

Diplomarbeit

**Numerische Untersuchungen zum
Lokalisierungsproblem mittels
Tight-Binding-Modellen und direkter
Diagonalisierung**

Daniel Jung

22. Oktober 2010

Betreut durch Prof. Dr. Gerd Czycholl

Zweitgutachter: Dr. habil. Stefan Kettemann

Inhaltsverzeichnis

Akronymverzeichnis	5
1. Einleitung	7
2. Grundlagen	11
2.1. Die einfach-kubische Kristallstruktur	11
2.2. Das Bloch-Theorem	12
2.3. Tight-Binding-Modelle	14
3. Modellierung ungeordneter Festkörpersysteme	17
3.1. Tight-Binding-Modell für ungeordnete Festkörpersysteme	18
3.2. Modelle für die Wahl des Zufallspotentials	20
3.3. Einfluss der Unordnung auf die Zustandsdichte	22
3.4. Lokalisierte Bandbereiche	26
3.5. Der Phasenübergang	27
3.6. Der Lokalisierungsmechanismus	28
4. Numerische Methoden	31
4.1. Berechnung der Eigenzustände	32
4.2. Lokalisierungskriterien	45
4.3. Skalenverhalten	48
4.4. Bestimmung des Phasenübergangs	59
4.5. Multifraktale Analyse	63
5. Ergebnisse der kontinuierlichen Verteilungsfunktionen	69
5.1. Systemspezifikationen	69
5.2. Einfluss der Dimensionalität	70
5.3. Einfluss der Zufallsverteilung	72
5.4. Einfluss des Cutoff-Parameters	74
5.5. Ausblick zur multifraktalen Analyse	75
5.6. Fazit	77
6. Ergebnisse der binären Legierung	79
6.1. Systemspezifikationen und Energieintervalle	79
6.2. Bestimmung der Mobility Edges	81
6.3. Phasendiagramm der Konzentration	82
6.4. Phasendiagramm der Potentialdifferenz	84

Inhaltsverzeichnis

6.5. Ein- und zweidimensionale binäre Legierungen	84
6.6. Fazit	85
7. Zusammenfassung	89
A. Übersicht über berechnete Realisierungszahlen	93
Abbildungsverzeichnis	101
Tabellenverzeichnis	103
Literaturverzeichnis	105

Akronymverzeichnis

1BZ Erste Brillouin-Zone

BSS Box size scaling

CPA Coherent potential approximation

DOS Density of states, *dt.* Zustandsdichte

FSS Finite size scaling

GIPN Generalisierte IPN

IPN Inverse participation number

IPR Inverse participation ratio

KEZ Konventionelle Einheitszelle

LDOS Local density of states, *dt.* lokale Zustandsdichte

ME Mobility edge, *dt.* Mobilitätsgrenze

MFA Multifraktale Analyse

MIT Metal-insulator transition, *dt.* Metall-Isolator-Übergang (MIÜ)

MIÜ Metall-Isolator-Übergang

NN Next neighbors, *dt.* nächste Nachbarn

PBC Periodic boundary conditions, *dt.* periodische Randbedingungen

PDF Probability density function, *dt.* Wahrscheinlichkeitsdichte(-funktion)

PEZ Primitive Einheitszelle

PN Participation number

PR Participation ratio

SBC Static boundary conditions, *dt.* starre Randbedingungen

sc Simple cubic, *dt.* einfach-kubisch bzw. kubisch-primitiv

SGL Schrödingergleichung

Inhaltsverzeichnis

SNN Second next neighbors, *dt.* zweitnächste Nachbarn

SSS System size scaling

TBM Tight-Binding-Modell

TMM Transfermatrixmethode

VONS Vollständiges Orthonormalsystem

WSEZ Wigner-Seitz-Einheitszelle

1. Einleitung

Einen fundamentalen Baustein der Festkörpertheorie stellt das Bloch-Theorem dar, welches die elektronischen Zustände in idealen Kristallen beschreibt [Czy08]. Für Festkörper mit perfekt periodischer Struktur und unter Vernachlässigung von Teilchen-Teilchen-Wechselwirkungen können damit schon einige grundlegende Aussagen getroffen werden. Durch eine Erweiterung auf Vielteilcheneffekte wie zusätzlichen Wechselwirkungen zwischen Elektronen oder Gitterschwingungen (Phononen) und durch den Einbau von Verunreinigungsatomen kann dieses einfache Modell ergänzt werden, um die in der Realität immer vorhandenen Abweichungen von der perfekten Kristallsymmetrie zu berücksichtigen. Schon früh wurden auf diese Weise in der Halbleitertechnik die Effekte von kleinen Verunreinigungen in Form von Dotierungen¹ genutzt, deren Beschreibung bei den geringen Konzentrationen, die dabei in der Regel benötigt werden, noch verhältnismäßig einfach durch störungstheoretische Ansätze gelingt. Dennoch lassen sich damit nur Materialien mit kleiner Störstellenkonzentration angemessen gut beschreiben. Wird die Konzentration zu hoch, versagt die Theorie, da z. B. das Bloch-Theorem durch den Wegfall der Gitterperiodizität verletzt wird.

Dabei bedeuten Störungen der Periodizität in der Natur keineswegs eine Abweichung vom vermeintlichen Normalzustand, also dem Zustand, der in der Natur am häufigsten auftritt. Im Gegenteil, eher die pure Reinheit eines Kristalls scheint die Ausnahme in der Natur zu sein. Für eine technologische Anwendung ist die Beschreibung von reinen Festkörpersystemen aufgrund des geringen Aufwands jedoch von Vorteil. Es liegt auf der Hand, dass die Wissenschaft stets bemüht war, einen größeren Bereich von Materialien mit immer größerer Präzision beschreiben und deren Eigenschaften kontrollieren zu können. Lässt man die Forderung nach einer streng periodischen Kristallstruktur und großer Reinheit fallen, eröffnet sich eine ungeahnte Vielfalt an neuen, potentiell nutzbringenden Materialeigenschaften.

Einen wichtigen Effekt von Störstellen stellt deren Einfluss auf die elektrische Leitfähigkeit dar: Während die Elektronen in einem perfekten Kristall nach der Drude-Theorie (einer klassischen Theorie für die elektrische Leitfähigkeit von Metallen) als freie Elektronen beschrieben werden können, die eine gegenüber der Gitterkonstanten große freie Weglänge besitzen und damit zum metallischen Charakter des Festkörpers beitragen, können die Elektronen in einem verunreinigten System an den vorhandenen Störstellen gestreut werden und besitzen somit eine geringere freie Weglänge. Je höher die Störstellendichte ist, desto öfter werden die Elektronen an den Störstellen gestreut, und desto höher ist nach der klassischen Ansicht der elektrische Widerstand.

¹Dotierung bezeichnet das gezielte Einbringen von Fremdatomen in ein Halbleitermaterial, um vor allem dessen Leitfähigkeit zu verändern.

1. Einleitung

Aus Sicht der Quantenmechanik, nach der die Elektronen über ihre der Schrödinger-Gleichung genügende Wellenfunktion beschrieben werden müssen, entstehen an den Störstellen lokalisierte Zustände, während im perfekten Kristall – ebenen Wellen entsprechend – ausgedehnte Zustände vorliegen. Je höher die Störstellenkonzentration bzw. allgemein die Unordnung des Systems ist, desto mehr lokalisierte Zustände besitzt das System, bis schließlich keine ausgedehnten Zustände mehr existieren: Das System ist zum Isolator geworden. Dieser unordnungsinduzierte Metall-Isolator-Übergang (MIÜ, *engl.* metal-insulator transition, MIT) wurde zuerst von Philip Warren Anderson erkannt [And58] und wird daher auch als Anderson-Übergang bezeichnet.

Das minimale Tight-Binding-Modell, das Anderson vorgeschlagen hat, ist zu einer Art Standardmodell zur Untersuchung des MIÜ geworden. Es beschreibt – unter Vernachlässigung von Wechselwirkungen der Elektronen untereinander – die Bewegung eines Elektrons im Potential der Atomkerne, die ein einfach-kubisches Gitter bilden, wobei sich das Potential von Gitterplatz zu Gitterplatz unterscheidet und unabhängig vom Ort zufällig aus einem Intervall mit Breite W gezogen wird. W heißt Unordnungsparameter, da er direkt die Unordnung des Systems angibt. Ist $W = 0$, liegt ein reines System vor, das perfekte Translationssymmetrie besitzt. Diese Arbeit beschäftigt sich sowohl mit dem Anderson-Modell als auch mit geringfügigen Abwandlungen, in denen die Art der zufälligen Wahl der Gitterpotentiale modifiziert wird. Es werden jeweils ein-, zwei- und dreidimensionale Systeme betrachtet.

Die Zustände der betrachteten Systeme werden in dieser Arbeit mit einer direkten Diagonalisierungsmethode berechnet. Um den Lokalisierungscharakter jedes einzelnen Zustands ermittelt zu können, wird als Lokalisierungsmaß die Inverse Participation Number (IPN) herangezogen und ihr Skalenverhalten ermittelt, so dass auf die Eigenschaften der Zustände des unendlich großen (makroskopischen) Systems geschlossen werden kann. Dieser Ansatz wurde bereits vor mehr als 30 Jahren entwickelt, um den Lokalisierungscharakter elektronischer Zustände zu bestimmen [Sch85b]. Zur statistischen Behandlung der IPN (Mittelung über gewissen Bandbereich zur Beseitigung von Fluktuationen) wird eine eigens entwickelte variable Intervalleinteilung benutzt. Aus dem Skalenverhalten wird die fraktale Dimension des Zustands abgeleitet. Tatsächlich haben bisherige Untersuchungen gezeigt, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte der Wellenfunktionen fraktale Eigenschaften besitzen, also eine Form der Selbstähnlichkeit bzw. Skaleninvarianz aufweisen [Sch85a]. Diese Methodik ist allerdings insofern überholt, als dass inzwischen bekannt ist, dass die Zustände im Anderson-Modell einen multifraktalen Charakter besitzen [SG91] und nur durch Analyse der Multifraktalität der einzelnen Zustände eine eindeutige Zuordnung ins ausgedehnte oder ins lokalisierte Regime möglich ist. Dennoch wird versucht, die numerischen Ergebnisse, die damals auf Großrechneranlagen erzielt wurden, auf heutigen Kleinrechnern nachzuvollziehen und unter dem Vorbehalt einer näherungsweise Lösung des Problems auszuwerten. Eine eventuell mögliche zukünftige Erweiterung der Berechnungsmethoden auf die multifraktale Analyse wird ebenfalls diskutiert.

Nach einer kurzen Behandlung der wichtigsten Grundlagen in Kapitel 2 werden in Kapitel 3 die betrachteten Modelle zur Beschreibung ungeordneter Festkörpersysteme eingeführt. In Kapitel 4 werden dann alle wichtigen Schritte der verwendeten numeri-

schen Methodik genannt. Dabei wird auch auf den notwendigen numerischen Rechenaufwand eingegangen. In den beiden nachfolgenden Kapiteln werden die Ergebnisse dieser Arbeit dargestellt, aufgeteilt nach der Art der Unordnung. Hierbei wird der MIÜ für den dreidimensionalen Fall möglichst genau vermessen, aber auch der Einfluss der Unordnung auf ein- und zweidimensionale Systeme untersucht. Anschließend folgt in Kapitel 7 eine Zusammenfassung der Arbeit mit einem Ausblick auf mögliche Modifikationen und Erweiterungen der erarbeiteten numerischen Methodik.

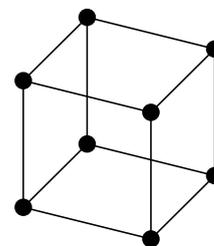
1. Einleitung

2. Grundlagen

Die Arbeit setzt prinzipiell Grundkenntnisse der Festkörperphysik voraus und kann keine komplette Einführung liefern. Bestimmte Themen, die in besonderer Weise mit der Arbeit in Verbindung stehen, sollen hier trotzdem in möglichst knapper Form Erwähnung finden. Dazu gehören das Bloch-Theorem, das im Grenzfall verschwindender Unordnung relevant ist, und Tight-Binding-Modelle (TBM), da es sich beim in dieser Arbeit verwendeten Modell zur Beschreibung ungeordneter Systeme um eine spezielle Variante eines TBM handelt.

