simulations of dynamical processes. WE-Heraeus-Sommerschule Dynamics of Complex Systems: Classical and Quantum Aspects, Wittenberg, 08/01.
- [s01c] M. Schreiber. Lokalisierung elektronischer Zustände in quasiperiodischen Gittern. SPP-Kolloquium Quasikristalle: Struktur und physikalische Eigenschaften, Irsee, 03/01.
- [s02a] M. Schreiber. Correlated electrons. 3rd TMR Workshop Quantum transport in the frequency and time domains, Bad Kleinkirchheim, Österreich, 01/02.
- [s02b] M. Schreiber. Localization of electronic states in disordered systems. Alexander von Humboldt Seminar The Scientific Community in Russia and European Integration, Moskau, Russland, 09/02.
- [s02c] M. Schreiber. Numerical investigations of the metal-insulator transition in disordered materials. CLAMV Seminar, International University Bremen, 10/02.
- [skc⁺02] M. Schreiber, U. Kleinekathöfer, P. Cain, I. Kondov, and R. A. Römer. Simulation of electron transfer processes in disordered systems and in molecular aggregates on large PC clusters. 291. WE-Heraeus-Seminar Science on Cluster Computers, Bad Honnef, 08/02.
- [smr01] M. Schreiber, F. Milde, and R. A. Römer. Spatial statistics and multifractality of wave functions in disordered materials at the metal-insulator transition. 2nd Conf. Spatial Statistics and Statistical Physics, Wuppertal, 03/01.
- [sr02] M. Schreiber and R. A. Römer. Numerical investigations of the Anderson transition. 283. WE-Heraeus-Seminar Localisation, Quantum Coherence and Interaction, Hamburg, 09/02.

- [srs02] C. Schuster, R. A. Römer, and M. Schreiber. Interacting particles at a metal-insulator transition. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Regensburg, 03/02.
dito: Localisation 2002: Int. Conf. on Quantum Transport and Quantum Coherence, Tokyo, Japan, 08/02.
- [ssv01] M. Schreiber, J. Siewert, and T. Vojta. Interacting electrons in parabolic quantum dots. MAR01 March Meeting APS, Seattle, USA, 03/01.
- [svm01] M. Schreiber, T. Vojta, and A. Möbius. The Hartree-Fock based diagonalization—an efficient algorithm for the exact treatment of many interacting disordered electrons in solid state physics. 3rd IMACS Seminar Monte Carlo Methods MCM2001, Salzburg, Österreich, 09/01.
- [svs01] M. Schreiber, T. Vojta, and J. Siewert. Interacting electrons in parabolic quantum dots and quantum dot structures. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Hamburg, 03/01.
- [umrs01] V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, and M. Schreiber. Exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Hamburg, 03/01.
dito: 21st IUPAP Int. Conf. Statistical Physics (STATPHYS21), Cancun, Mexico, 07/01.
- [ums01] V. Uski, B. Mehlig, and M. Schreiber. Deviations from universality in spectral statistics of the Anderson model. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Hamburg, 03/01.
- [vrsm01a] C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, and A. MacKinnon. Behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition. MAR01 March Meeting APS, Seattle, USA, 01/01.
- [vrsm01b] C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, and A. MacKinnon. Thermoelectric transport properties in amorphous materials at the metal-insulator transition. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Hamburg, 01/01.
- [vrsm02] C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, and A. MacKinnon. Calculating thermoelectric transport properties the microscopic way. APS March Meeting, Indianapolis, USA, 03/02.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Die bisherigen Untersuchungen sollen fortgesetzt und erweitert werden. In zweidimensionalen und quasizweidimensionalen Systemen soll das Wechselspiel zwischen der Topologie des Gitters, der Schichtdicke und der Anisotropie genauer analysiert werden, dabei sollen insbesondere auch Systeme mit einem Magnetfeld parallel zu den Schichten beschrieben werden. Die bisherigen Untersuchungen zu Schichten endlicher Dicke kommen wahrscheinlich zu falschen Ergebnissen, da die für das “finite-size-scaling” benutzten Rohdaten wahrscheinlich nicht konvergiert waren, bzw. viel zu kleine Systeme berechnet wurden. Andere topologische Strukturen, beispielsweise das Modell eines Netzwerkes für eine “kleine Welt”, in dem ein bestimmter Anteil der Transferintegrale zwischen den

nächsten Nachbarn durch langreichweitige Transferterme zu zufällig ausgewählten Gitterplätzen ersetzt wird, sollen in Zukunft ebenfalls betrachtet werden. Mit wachsender Zahl derartig langreichweitiger Verbindungen im Netzwerk ist eine wachsende Delokalisierung der Eigenzustände zu erwarten, so dass das System möglicherweise in einen Phasenübergang getrieben werden kann. Genauere numerische Untersuchungen für die verschiedenen Varianten des Anderson-Modells sind geplant für die Energieniveaustatistik an der Mobilitätskante und deren Abhängigkeit von der Verteilung der zufällig gewählten Matrixelemente.

Eine genauere Analyse der Umstände, die zum Auftreten der anormalen lokalisierten Zustände erforderlich sind, soll zu einer besseren quantitativen Beschreibung führen, so dass ein Vergleich mit verschiedenen analytischen Resultaten möglich wird. Für die Charakterisierung der Transporteigenschaften sollen die diffusiven Eigenschaften bei der Dynamik von Wellenpaketen berechnet werden, insbesondere die anormale Diffusion, die im kritischen Bereich des Delokalisierungsübergangs auftritt. In quasiperiodischen Systemen zeigt sich hier ein Übergang zwischen ballistischem und diffusivem Verhalten, der sicherlich durch die Zunahme von Potentialunordnung beeinflusst werden kann, wobei die Unordnung entweder durch Störstellen oder auch topologisch, also durch Phasen eingeführt werden kann.

In allen Fällen wird die Charakterisierung der elektronischen Zustände und die Beschreibung des kritischen Verhaltens am Phasenübergang wesentliches Ziel unserer zukünftigen Untersuchungen sein.