2.1. Die einfach-kubische Kristallstruktur

Das denkbar einfachste dreidimensionale Kristallgitter, mit dem schon einige grundlegende Aussagen über die Eigenschaften von Festkörpern getroffen werden können, ist das einfach-kubische Bravais-Gitter (*engl.* simple cubic, sc) mit einatomiger Basis. Auch wenn fast kein¹ in der Natur vorkommender chemischer Stoff in dieser Form kristallisiert, ermöglicht es, mit möglichst geringem Aufwand die elektronischen Eigenschaften eines Modellsystems zu untersuchen. Jede konventionelle Einheitszelle des einfach-kubischen Gitters



(siehe nebenstehende Skizze) ist würfelförmig und enthält nur ein Atom, stimmt also mit der primitiven Einheitszelle überein. Die Kantenlänge der Einheitszelle entspricht der Gitterkonstanten a . Die drei Basisvektoren $\{\underline{a}_i\}$, die das Gitter aufspannen, lauten

$$\underline{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{a}_2 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \underline{a}_3 = a \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Durch Linearkombination mit den Koeffizienten $\{n_i\}$ lässt sich mit Hilfe dieser Basis jeder beliebige Gitterpunkt durch die Gittervektoren

$$\underline{R} = \sum_{i=1}^3 n_i \underline{a}_i \quad (2.2)$$

darstellen.

Zu jedem Gitter im Realraum, das durch die Basisvektoren $\{\underline{a}_i\}$ (2.1) aufgespannt wird, lässt sich über die Relation

$$\underline{a}_i \times \underline{b}_j = 2\pi \delta_{i,j} \quad (2.3)$$

¹Bei normalem Druck stellt die α -Modifikation von Polonium die einzige bekannte Ausnahme dar.

2. Grundlagen

ein reziprokes Gitter mit Basisvektoren $\{\underline{b}_j\}$ definieren. Beim einfach-kubischen Kristallsystem gehen die reziproken Basisvektoren durch

$$\underline{b}_1 = \frac{2\pi}{a^3}(\underline{a}_2 \times \underline{a}_3) \quad , \quad (2.4)$$

$$\underline{b}_2 = \frac{2\pi}{a^3}(\underline{a}_3 \times \underline{a}_1) \quad , \quad (2.5)$$

$$\underline{b}_3 = \frac{2\pi}{a^3}(\underline{a}_1 \times \underline{a}_2) \quad (2.6)$$

aus den Basisvektoren des Realraum-Gitters hervor [Czy08]. Es ergibt sich aufgrund der der Gleichung (2.3) innewohnenden Symmetrie sofort, dass es sich beim reziproken Gitter des reziproken Gitters wieder um das ursprüngliche Gitter handelt. Das reziproke Gitter eines einfach-kubischen Gitters ist ferner wieder einfach-kubisch.

Neben primitiver und konventioneller Einheitszelle kann auch noch die sog. Wigner-Seitz-Einheitszelle (WSEZ) eingeführt werden. Genau wie die primitive Einheitszelle enthält sie genau einen Gitterpunkt. Im Gegensatz zur PEZ umgibt sie diesen aber, anstatt wie die PEZ von jedem ihrer Eckgitterpunkte jeweils einen Anteil zu beanspruchen, der in der Summe wieder Eins ergibt. Die Wigner-Seitz-Zelle des reziproken Gitters wird auch erste Brillouin-Zone (1BZ) genannt.

In der Festkörperphysik gibt es viele physikalische Größen, die gitterperiodisch sind (z. B. das effektive elektronische Einteilchen-Potential in idealen Kristallen). Periodische Funktionen lassen sich allgemein als Fourier-Reihe

$$f(\underline{r}) = \sum_{\underline{G}} f_{\underline{G}} e^{i \underline{G} \underline{r}} \quad (2.7)$$

darstellen. Die besondere Bedeutung in der Festkörperphysik erlangt das reziproke Gitter daher, dass es sich bei den reziproken Gittervektoren

$$\underline{G} = \sum_{j=1}^3 n_j \underline{b}_j \quad (2.8)$$

gerade um die Vektoren \underline{G} handelt, über die die Fourier-Summe in Gleichung 2.7 läuft. Die erste Brillouin-Zone erhält ihre Bedeutung dadurch, dass bei endlichen Systemen mit periodischen Randbedingungen alle möglichen reziproken Gittervektoren aus der 1BZ stammen.

2.2. Das Bloch-Theorem

Um die elektronischen Eigenschaften eines Festkörpers näherungsweise zu beschreiben, kann jedes Elektron als einzelnes Teilchen im effektiven Potential \hat{V} der identischen Gitterionen (Atomrümpfe) aufgefasst werden. In diesem sog. Einteilchenbild werden Wechselwirkungen der Elektronen untereinander vernachlässigt. Die Gitterionen bestehen aus den Atomkernen und den kernnahen Elektronen, die stark an den Kern gebunden sind

und daher als nicht beweglich angesehen werden. Unter Vernachlässigung von Gitterschwingungen bilden die Kernorte ein starres Gitter, so dass das effektive Potential \hat{V} eine Translationssymmetrie aufweist,

$$\hat{V}(\underline{r}) = \hat{V}(\underline{r} + \underline{R}) \quad (2.9)$$

also durch Verschiebung um jeden beliebigen Gittervektor (2.2) wieder in sich selbst übergeht.

Um das Einteilchenproblem zu lösen, werden die Eigenlösungen des Einteilchen-Hamiltonoperators

$$\mathbb{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + \hat{V}(\underline{r}) \quad (2.10)$$

gesucht, also die Lösungen der stationären Schrödingergleichung (SGL)

$$\mathbb{H} \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = E_{\underline{k}} \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) \quad , \quad (2.11)$$

wobei der erste Summand den kinetische Term und der zweite den Potentialterm darstellen. Aus der Periodizität des Potentials \hat{V} (2.9) kann nach dem Blochschen Theorem die Bloch-Bedingung

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{r} + \underline{R}) = e^{i \underline{k} \underline{R}} \psi_{\underline{k}}(\underline{r}) \quad (2.12)$$

abgeleitet werden. Sie besagt, dass die gesuchten Elektronen-Wellenfunktionen $\psi_{\underline{k}}(\underline{r})$ nicht die Periodizität des Gitters bzw. des Potentials aufweisen, sondern dass die Amplitude sich von Gitterplatz zu Gitterplatz um einen Phasenfaktor $e^{i \underline{k} \underline{R}}$ verändert. Aus dem Bloch-Theorem folgt außerdem, dass die Eigenenergien $E_{\underline{k}}$ und Eigenzustände $\psi_{\underline{k}}(\underline{r})$ durch den Wellenvektor \underline{k} des Elektrons, der aus der ersten Brillouin-Zone stammt, vollständig charakterisiert sind².

Um die Schrödingergleichung (2.11) zu lösen, kann ein Ansatz mit ebenen Wellen

$$\psi_{\underline{k}}(\underline{r}) = u_{\underline{k}}(\underline{r}) e^{i \underline{k} \underline{r}} \quad (2.13)$$

versucht werden. Aus der Bloch-Bedingung (2.12) folgt, dass der Amplitudenfaktor $u_{\underline{k}}(\underline{r})$ gitterperiodisch sein muss,

$$u_{\underline{k}}(\underline{r} + \underline{R}) = u_{\underline{k}}(\underline{r}) \quad . \quad (2.14)$$

Dieser Amplitudenfaktor wird Bloch-Faktor genannt. Bei den ebenen Wellen (2.13) handelt es sich um sog. Bloch-Wellen. Sie bilden ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS),

$$\int \psi_{\underline{k}_1}^*(\underline{r}) \psi_{\underline{k}_2}(\underline{r}) d\underline{r} = \delta_{\underline{k}_1, \underline{k}_2} \quad . \quad (2.15)$$

Bloch-Wellen sind – wie alle ebene Wellen – nicht bei statischen Randbedingungen normierbar, wohl aber bei periodischen.

²Der Bandindex wird hier vernachlässigt, da sich die Arbeit ohnehin nur mit Einbandmodellen beschäftigt.

2.3. Tight-Binding-Modelle

Einen weiteren Zugang zur Beschreibung elektronischer Eigenschaften von Festkörpern bieten Tight-Binding-Modelle (TBM). Diese gehen von einer Ortsbasis aus lokalisierten Wellenfunktionen aus, den sog. Wannier-Funktionen [Nol05], die aus den Bloch-Zuständen (2.13) durch

$$\psi_{\underline{R}}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{k} \in \text{1BZ}} e^{-i\underline{k}\underline{R}} \psi_{\underline{k}}(r) \quad (2.16)$$

hervorgehen [Czy08]. Jeder Wannier-Zustand $\psi_{\underline{R}}(r)$ ist an einem der Gitterplätze \underline{R} lokalisiert. Die Wannier-Zustände $\{\psi_{\underline{R}}(r)\}$ bilden, genau wie die Bloch-Zustände (2.13), ein vollständiges Orthonormalsystem (VONS),

$$\int \psi_{\underline{R}_1}^*(r) \psi_{\underline{R}_2}(r) dr = \delta_{\underline{R}_1, \underline{R}_2} \quad . \quad (2.17)$$

Das TBM ist eine Näherung, die der recht intuitiven Vorstellung eines Festkörpers als 'Makromolekül' folgt: Aus der Chemie ist bekannt, dass mehrere Atome eine chemische Bindung eingehen und ein Molekül bilden, weil damit ein energetisch tieferer Gesamtzustand erreicht werden kann. An der Bindung sind dabei oft nur die äußersten atomaren Orbitale beteiligt, während die kernnahen Elektronen zusammen mit dem Atomkern ein ionisches Rumpfatombilden. Nach der Vorstellung des TBM sind in einem Festkörper so viele Atome an der Bindung beteiligt ($\sim 10^{23}$), dass sich sehr viele, energetisch dicht liegende 'Molekülorbitale' bilden, wodurch die Bildung von Energiebändern in Festkörpern leicht zu verstehen ist.

Der Einteilchen-Hamiltonoperator des TBM lautet

$$\mathbb{H} = \sum_{\underline{n}_1, \underline{n}_2} |\underline{n}_1\rangle V_{\underline{n}_1, \underline{n}_2} \langle \underline{n}_2| \quad . \quad (2.18)$$

wobei die Ortsdarstellung des Zustands $|\underline{n}_i\rangle$ der Wannier-Zustand (2.16) sein soll, der am Gitterplatz i lokalisiert ist,

$$\psi_{\underline{R}_i}(r) = \langle r | \underline{n}_i \rangle \quad . \quad (2.19)$$

Die Elemente der Matrix \underline{V} sind die sog. Hüpfparameter $V_{\underline{n}_1, \underline{n}_2}$ (*engl.* hopping parameter), da deren Betragsquadrate $|V_{\underline{n}_1, \underline{n}_2}|^2$ die Wahrscheinlichkeit dafür angeben, dass das Elektron von Zustand \underline{n}_1 in den Zustand \underline{n}_2 übergeht, also von Gitterplatz \underline{R}_1 zu Gitterplatz \underline{R}_2 wechselt ('hüpft'). $|V_{\underline{n}_1, \underline{n}_1}|^2$ ist entsprechend die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Elektron am Gitterplatz \underline{R}_1 bleibt. Daher handelt es sich im TBM bei den Diagonalelementen $V_{\underline{n}_i, \underline{n}_i}$ um das atomare Potential ϵ_i des Orbitals am Gitterplatz \underline{R}_i . Im hier betrachteten Einband-TBM liegt nur ein Orbital je Gitterplatz vor. Werden Diagonal- und Nichtdiagonalelemente getrennt aufgeschrieben, wird aus dem Hamilton-Operator (2.18)

$$\mathbb{H} = \sum_{\underline{n}_1} |\underline{n}_1\rangle \epsilon_1 \langle \underline{n}_1| + \sum_{\substack{\underline{n}_1, \underline{n}_2 \\ \underline{n}_1 \neq \underline{n}_2}} |\underline{n}_1\rangle V_{\underline{n}_1, \underline{n}_2} \langle \underline{n}_2| \quad (2.20)$$

mit

$$\epsilon_i = V_{\underline{n}_i, \underline{n}_i} \quad . \quad (2.21)$$

Dadurch kommt der konkurrierende Charakter der beiden Anteile besser zum Vorschein: Die Nichtdiagonalelemente von \underline{V} sind für die Mobilität des Elektrons verantwortlich, während die Gitterpotentiale ϵ_i versuchen, das Elektron am Gitterplatz i zu halten. In einem idealen Kristall, in dem alle Atome identisch sind, ist das Gitterpotential an allen Gitterplätzen gleich, also $\epsilon_i \equiv \epsilon$, und auch das Hüpfen des Elektrons ist immer gleich wahrscheinlich, unabhängig davon, zwischen welchen der Gitterplätze der Vorgang stattfindet ($V_{\underline{n}_1, \underline{n}_2} \equiv -V$, $V > 0$). Sollen durch das Modell aber Systeme beschrieben werden, die aus mehreren verschiedenen Atomsorten bestehen (Legierungen), so kann es sein, dass je nach Atomsorte unterschiedliche Potentiale ϵ_i und unterschiedliche Hüpfparameter $V_{\underline{n}_i, \underline{n}_j}$ vorgegeben werden.

Um mit Hilfe des TBM Berechnungen anstellen zu können, ist i. Allg. eine Einschränkung der Summe im zweiten Term des Hamilton-Operators (2.20) zweckmäßig. Dies ist auch physikalisch sinnvoll, da die Stärke der Wechselwirkung und damit die Übergangswahrscheinlichkeit mit steigendem Abstand zwischen den Gitterplätzen $|\underline{R}_1 - \underline{R}_2|$ quadratisch abnimmt. Meist genügt schon eine Beschränkung auf nächste Nachbarn (*engl.* next neighbors, NN), die im einfach-kubischen Kristallsystem mit einatomiger Basis also einfach den Abstand $|\underline{R}_1 - \underline{R}_2| = a$ zueinander aufweisen. Gelegentlich wird dem Elektron in der Literatur auch noch der Übergang zu den zweitnächsten Nachbarn (*engl.* second next neighbors, SNN) ermöglicht, die im sc-Gitter den Abstand $|\underline{R}_1 - \underline{R}_2| = a\sqrt{2}$ besitzen. Diese Arbeit beschränkt sich auf nächste Nachbarn, die Hüpfparameter \underline{V} sind dementsprechend konstant ($V_{\underline{n}_1, \underline{n}_2} \equiv -V$) und beziehen sich lediglich auf diese Klasse von Wechselwirkungen. Die Anzahl von nächsten Nachbarn in einem Kristallgitter wird auch als Koordinationszahl ν bezeichnet.

Im Fall von idealen Kristallen lassen sich die Eigenenergien und Eigenzustände (Bloch-Wellen) des TBM-Hamiltonoperators (2.20) direkt angeben als

$$|\underline{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{n}} e^{i \underline{k} \underline{n}} |\underline{n}\rangle \quad (2.22)$$

und

$$E(\underline{k}) = \epsilon_0 + V \sum_{\underline{n}} e^{i \underline{k} \underline{n}} \quad . \quad (2.23)$$

Bei der letzten Gleichung handelt es sich um die Dispersion der Elektronen für dieses Modell, da sie die Energie des Elektronen in Zusammenhang mit deren Wellenzahl bringt, und liefert auch die Bandstruktur. Explizit ausgeführt lautet die Dispersionsrelation im Fall der einatomigen einfach-kubischen Kristallstruktur

$$E(\underline{k}) = \epsilon_0 + 2V(\cos(k_1 a) + \cos(k_2 a) + \cos(k_3 a)) \quad . \quad (2.24)$$

Die sich daraus ergebende Zustandsdichte

$$\rho(E) = \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} \delta(E - E(\underline{k})) \quad . \quad (2.25)$$

2. Grundlagen

eines Einband-TBM mit NN-Wechselwirkung und einfach-kubischer Kristallstruktur ist in Abbildung 2.1 dargestellt.

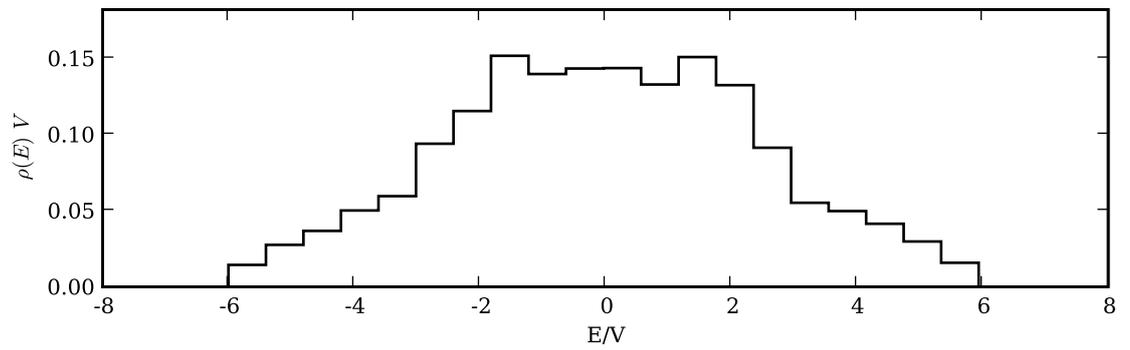


Abbildung 2.1.: Numerisch ermittelte Zustandsdichte des dreidimensionalen Tight-Binding-Modells (NN, sc, $\epsilon_0/V = 0$), hervorgegangen aus insgesamt 166 verschiedenen Realisierungen unterschiedlicher Systemgröße.

3. Modellierung ungeordneter Festkörpersysteme

Philip Warren Anderson schlug 1958 ein einfaches Tight-Binding-Modell zur Untersuchung des Lokalisierungseffekts vor [And58]. Es beschreibt die Bewegung eines Elektrons in einem Potential, dessen Stärke räumlich variiert und dem Zufall unterliegt.

In einem reinen Kristall sind sämtliche Atome identisch. Folglich besitzt ein Elektron an jedem Gitterplatz dieselbe potentielle Energie und das Gitter weist eine Translations-symmetrie auf. Grundsätzlich gilt also das Bloch-Theorem, und alle elektronischen Zustände, die das System aufweist, sind ebene Bloch-Wellen, die sich über den gesamten Kristall erstrecken, selbst wenn dieser makroskopisch oder gar unendlich groß ist. Befindet sich die Fermi-Energie E_F innerhalb eines Bandes, können sich die Elektronen frei im Kristall bewegen und Ladung bzw. Energie transportieren. Der Festkörper leitet, er ist ein Metall.

In Systemen mit Besetzungsunordnung hingegen sind die Potentiale nicht alle gleich, sondern unterscheiden sich von Gitterplatz zu Gitterplatz. Anderson hat gezeigt, dass aus den Bloch-Zuständen mit steigender Unordnung nach und nach lokalisierte Zustände werden. Lokalisiert bedeutet, dass sich die Wahrscheinlichkeitsamplitude $|\psi(\underline{r})|^2$ nicht mehr homogen über den gesamten Kristall erstreckt, wie das bei Bloch-Wellen der Fall ist, sondern nur in einem gewissen Teilbereich des Kristalls einen merklichen Wert aufweist (Abb. 3.1). Am absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ K steht keine thermische Energie zur Verfügung, um in einen Zustand höherer Energie zu wechseln. Liegt die Fermi-Energie in einem Bereich lokalisierter Zustände, können die Elektronen nicht mehr durch den Kristall diffundieren; der Festkörper ist zum Isolator geworden. Man spricht vom unordnungsinduzierten Metall-Isolator-Übergang (MIÜ, *engl.* metal-insulator transition, MIT). Die sog. Skalenhypothese besagt, dass es sich hierbei im Fall von nichtwechselwirkenden spinlosen Elektronen und ohne magnetische Einflüsse um einen Phasenübergang zweiter Ordnung handelt (One-parameter Scaling Theory) [AALR79, Mil00]. Die mit der Skalenhypothese verbundene Theorie besagt ferner, dass der Metall-Isolator-Phasenübergang nicht für ein- oder zweidimensionale Systeme, sondern erst für dreidimensionale Systeme auftritt.

Die Bloch-Zustände werden auch ausgedehnte Zustände genannt, um sie von den lokalisierten Zuständen zu unterscheiden, obwohl auch die lokalisierten Zustände noch eine gewisse räumliche Ausdehnung besitzen können. Ein Zustand mit minimaler Ausdehnung wäre perfekt an nur einem einzigen Gitterplatz lokalisiert. Für hinreichend große Unordnung tendieren alle Zustände im Anderson-Modell zu dieser perfekten Lokalisation. Der Übergang vom vollkommen ausgedehnten Bloch-Zustand zum perfekt lokalisierten Zustand ist für jeden der Zustände eines ungeordneten Systems fließend und tritt zu

3. Modellierung ungeordneter Festkörpersysteme

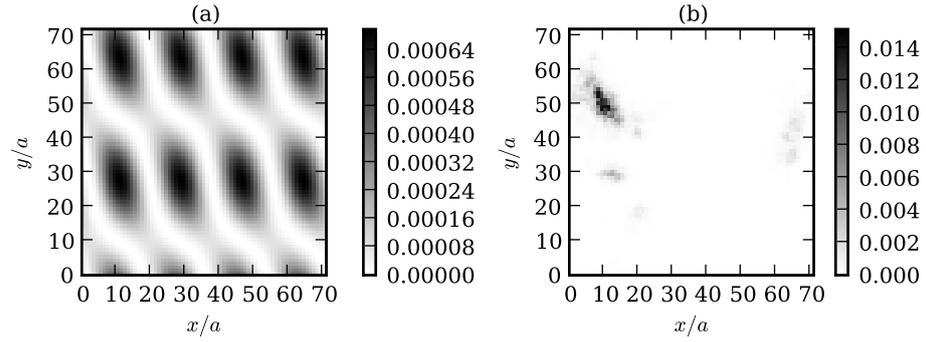


Abbildung 3.1.: Ein ausgedehnter (a) und ein lokalisierter Zustand (b) des zweidimensionalen Anderson-Modells mit $72 \times 71 = 5112$ Gitterplätzen. Die Graustufen entsprechen der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_{n,j}|^2$ des Zustands ψ_j am jeweiligen Gitterplatz n . Die Position (x, y) ist in Einheiten der Gitterkonstanten a angegeben.

unterschiedlichen Unordnungsstärken auf.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird ein einfaches Tight-Binding-Modell zur Beschreibung von ungeordneten Festkörpern vorgestellt. Daraufhin werden verschiedene Modelle für die Verteilung des Unordnungspotentials eingeführt. Das Anderson-Modell der Lokalisierung, das so etwas wie das Standardmodell zur Untersuchung des Metall-Isolator-Übergangs ist, beruht auf der Annahme einer kontinuierlichen Gleichverteilung, während zur Beschreibung von Legierungen diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen zum Einsatz kommen. Im weiteren Verlauf des Kapitels wird der unordnungsinduzierte Phasenübergang beschrieben, der die metallische und die isolierende Phase voneinander trennt, und im letzten Abschnitt wird erläutert, wie der Phasenübergang als Produkt zweier konkurrierender physikalischer Prozesse verstanden werden kann.

3.1. Tight-Binding-Modell für ungeordnete Festkörpersysteme

Der Hamilton-Operator des betrachteten Tight-Binding-Modells besteht aus nur zwei Termen: Dem Potentialterm, der die Zufallspotentiale ϵ_n enthält, und der kinetische Term, der Elektronen mit einer gewissen Übergangswahrscheinlichkeit $|V_{n_1, n_2}|^2$ den Übergang ('Hüpfen') zu anderen Gitterplätzen ermöglicht und somit für die Mobilität des Elektrons sorgt:

$$H = \sum_{n=1}^N |n\rangle \epsilon_n \langle n| + \sum_{\substack{n_1, n_2=1 \\ n_1 \neq n_2}}^N |n_1\rangle V_{n_1, n_2} \langle n_2| \quad . \quad (3.1)$$

Die N Zustände $|n\rangle$ befinden sich an den N Gitterplätzen des Systems und werden als orthonormal zueinander angenommen (Wannier-Zustände), bilden also eine Orthonormal-Basis [Czy08]. Als zugrunde liegendes Kristallgitter wird meistens – wie auch in dieser

3.1. Tight-Binding-Modell für ungeordnete Festkörpersysteme

Arbeit – das einfach-kubische verwendet (*engl.* simple-cubic, sc), aber auch andere Kristallstrukturen mit einatomiger Basis sind zur Untersuchung des MIÜ denkbar [WZ10]. Im kinetischen Term wird die Mobilität des Elektrons üblicherweise auf den Übergang zu nächsten Nachbaratomen (*engl.* next neighbors, NN) beschränkt und als in alle Richtungen und für alle Gitterplätze konstant angenommen (Isotropie), d. h. $V_{n_1, n_2} \equiv -V$. Alle Energien können relativ zum Hüpfparameter V angegeben werden. O. B. d. A. kann also für die numerischen Berechnungen $V \equiv 1$ gesetzt werden, wodurch die Energieskala festgelegt wird. Das Modell wird in Abbildung 3.2a grafisch veranschaulicht.

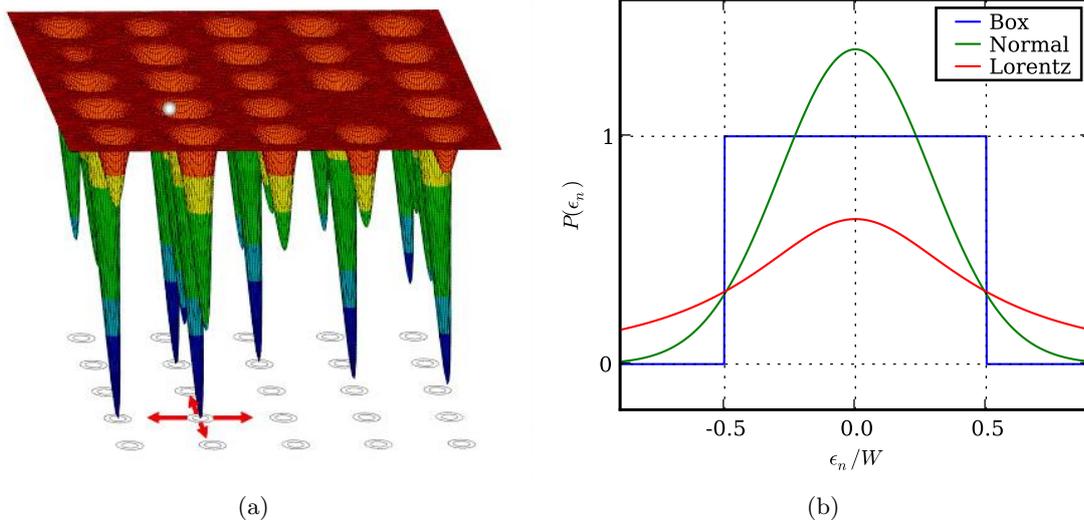


Abbildung 3.2.: (a) Veranschaulichung des Tight-Binding-Unordnungsmodells anhand eines zweidimensionalen Systems. Das Zufallspotential ist durch Potentialtröge unterschiedlicher Tiefe angedeutet, die roten Pfeile geben die Bewegungsmöglichkeiten zu den nächsten Nachbarn an. Quelle: [LvW09]. (b) Die Wahrscheinlichkeitsdichten von Boxverteilung, Normalverteilung und Lorentzverteilung im Vergleich. σ und Γ wurden mit Hilfe der Gleichungen (3.5) und (3.6) auf die Boxbreite W skaliert.

Damit zweifelsfrei geklärt werden kann, ob der Übergang zum Isolator wirklich nur einer Veränderung der elektronischen Zustände zuzuschreiben ist und nicht durch eine etwaige Bandlücke, in der sich gerade die Fermi-Energie E_F befindet, muss ein einfaches Einbandmodell mit einatomiger Basis und nur einem Zustand pro Gitterplatz gewählt werden [Mil00]. Solange die Systemgröße hinreichend groß ist, wird somit gewährleistet, dass sich (im Fall eines Gitterpotentials, das einer kontinuierlichen Zufallsverteilung unterliegt) aus den Energieeigenwerten immer ein zusammenhängendes Band bildet. Um das Modell so einfach wie möglich zu halten und um so viel wie möglich analytisch schlussfolgern zu können, verzichtet Anderson in seinem Modell ferner auf Gitterschwingungen, Elektron-Elektron-Wechselwirkungen und andere Vielteilcheneffekte.

3.2. Modelle für die Wahl des Zufallspotentials

Jedes der Gitterpotentiale ϵ_n wird als unabhängige Zufallsvariable aufgefasst (unter Vernachlässigung von Korrelationen), welche entweder einer kontinuierlichen oder einer diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilung gehorcht.

Kontinuierliche Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Von Anderson wurde zunächst eine kontinuierliche Gleichverteilung vorgeschlagen, bei der jedes Zufallspotential ϵ_n aus einem Energieintervall $[\epsilon_0 - W/2, \epsilon_0 + W/2]$ der Breite W gezogen wird (sog. Anderson-Modell) [And58]. W wird Unordnungsparameter (*engl.* disorder parameter) genannt, da er direkt das Ausmaß der Unordnung angibt. ϵ_0 bezeichnet die Bandmitte und kann zur Untersuchung von Modellen mit kontinuierlicher Verteilung zu Null gewählt werden. Das Band liegt dann immer symmetrisch um den Energienullpunkt verteilt. Die kontinuierliche Gleichverteilung besitzt die Wahrscheinlichkeitsdichte (*engl.* probability density function, PDF)

$$P_B(\epsilon_n) = \frac{1}{W} \Theta \left(\frac{W}{2} - |\epsilon_n| \right) \quad (3.2)$$

und wird aufgrund deren Form auch Boxverteilung genannt (siehe Abb. 3.2b).

Neben der Boxverteilung werden auch weitere Wahrscheinlichkeitsverteilungen in Betracht gezogen [BSK87], vor allem die Normalverteilung (nach ihrem Entdecker auch Gauß-Verteilung genannt) und die Lorentz-Verteilung (in der mathematischen Fachwelt als Cauchy-Verteilung bekannt). Ihre Wahrscheinlichkeitsdichten lauten

$$P_G(\epsilon_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} e^{-\frac{\epsilon_n^2}{2\sigma^2}} \quad (3.3)$$

und

$$P_L(\epsilon_n) = \frac{\Gamma}{\pi(\epsilon_n^2 + \Gamma^2)} \quad [\text{BSK87}]. \quad (3.4)$$

und sind in Abbildung 3.2b vergleichend dargestellt.

Um die drei Wahrscheinlichkeitsverteilungen so im Tight-Binding-Modell (3.1) verwenden zu können, dass sie vergleichbare Ergebnisse liefern, muss ihre Beziehung zueinander klar definiert sein. Dazu soll die Standardabweichung für die Boxverteilung und die Normalverteilung übereinstimmen, was zum Zusammenhang

$$W = \sqrt{12} \sigma \quad (3.5)$$

führt [Sch85b]. Für die Lorentz-Verteilung ist die Standardabweichung nicht definiert. Statt dessen kann die halbe Halbwertsbreite Γ (*engl.* half width half maximum, HWHM) in Relation zur Breite der Boxverteilung gestellt werden, wobei in dieser Arbeit die (volle) Halbwertsbreite gleich der Boxbreite gesetzt wird (vgl. [BSK87]):

$$W \equiv 2\Gamma \quad . \quad (3.6)$$

Diskrete Wahrscheinlichkeitsverteilungen

In der Natur kommen neben reinen Kristallen, deren sämtliche Atome aus nur einem chemischen Element bestehen, auch Mischkristalle, sog. Legierungen, vor, die ein Komposit aus verschiedenen beteiligten Elementen darstellen. In einem Tight-Binding-Modell äußert sich das Vorhandensein unterschiedlicher Atomsorten je Gitterplatz dadurch, dass für jede Atomsorte andere potentielle Energien ϵ_i angenommen werden, die den Elektronen zur Bindung an einem Gitterion geboten werden. In einem Einband-Tight-Binding-Modell gibt es nur einen elektronischen Basiszustand je Gitterplatz n . Dementsprechend sitzt an jedem Gitterplatz ein Potential ϵ_n , das bei einer ungeordneten Legierung, bestehend aus S Atomsorten, zufällig aus einem der S Werte $\{\epsilon_i\}$ ausgewählt wird. Die ϵ_n werden also als Zufallszahlen aufgefasst, die einer diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilung mit $2S - 1$ Parametern gehorchen. Deren Wahrscheinlichkeitsdichte kann als

$$P_A^{(S)}(\epsilon_n) = \left(1 - \sum_{i=2}^S c_i\right) \delta(\epsilon_1 - \epsilon_n) + \sum_{i=2}^S c_i \delta(\epsilon_i - \epsilon_n) \quad (3.7)$$

definiert werden, wobei die $S-1$ verschiedenen Parameter c_i die Konzentrationen und die S verschiedenen Parameter ϵ_i die Potentialstärken für jedes Material i angeben. Besitzen sämtliche Konzentrationen den Wert $c_i = S^{-1}$, liegt eine diskrete Gleichverteilung vor. Abbildung 3.3 zeigt ein Beispiel einer Wahrscheinlichkeitsdichte einer Legierung mit drei Materialsorten A, B und C.

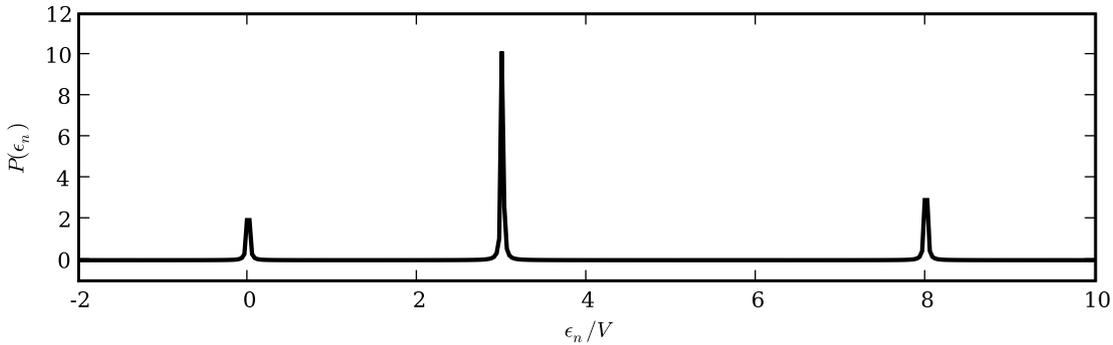


Abbildung 3.3.: Diskrete Wahrscheinlichkeitsdichte einer dreikomponentigen Legierung $A_{0,2}B_{0,5}C_{0,3}$ mit den Potentialen $(\epsilon_A, \epsilon_B, \epsilon_C)/V = (0, 3, 8)$. Die Delta-Funktionen wurden zur besseren Darstellung Lorentz-verbreitert.

Die Gitterpotentiale ϵ_n werden also zufällig aus einer diskreten Menge von festen Energien ϵ_i ausgewählt. In diesem Punkt unterscheidet sich diese Art des Zufallspotentials von der im Anderson-Modell, bei dem die Potentiale ϵ_n jeden beliebigen Wert aus einem bestimmten Energieintervall annehmen können, eben einer kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsverteilung unterliegen. Ein System mit kontinuierlicher Wahrscheinlichkeitsverteilung kann auch als eine Legierung mit unendlich vielen Komponenten gesehen werden,

3. Modellierung ungeordneter Festkörpersysteme

was nicht besonders realistisch erscheint, da in der Natur nur eine endliche Anzahl unterschiedlicher Elemente und Verbindungen vorkommt. Das Anderson-Modell erhält aber dennoch in vielen Beispielen seine Berechtigung, da es durch bestimmte Vielteilcheneffekte in realistischen Materialien eventuell doch zu einer Streuung der potentiellen Energien um das Potential eines bestimmten Gitterplatzes kommen kann. Eine Kombination von Legierungs- und Anderson-Modell, bei dem für jedes Legierungspotential ϵ_i zusätzlich noch eine Boxbreite W_i angenommen wird, wird in der Literatur gelegentlich als Modell zur Beschreibung von ungeordneten Festkörpern verwendet [PRS03].

Eine binäre Legierung ist aus nur zwei verschiedenen Atomspezies A und B aufgebaut. Die Potentiale können also nur zwei verschiedene Werte annehmen, und die Wahrscheinlichkeitsdichte (3.7) reduziert sich auf

$$P_A^{(2)}(\epsilon_n) = (1 - c_B) \delta(\epsilon_n - \epsilon_A) + c_B \delta(\epsilon_n - \epsilon_B) \quad [\text{AF05}]. \quad (3.8)$$

Die Zahl der Parameter kann weiter verringert werden, indem nur die Potentialdifferenz

$$\Delta = \epsilon_B - \epsilon_A \quad (3.9)$$

betrachtet wird. Weiter kann o. B. d. A. das Potential des A-Materials $\epsilon_A \equiv 0$ gesetzt und die Einschränkung $\epsilon_A \leq \epsilon_B$ getroffen werden, wodurch nur noch die Potentialdifferenz $\Delta = \epsilon_B \geq 0$ und die Konzentration $0 \leq c_B \leq 1$ als Parameter übrig bleiben.

Bei Modellen mit kontinuierlicher Verteilung der Potentiale kann die Stärke der Unordnung mit Hilfe eines einzigen Unordnungsparameters W quantifiziert werden. Dies ist beim binären Legierungsmodell nicht mehr der Fall. Es existieren nun zwei Parameter, die die Unordnung des Systems beeinflussen, und zwar die Potentialdifferenz Δ und die Konzentration des B-Materials c_B . Ist wenigstens eine der drei Bedingungen $\Delta = 0$, $c_B = 0$ oder $c_B = 1$ erfüllt, verschwindet die Unordnung und es liegt ein idealer Kristall vor, da dann alle ϵ_n identisch sind. Gilt $\Delta > 0$ und $c_A = c_B = 0,5$, liegt eine diskrete Gleichverteilung mit zwei Ausprägungen vor (Münzwurf).

Die Konzentration c_B gibt für endliche Systemgrößen N nicht unbedingt das genaue Verhältnis von B-Atomen zur Gesamtatomzahl $N = N_A + N_B$ an, sondern nur die Wahrscheinlichkeit, dass ein Gitterplatz von einem Atom der Sorte B besetzt wird anstelle von Sorte A (substitutionelle Unordnung). Das führt für kleinere Systemgrößen dazu, dass verschiedene Realisierungen eines Zufallssystems zu festem c_B leicht unterschiedliche Verhältnisse N_B/N aufweisen können. Für $N \rightarrow \infty$ (thermodynamischer Grenzfall) strebt das Verhältnis aber wieder gegen den theoretischen Wert der vorgegebenen Konzentration,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N_B/N = c_B \quad . \quad (3.10)$$

3.3. Einfluss der Unordnung auf die Zustandsdichte

Die Stärke der Unordnung hat wesentlichen Einfluss auf die Verteilung der Energieeigenwerte des Systems bzw. auf die Zustandsdichte.

Bandverbreiterung bei kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsverteilungen

Im Fall von kontinuierlich verteilten Potentialen ϵ_n weist die Zustandsdichte für verschwindende Unordnung $W = 0$ die typische Form eines dreidimensionalen einfach-kubischen Tight-Binding-Modells mit nächster Nachbarwechselwirkung auf (Abb. 2.1, S. 16). Sie erstreckt sich von $-B$ bis B , wobei

$$B = \nu V \quad (3.11)$$

die halbe Breite des Bandes angibt. ν ist die Koordinationszahl des Gitters, also die Anzahl nächster Nachbarn. Sie beträgt in d -dimensionalen einfach-kubischen Tight-Binding-Modellen

$$\nu = 2d \quad , \quad (3.12)$$

da in jeder Dimension zwei nächste Nachbarn existieren. Die sich daraus ergebenden Bandkanten für ideale Kristalle ohne Unordnung werden in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

Tabelle 3.1.: Bandausdehnung in Einband-Tight-Binding-Modellen ohne Unordnung ($W = 0$) in Abhängigkeit von Dimensionalität d und Koordinationszahl ν .

Tight-Binding-Modell	d	ν	$[-B/V, B/V]$
1D sc NN	1	2	$[-2, 2]$
2D sc NN	2	4	$[-4, 4]$
3D sc NN	3	6	$[-6, 6]$

Wird die Unordnung erhöht, werden zum einen etwaige Singularitäten abgebaut (sog. Van-Hove-Singularitäten), und zum anderen erfährt das Band eine stetige Verbreiterung (*engl.* band broadening, Abb. 3.4). Unter Verwendung der Boxverteilung (3.2) befinden sich die neuen Bandgrenzen genau bei $[-B - W/2, B + W/2]$. Die anderen Verteilungen (3.3) und (3.4) gehen für große Beträge $|\epsilon|$ zwar gegen Null,

$$\lim_{|\epsilon| \rightarrow \infty} P_{G/L}(\epsilon) = 0 \quad ,$$

weisen aber für alle endlichen Energiebeträge immer noch eine von Null verschiedene Wahrscheinlichkeit auf. Somit können theoretisch keine Bandgrenzen angegeben werden. Im Fall der Normalverteilung ist der Abfall aber exponentiell und so stark, dass die numerisch ermittelte Zustandsdichte in numerischen Berechnungen meist noch eine klare Bandkante besitzt. Die Lorentz-Verteilung hingegen fällt so schwach gegen Null ab, dass bei einer numerischen Ziehung der Zufallszahlen immer wieder einzelne Eigenwerte auftauchen, die extremen Energien E entsprechen. Nicht selten wurden in dieser Arbeit Energiebeträge $|E/V|$ beobachtet, die im fünf- bis sechsstelligen Bereich lagen.

3. Modellierung ungeordneter Festkörpersysteme

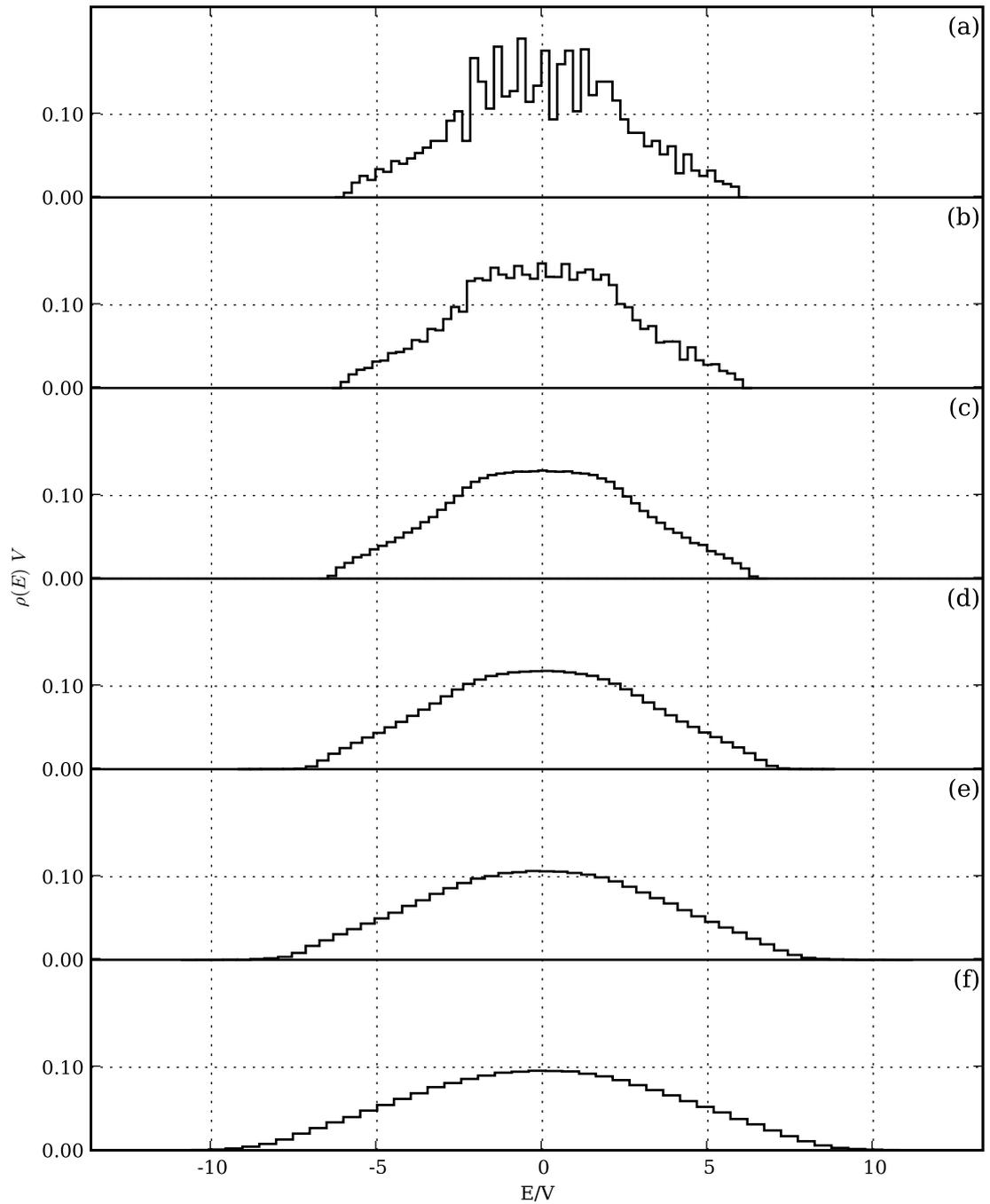


Abbildung 3.4.: Zustandsdichte eines dreidimensionalen Tight-Binding-Modells mit normalverteiltem Gitterpotential bei steigender Unordnungsstärke $W/V \in \{0, 2, 4, 6, 8, 10\}$ (a-f). Es liegen 20 Realisierungen eines Systems mit $19 \times 17 \times 16 = 5168$ Gitterplätzen zugrunde.

Bandaufspaltung bei binären Legierungen

In Abbildung 3.5 sind typische Zustandsdichten gezeigt, die aus diesem einfachen Tight-Binding-Modell für binäre Legierungen hervorgehen [AF05]. In jener Arbeit wird die Festlegung $\epsilon_A = -\epsilon_B$ anstelle von $\epsilon_A = 0$ verwendet und das B-Material wird als das Hauptmaterial angesehen. Dargestellt ist die Zustandsdichte für verschiedene Potentialdifferenzen $\Delta = \epsilon_B - \epsilon_A$ und für schwache und starke Konzentration des Materials A.

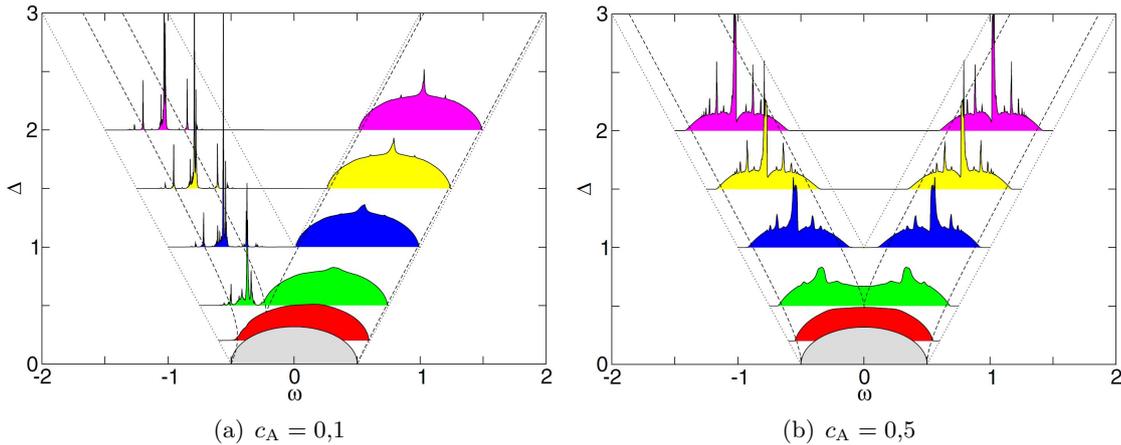


Abbildung 3.5.: Zustandsdichte einer binären Legierung in Abhängigkeit von der Potentialdifferenz Δ für (a) niedrige Konzentration $c_A = 1 - c_B = 0,1$ und (b) hohe Konzentration $c_A = c_B = 0,5$. Die gestrichelten Linien zeigen Bandkanten, die aus CPA-Rechnungen hervorgehen, die gepunkteten Linien entsprechen den Bandkanten $\omega = \pm\Delta/2 \pm 1/2$ der reinen Systeme ($\omega = E/2B$). Quelle: [AF05].

Bei schwacher Störstellenkonzentration weist das Störstellenband (*engl.* impurity band) deltafunktionsähnliche Spitzen auf. Die Störstellen sind i. Allg. weit über den Kristall verstreut, der vornehmlich aus B-Atomen besteht, und können daher noch kein Band im eigentlichen Sinn bilden. Es handelt sich bei allen Zuständen im Impurity Band um lokalisierte Zustände, während das Hauptband mit hoher Wahrscheinlichkeit vollständig aus ausgedehnten Bloch-artigen Zuständen besteht.

Erst bei höheren Störstellenkonzentrationen c_A liegen die Störstellen so dicht beieinander, dass sie ein eigenes Band formen können, in dem auch wieder ausgedehnte Zustände existieren. Die Elektronen können sich dann entlang von Clustern, die aus A-Atomen bestehen, durch den Kristall bewegen. Die höchste Störstellenkonzentration liegt vor, wenn genauso viele A- wie B-Atome im System existieren. Dann lässt sich nicht mehr zwischen Haupt- und Impurity-Band unterscheiden, beide sind gleichwertig. Beide enthalten sowohl ausgedehnte als auch lokalisierte Zustände.

3.4. Lokalisierte Bandbereiche

Wird vom perfekten Kristall ausgegangen und die Unordnung sukzessive erhöht, so bilden sich die ersten lokalisierten Zustände bei Energien, an denen eine geringe Zustandsdichte vorliegt. Beim dreidimensionalen Tight-Binding-Einband-Modell mit einem Zufallspotential, das einer kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsverteilung unterliegt, ist dies an den Bandkanten der Fall (Abb. 3.6). In der Bandmitte liegen weiterhin ausgedehnte Zustände vor.

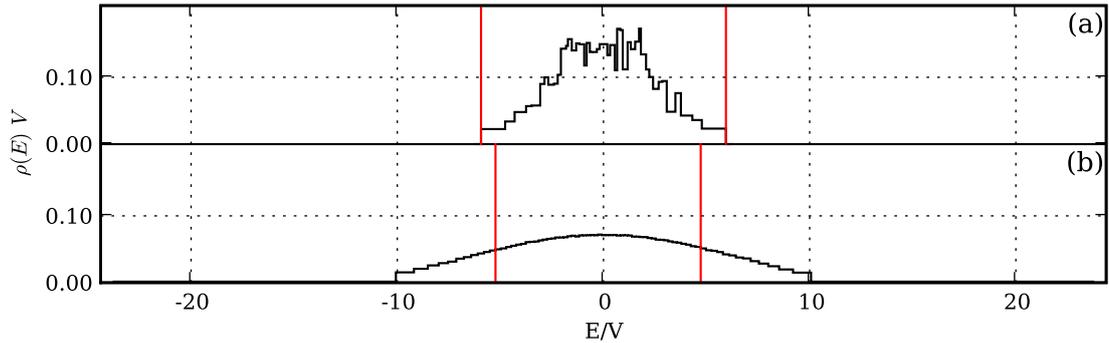


Abbildung 3.6.: Das Band eines dreidimensionalen Einband-Tight-Binding-Modells (a) ohne Unordnung und (b) mit Unordnung. Die roten Senkrechten markieren die Mobility Edges E_c . Die Potentiale sind normalverteilt, es liegen insgesamt 166 Realisierungen von sechs verschiedenen Systemgrößen zugrunde.

Dieser Bereich wird allerdings mit steigender Unordnung immer kleiner. Der Bereich ausgedehnter Zustände wird auf beiden Seiten von den sog. Mobility Edges¹ (ME, dt. etwa Mobilitätsgrenze) von den beiden Bereichen lokalisierter Zustände abgegrenzt, die sich in der Nähe der Bandkanten gebildet haben. Mit steigender Unordnung W rücken die ME immer weiter in Richtung Bandmitte, bis sie dort schließlich kollabieren und das System nur noch lokalisierte Zustände besitzt. Diese Unordnungsstärke wird kritische Unordnung W_c genannt. Sie unterscheidet sich je nach verwendeter Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\epsilon)$. In Tabelle 3.2 werden gängige Literaturwerte für die kritische Unordnung W_c aufgelistet.

Durch die Symmetrie, die den Modellen mit kontinuierlicher Wahrscheinlichkeitsverteilung innewohnt und die auch für die Spiegelsymmetrie der Zustandsdichte an der Bandmitte sorgt, liegt bei diesen Modellen stets eine gerade Anzahl von Mobility Edges vor, nämlich entweder zwei oder gar keine, während bei Legierungen jede natürliche Zahl auftreten kann. Bei binären Legierungen kann es je nach Potentialdifferenz Δ und Störstellen-Konzentration c_B zur Ausbildung von bis zu vier Mobility Edges kommen.

¹Der Begriff Mobility Edge wurde Anfang der 1960er Jahre von Sir Nevill Mott geprägt.

Tabelle 3.2.: Literaturwerte für die kritische Unordnung W_c unter Verwendung von Box-, Normal- und Lorentz-Verteilung mit Quellenangabe und Jahr der Veröffentlichung.

Kritische Unordnung W_c/V			Quelle	Jahr
Box	Normal	Lorentz		
$16,0 \pm 0,5$			[MK81]	1981
$16,4 \pm 0,3$			[Sch85a]	1985
$16,3 \pm 0,5$	$20,9 \pm 0,5$	$3,8 \pm 0,5$	[BSK87]	1986
$16,5$			[RS03]	2003

3.5. Der Phasenübergang

Von Interesse für das Verständnis des Metall-Isolator-Übergangs ist die genaue Lage der Mobility Edges E_c in Abhängigkeit vom Ausmaß der Unordnung. Zur Untersuchung ist es notwendig, für viele verschiedene Unordnungsparameter W bzw. verschiedene Parameterkombinationen (Δ, c_B) den Lokalisierungscharakter sämtlicher Zustände zu ermitteln und die Mobility Edges zu bestimmen. In der Literatur wurden dazu bereits ausführliche Rechnungen mit z. T. hoher numerischer Genauigkeit durchgeführt [KM93]. Das Ergebnis kann in einem Phasendiagramm dargestellt werden, wie in Abbildung 3.7 für die drei kontinuierlichen Verteilungen gezeigt ist.

Wie in der Abbildung zu erkennen ist, ist die Funktion $W(E_c)$ im Fall der Normal- und der Boxverteilung in bestimmten Energiebereichen nicht eindeutig definiert. Betrachtet man eine Energie nur etwas jenseits der ungestörten Bandkante $B/V = 6$ (etwa $E/V = 6,3$) und variiert die Unordnung ausgehend von $W = 0$, so durchlaufen die Zustände bei dieser Energie (sobald das Band genügend verbreitert ist und überhaupt Zustände bei dieser Energie existieren) zweimal den Phasenübergang. Beim ersten Übergang verliert der Zustand seinen lokalisierten Status und wird zu einem ausgedehnten Zustand (Delokalisierung). Dieser Vorgang wird der Verbreiterung des Bandes und einer damit einhergehenden Erhöhung der Zustandsdichte in diesem Energiebereich zugeschrieben [KM93]. Beim zweiten Übergang wird der Zustand wieder lokalisiert aufgrund von Interferenzeffekten der gestreuten Elektronen-Wellenfunktion mit sich selbst (siehe Abschnitt 3.6). Die Lorentz-Verteilung zeigt keine Delokalisierung.

Bei einer Legierung mit U Unordnungsparametern liegt theoretisch ein $U + 1$ -dimensionales Phasendiagramm vor, bei einer binären Legierung also ein dreidimensionales. Es können aber auch zweidimensionale Diagramme gezeichnet werden, wobei einer der Parameter (Δ, c_B, E_c) fest gewählt wird. In Abbildung 3.8 sind zwei dieser möglichen Phasendiagramme gezeigt, zum einen die Mobility Edges E_c bezüglich der Konzentration c_B (Abb. 3.8a) und zum anderen die Mobility Edges E_c bezüglich der Potentialdifferenz Δ (Abb. 3.8b). In jener Arbeit wird allerdings eine Kombination von Binärlegierungsmodell und Anderson-Modell verwendet [PRS03]. Es wird aber erwartet, dass die Phasendiagramme im Wesentlichen mit dem in dieser Arbeit verwendeten einfachen

3. Modellierung ungeordneter Festkörpersysteme

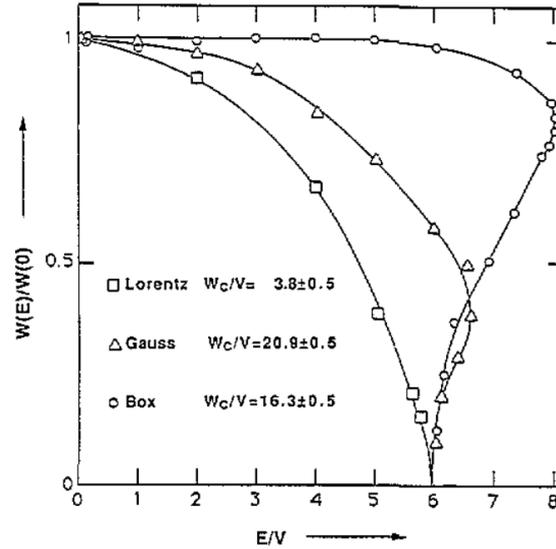


Abbildung 3.7.: Phasendiagramm des Metall-Isolator-Übergangs für Box-, Normal- und Lorentzverteilung. Die Kurven wurden der Vergleichbarkeit halber auf ihre jeweilige kritische Unordnung $W(E_c = 0) = W_c$ normiert. Quelle: [KM93].

Binärlegierungsmodell übereinstimmen.

Wie in den Diagrammen ersichtlich wird, ist auch bei binären Legierungen Delokalisierung möglich, etwa bei einer festen Energie im oberen Bandbereich in Abbildung 3.8b. Des weiteren kann das System bei bestimmten Kombinationen der Unordnungsparameter (Δ, c_B) bis zu vier Mobility Edges enthalten.

3.6. Der Lokalisierungsmechanismus

Für den Metall-Isolator-Übergang werden im Wesentlichen zwei konkurrierende Prozesse verantwortlich gemacht [BKM85]: Der Tunneleffekt, der für die Mobilität des Elektrons sorgt, sowie destruktive Interferenz der Wellenfunktionen durch Streuung an Störungen des periodischen Potentials.

Für ungeordnete Systeme ist das Bloch-Theorem aufgrund der fehlenden Periodizität des Potentials nicht mehr haltbar. Die Näherungsannahme freier Elektronen verliert mit zunehmendem Unordnungsmaß schnell an Boden, am schnellsten in den Bereichen niedriger Zustandsdichte, also in der Nähe der Bandkanten. Im Bild freier Elektronen werden die ebenen Wellen an den Störstellen des Kristalls gestreut. Je mehr Störstellen vorliegen, zu desto mehr Streuprozessen kann es kommen. Die z. T. mehrfach gestreuten Wellen überlagern sich, die Interferenz kann lokalisierte Zustände zur Folge haben, da das Elektron die andere Seite des Kristalls auf endlichen Zeitskalen nicht mehr erreicht. Bedingung für die Interferenz ist eine Phasenkohärenzlänge, die viel größer ist als der

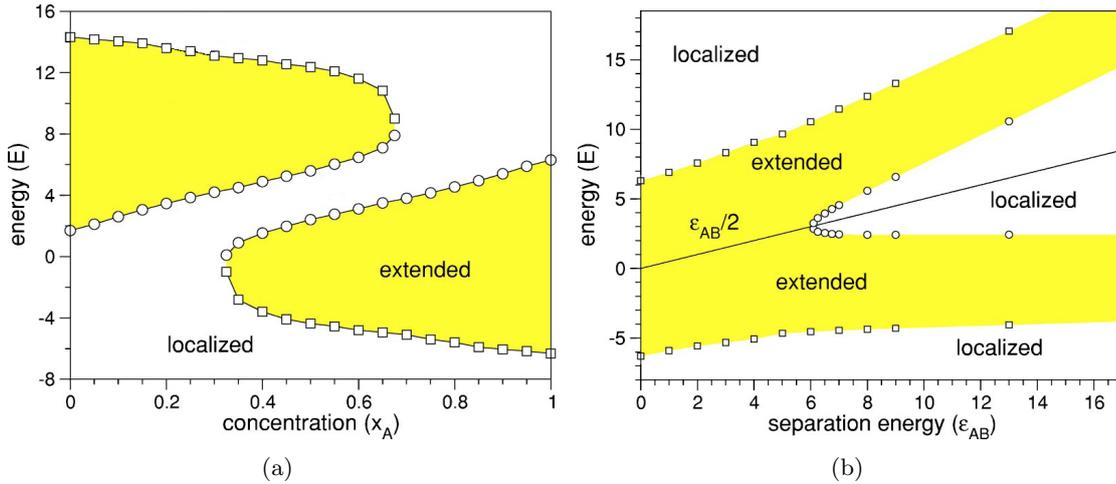


Abbildung 3.8.: Phasendiagramme einer binären Legierung, (a) bezüglich der Konzentration $c_A \equiv x_A$ für feste Potentialdifferenz $\Delta/V = 8$ und (b) bezüglich der Potentialdifferenz $\Delta/V \equiv \epsilon_{AB}$ für feste Konzentration $c_A \equiv x_A = 0,5$. In jener Arbeit wurde zusätzlich zur diskreten Zufallsverteilung für jede Atomsorte eine Boxverteilung mit $W_A = W_B = 4V$ angenommen (Kombination von binärer Legierung und Anderson-Modell). Quelle: [PRS03].

mittlere Abstand zwischen zwei Streuzentren, aber kleiner als die Lokalisierungslänge λ des Zustands (4.10) [BKM85]. Bei der Phasenkohärenzlänge handelt es sich um die Strecke, nach der eine Einelektronenwellenfunktion bei einer gegebenen Energie ihre Phasenkohärenz verliert. Sie nimmt für eine feste Energie mit steigender Unordnung ab. Für feste Unordnung hängt sie an der Nähe des Bandzentrums aber kaum von der Energie ab. In der Bandmitte ist die Interferenz der dominierende Lokalisierungsmechanismus.

In der Nähe der Bandkante des ungestörten Systems und darüber hinaus wird der Tunneleffekt wichtig. Für Zustände, die in dieser Region des Bandes liegen, ist das Freielektronen-Bild nicht sinnvoll. Daher werden Tight-Binding-Modelle verwendet, bei denen, wie bereits erläutert, von an den Gitterplätzen lokalisierten Elektronenzuständen ausgegangen wird. Die Elektronen können sich nur durch den Festkörper bewegen, indem sie mit einer gewissen Tunnelwahrscheinlichkeit $|V_{n_1, n_2}|^2$ von Gitterplatz 1 zu Gitterplatz 2 überwechseln. Durch eine Erhöhung der Unordnung wird entweder das Band breiter (kontinuierliche Wahrscheinlichkeitsverteilung) oder es bildet sich ein Störstellenband (Legierungsmodell). Im ersten Fall steigt damit bei einer festen Energie auch die Zustandsdichte, und die Zustände kommen sich energetisch näher [BKM85], so dass die Tunnelwahrscheinlichkeit ansteigt. Durch die erhöhte Tunnelwahrscheinlichkeit können die Zustände ihren Lokalisierungscharakter verlieren und zu ausgedehnten Zuständen werden. Dieser Effekt wird Delokalisierung genannt.

3. Modellierung ungeordneter Festkörpersysteme

4. Numerische Methoden

Um den Metall-Isolator-Übergang untersuchen zu können, müssen zumindest einige Eigenschaften wie Eigenwerte, Eigenvektoren, Lokalisierungslängen oder Leitfähigkeit ermittelt werden, um den jeweiligen Lokalisierungsgrad der Zustände und damit den Metall-Isolator-Übergang bestimmen zu können. Der Zufallscharakter des Anderson-Modells macht eine analytische Behandlung allerdings schwierig. Daher ist schon früh der Gedanke aufgekommen, Andersons Theorie und Vorhersagen numerisch zu verifizieren. Computergestützte numerische Untersuchungen werden natürlich immer stark durch den jeweiligen Stand der Computertechnik begrenzt.

Seit den 90er Jahren konnte der Metall-Isolator-Übergang dann aber mit zufriedenstellender Genauigkeit numerisch vermessen werden. Mit modernen parallelisierbaren Diagonalisierungsmethoden für große Sparse-Matrizen, vor allem der Lanczos-Methode [Lan51] und einigen jüngeren Varianten, und der bis heute fortwährenden technologischen Weiterentwicklung von Computern wurden große Fortschritte erzielt. Dabei halfen auch verfeinerte Methoden, die den Phasenübergang durch ein iteratives Verfahren bestimmen lassen, wie z. B. die Transfermatrixmethode (TMM) [MK81, KM93, Mil00, RS03]. Die Aussagen der Skalenhypothese konnten damit weitestgehend bestätigt werden. Allerdings konzentrieren sich diese hochspeziellen parallelisierten Verfahren oft auf einen nur kleinen Parameterbereich (oft nur eine bestimmte Unordnungsstärke) und einen kleinen Bandbereich (meist werden nur einige Zustände in der Nähe der Bandmitte berechnet) [VRR08].

Diese Arbeit soll nicht versuchen, an das Bestreben immer höherer numerischer Genauigkeit und immer größerer Systeme anzuknüpfen. Es soll vielmehr demonstriert werden, ob eine Behandlung des Lokalisierungsproblems heutzutage schon unter Verwendung von nicht-parallelisierten Standardroutinen zur direkten Diagonalisierung, Rechneranlagen, deren Spezifikationen nicht weit über denen eines handelsüblichen Multiprozessor-PC liegen (Tab. 4.1), und einer einfachen, flexiblen und interaktiven Skriptsprache wie Matlab [The10] oder Python [ADH⁺99, Oli07] Sinn macht bzw. mit welcher Genauigkeit auf diese Weise Aussagen über den Metall-Isolator-Übergang erzielt werden können.

Durch die direkte Diagonalisierung steht das gesamte Eigenwertspektrum unmittelbar zur Verfügung. Des weiteren werden Systeme betrachtet, die sich in der Dimensionalität d (1D, 2D, 3D) und in der dem Potential zugrunde liegenden Zufallsverteilung (Box, Normal, Lorentz, binär) unterscheiden. Durch die Größe des betrachteten Parameterraums ist die erreichbare Genauigkeit der Ergebnisse weniger durch die Rechengeschwindigkeit und durch den Arbeitsspeicher der verwendeten Computer begrenzt, sondern vielmehr durch den zur Verfügung stehenden Massenspeicher (Festplattenkapazität).

Der erste Abschnitt des Kapitels ist zunächst der Besetzung und Diagonalisierung der Hamilton-Matrix gewidmet. Mithilfe der direkten Diagonalisierungsmethode werden so

4. Numerische Methoden

Tabelle 4.1.: Spezifikationen der verwendeten Rechneranlagen mit Typ des Hauptprozessors (CPU), Arbeitsspeicher (RAM), zur Verfügung stehendem Festplattenspeicher (HDD) und installiertem Betriebssystem.

	CPU	RAM	HDD	Betriebssystem
A	Core 2 @ 2,4 GHz	4,00 GiB	700 GiB	Linux Fedora 8 (64 bit)
B	Quad Xeon 3220 @ 2,4 GHz	8,00 GiB	100 GiB	Linux Fedora 8 (64 bit)
C	Quad Xeon 3220 @ 2,4 GHz	8,00 GiB	100 GiB	Linux Fedora 8 (64 bit)
D	Pentium Dual D820 @ 3 GHz	3,25 GiB	50 GiB	Linux Fedora 8 (64 bit)

die Eigenwerte und Eigenvektoren diverser Realisierungen sämtlicher Systeme bestimmt. Da dieser Schritt der numerisch aufwendigste ist, werden auch die technischen Schranken aufgezeigt, denen diese Arbeit unterlag. Die darauf folgenden Abschnitte führen die Anwendung des Lokalisierungskriteriums und die Bestimmung dessen Skalenverhaltens vor, womit die Phasendiagramme des Metall-Isolator-Übergangs erstellt werden können. Die Arbeit verwendet als Lokalisierungskriterium das Skalenverhalten des zweiten Moments der Wahrscheinlichkeitsdichte, der sog. Inverse Participation Number (IPN). Anschließend wird noch anhand ausgewählter Systeme die Anwendbarkeit der multifraktalen Analyse (MFA) innerhalb dieses methodischen Rahmens diskutiert, wofür die Berechnung von verschiedenen positiven und negativen rationalen Momenten der Wahrscheinlichkeitsdichte notwendig ist.

4.1. Berechnung der Eigenzustände

Wie bereits erwähnt, wird für den Metall-Isolator-Übergang eine kontinuierliche Veränderung der Eigenzustände von ausgedehnten zu lokalisierten Wellenfunktionen verantwortlich gemacht. Um den Lokalisierungscharakter der Zustände zu ermitteln, müssen also zunächst sämtliche Eigenzustände des Hamiltonoperators (3.1) bestimmt werden¹. Dies geschieht durch die numerische Lösung der Schrödingergleichung

$$\mathbb{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (4.1)$$

in einer endlichen Ortsbasis $\{|n\rangle\}$, die durch die N orthonormalen Basiszustände an den N Gitterplätzen des Systems (Wannier-Zustände) gegeben ist.

Matrizelemente

Aus dem Operator \mathbb{H} wird in der gewählten Ortsbasis eine $N \times N$ -Matrix \underline{H} , die durch einen numerischen Algorithmus diagonalisiert werden kann. Zunächst muss also diese

¹Es existieren auch Ansätze, die die Berechnung der Eigenzustände umgehen [AF05, LT75, Mil00, RS03, YH02].

4.1. Berechnung der Eigenzustände

Matrix aufgestellt werden. Für die einzelnen Matrixelemente gilt

$$\langle n_1 | \mathbf{H} | n_2 \rangle = \epsilon_{n_1} \delta_{n_1, n_2} - V(1 - \delta_{n_1, n_2}^{(NN)}) \quad , \quad (4.2)$$

wobei das zweite Kronecker-Delta nur für solche Zustände (n_1, n_2) den Wert 0 ergeben soll, deren Gitterplätze nächste Nachbarn sind. Diejenigen Matrixelemente, die solche Paare benachbarter Gitterplätze verbinden, erhalten also den Eintrag $-V$, und auf der Hauptdiagonalen befinden sich die N zufällig gewählten Potentiale ϵ_n (Abb. 4.1-4.3). Man spricht daher auch von diagonaler Unordnung. Da die Matrix nur aus reellen Einträgen besteht und zudem symmetrisch zur Hauptdiagonalen ist, werden auch die Eigenwerte und die Entwicklungskoeffizienten der Eigenzustände in der gewählten Basis, die der Algorithmus zurück liefert, ausschließlich reell sein.

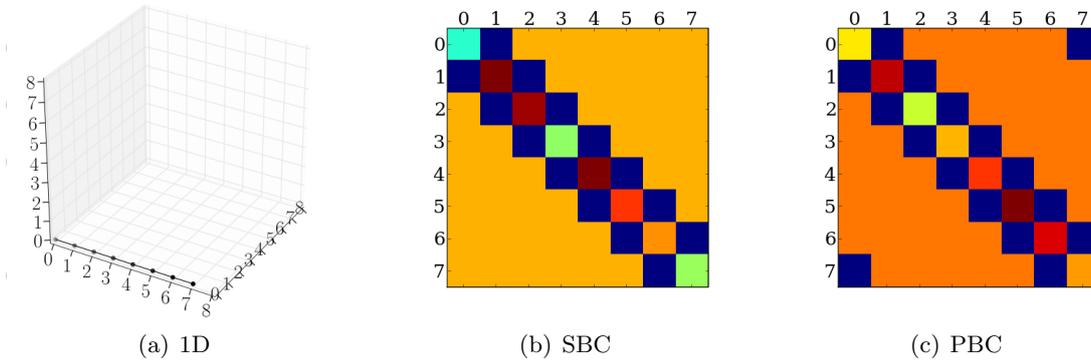


Abbildung 4.1.: Grafische Veranschaulichung der Hamilton-Matrix des eindimensionalen Anderson-Modells mit 8 Gitterplätzen mit (b) statischen und (c) periodischen Randbedingungen. Gezeigt ist auch das zugrunde liegende Gitter (a). Die Farben entsprechen unterschiedlichen reellen Zahlenwerten, wobei die Nullelemente in orange und die Hopping-Matrixelemente in dunkelblau dargestellt sind.

Randbedingungen

Bei der Frage, bei welchen Ortszuständen (n_1, n_2) es sich um nächste Nachbarn handelt, spielt auch noch die Wahl der Randbedingungen eine entscheidende Rolle. Der Fall starrer Randbedingungen (manchmal auch statische Randbedingungen genannt) ist zunächst der intuitivste, da jeder in der Natur vorkommende Festkörper eine endliche Ausdehnung besitzt und selbstverständlich an der Oberfläche endet. Für jede Wellenfunktion $\psi(x)$ in einem eindimensionalen System der Länge L gilt unter starren Randbedingungen

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \quad . \quad (4.3)$$

Reale Festkörper sind aber in der Regel (außer vielleicht bei Nanostrukturen) makroskopisch groß. Jeder Kubikzentimeter enthält eine Anzahl von Atomen, die in der

4. Numerische Methoden

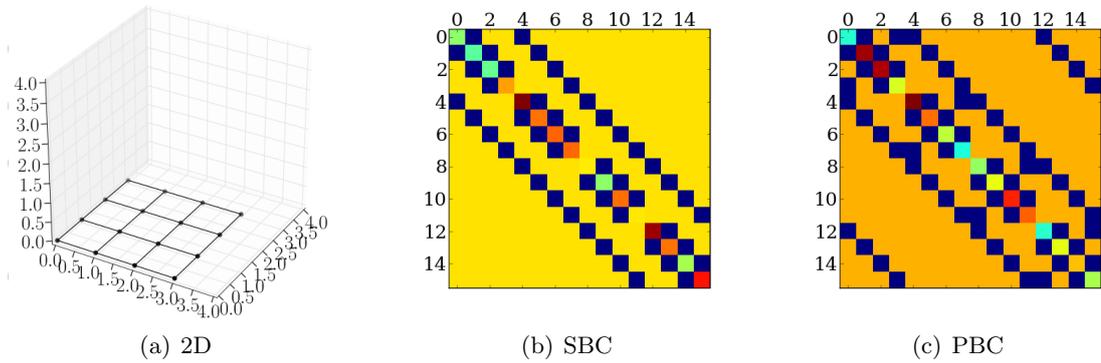


Abbildung 4.2.: Grafische Veranschaulichung der Hamilton-Matrix des zweidimensionalen Anderson-Modells mit $4 \times 4 = 16$ Gitterplätzen mit (b) statischen und (c) periodischen Randbedingungen. Gezeigt ist auch das zugrunde liegende Gitter (a). Die Farben entsprechen unterschiedlichen reellen Zahlenwerten, wobei die Nullelemente in orange und die Hopping-Matrixelemente in dunkelblau dargestellt sind.

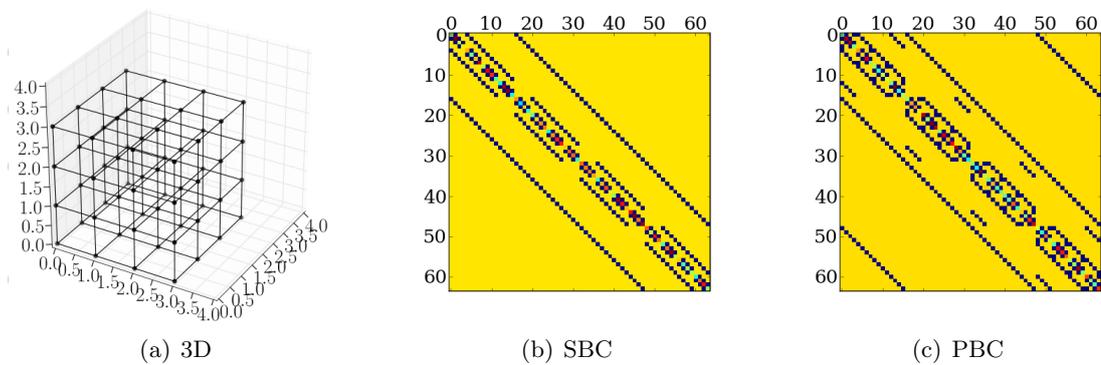


Abbildung 4.3.: Grafische Veranschaulichung der Hamilton-Matrix des dreidimensionalen Anderson-Modells mit $4 \times 4 \times 4 = 64$ Gitterplätzen mit (b) statischen und (c) periodischen Randbedingungen. Gezeigt ist auch das zugrunde liegende Gitter (a). Die Farben entsprechen unterschiedlichen reellen Zahlenwerten, wobei die Nullelemente in orange und die Hopping-Matrixelemente in dunkelblau dargestellt sind.

Größenordnung 10^{23} liegt. So unvorstellbar große Systeme können auf absehbare Zeit (und selbst darüber hinaus) vermutlich niemals in einer Computersimulation numerisch behandelt werden. Es existieren heute bereits Arbeiten, die ähnliche Tight-Binding-Modelle mit $240^3 \approx 10^7$ Gitterplätzen betrachten [VRR08], allerdings nur unter Verwendung anderer hocheffizienter Diagonalisierungsmethoden. Die größten Systeme, die in dieser Arbeit betrachtet werden, bestehen aus nur etwa 5100 Gitterplätzen. Bei so kleinen Systemen werden die Eigenschaften der Eigenzustände schon maßgeblich durch Oberflächeneffekte beeinflusst, die bei realen Festkörpern makroskopischer Ausdehnung kaum auftreten, da der überwiegende Teil der Gitterplätze weit genug von den Oberflächen entfernt liegt.

Um die Einflüsse der Oberflächen auf die Zustände kleiner Systeme zu minimieren, werden in dieser Arbeit periodische Randbedingungen verwendet. Dabei wird das Modellsystem an seinen Begrenzungsflächen periodisch fortgesetzt, so dass das Kristallgitter prinzipiell den gesamten d -dimensionalen Raum ausfüllt. Für eine Eigenwellenfunktion $\psi(x)$ in einem eindimensionalen System der Länge L lautet die Bedingung dann

$$\psi(x + L) = \psi(x) \quad . \quad (4.4)$$

Konkret heißt dies für ein Elektron in einem Tight-Binding-Modell, dass es von einem Gitterplatz, das an einem Rand des Gitters liegt, zu einem anderen Gitterplatz, das sich genau an der gegenüberliegenden Seite des Gitters befindet, übergehen kann. Die beiden gegenüberliegenden Gitterplätze werden damit also zu nächsten Nachbarn erhoben. In der Hamilton-Matrix äußert sich dies, indem auch diejenigen Matrixelemente, die solche gegenüberliegenden Paare von Gitterplätzen verbinden, mit dem Hopping-Parameter $-V$ besetzt werden (siehe Abb. 4.1-4.3).

Beim Einsatz von periodischen Randbedingungen muss berücksichtigt werden, dass sich die Eigenschaften der berechneten Eigenzustände nach wie vor auf das System endlicher Größe N beziehen, und nicht auf das durch die periodischen Randbedingungen vermeintlich unendlich große. Der Zustand mit der geringsten Energie (Grundzustand) wird z. B. im Fall von starren Randbedingungen nie einen gewissen Wert unterschreiten können, wie man sich im eindimensionalen Fall leicht vergegenwärtigen kann, da die größte auftretende Wellenlänge nicht das Doppelte der größten longitudinalen Ausdehnung L des Systems überschreiten kann.

Besetzung der Matrix

Es wurde ein Algorithmus entwickelt, der die nächsten Nachbarn in einem Punktgitter findet und die Matrix entsprechend der gewählten Randbedingungen mit den Zufallspotentialen ϵ_n und den Hopping-Parametern V_{n_1, n_2} besetzt. Dieses Skript stellt einen der beiden zeitintensivsten Rechenschritte dar, denn erstens wurde es in einer Interpretersprache geschrieben (Python) und konnte nicht vollständig vektorisiert werden, und zweitens wurde es relativ allgemein gehalten².

²So können bei ein und demselben System je Dimension unterschiedliche Randbedingungen vorgegeben werden und die Atome können eine beliebige Position im Raum einnehmen, müssen also kein

4. Numerische Methoden

Die Zeit und der Bedarf an Arbeitsspeicher (*engl.* Random-access memory, RAM), die das Skript zum Besetzen von Matrizen unterschiedlicher Größe $N \times N$ auf den verschiedenen Maschinen (siehe Tab. 4.1) in etwa benötigt, sowie der ungefähre Platzbedarf auf der Festplatte (*engl.* hard disk drive, HDD) zum Ablegen der berechneten Matrizen sind in Tabelle 4.2 aufgeführt. Die erforderliche Festplattenspeicherplatz ist moderat, da die Matrizen dünn besetzt sind und somit im Sparse-Format abgespeichert werden können, einem Format, in dem nur Informationen über diejenigen Matrixelemente gespeichert werden, die verschieden von Null sind.

Tabelle 4.2.: Benötigter Arbeitsspeicher (RAM) und benötigte Rechenzeit T zur Besetzung von $N \times N$ -Matrizen eindimensionaler Tight-Binding-Modelle mit N Gitterplätzen (periodische Randbedingungen) auf den zur Verfügung stehenden Rechenmaschinen A-D, sowie benötigter Festplattenspeicher (HDD) zur Aufbewahrung der Ergebnisse in komprimierten Dateien.

N	RAM [MiB]	T [s]			HDD [KiB]
		A	B/C	D	
500	48	4	3	7	20
900	120	12	11	23	40
1300	226	25	24	54	56
1700	379	42	40	80	72
2700	735	114	103	251	104
5100	2903	488	431	876	200

Diagonalisierung der Matrix

Die Diagonalisierung der Matrix \underline{H} zur Bestimmung der Eigenwerte und Eigenvektoren wird mit Hilfe von Standardroutinen aus dem LAPACK (Linear Algebra PACKage) durchgeführt [ABB⁺99]. Da die Matrix symmetrisch ist und nur aus reellen Elementen besteht, kommt die Funktion `scipy.linalg.eigh` zum Einsatz, die eine Schnittstellenfunktion für entsprechend geeignete Routinen aus dem LAPACK darstellt. Bei SciPy handelt es sich um ein Erweiterungsmodul für die Programmiersprache Python [Oli07], die eine Bibliothek von wissenschaftlichen Rechenhilfsmitteln bereitstellt [JOP⁺07]. Zur Berechnung werden also im Hintergrund schnelle, in einer Compilersprache implementierte Routinen benutzt.

Wegen der Bestimmung des kompletten Eigenwert- und vor allem des kompletten Eigenvektorspektrums der Matrix ist das Verfahren sehr speicherintensiv. Die Größe eines Systems (Anzahl Gitterplätze N) ist durch den auf der Rechenmaschine zur Verfügung

regelmäßiges Gitter bilden. Es könnte mit diesem Skript also auch strukturelle Unordnung untersucht werden. Außerdem ist das Auffinden von nächsten Nachbarn beliebiger Ordnung möglich (zweitnächste Nachbarn etc.).

stehenden Arbeitsspeicher begrenzt, denn eine $N \times N$ -Matrix besitzt N Eigenvektoren der Länge N . Die Eigenvektoren bilden also wieder eine $N \times N$ -Matrix, die aber nicht – wie die Hamilton-Matrix – dünn besetzt ist und daher nicht als Sparse-Matrix abgespeichert werden kann, sondern vielmehr als Dense-Matrix aufbewahrt werden muss. Immerhin können die Daten komprimiert abgelegt werden (ZIP-Speicherformat), was evtl. etwas Speicherplatz spart. Typische Rechenzeiten und Speicherbelegungen sind in Tabelle 4.3 aufgeführt.

Tabelle 4.3.: Benötigter Arbeitsspeicher (RAM) und benötigte Rechenzeit T zur Diagonalisierung von $N \times N$ -Matrizen eindimensionaler Tight-Binding-Modelle mit N Gitterplätzen (periodische Randbedingungen) auf den zur Verfügung stehenden Rechenmaschinen A-D, sowie benötigter Festplattenspeicher (HDD) zur Aufbewahrung der Ergebnisse in komprimierten Dateien.

N	RAM [MiB]	T [s]			HDD [MiB]
		A	B/C	D	
500	31	1	1	1	2
900	49	6	4	8	6
1300	61	19	15	24	13
1700	108	45	39	57	22
2700	193	213	203	308	56
5100	667	1497	1427	1583	199

Die Anzahl der Systeme und damit auch die Genauigkeit und der Umfang der Ergebnisse, die in dieser Arbeit berechnet werden konnten, wurde nicht so sehr durch die Laufzeit oder den Arbeitsspeicherbedarf der Algorithmen, sondern vielmehr durch den zur Verfügung stehenden Massenspeicher (Festplatte) begrenzt, da ein großer Parameterraum durchfahren wird und für jede Parameterkombination noch mehrere Realisierungen des Zufallssystems berechnet werden müssen. Viele andere Arbeiten beschränken sich oft auf einen ganz bestimmten Ausschnitt des Parameterraums oder berechnen mit iterativen Methoden nur einige wenige Eigenzustände innerhalb eines bestimmten Bandbereichs (z. B. auf das Bandzentrum, wie in [VRR08]). Auch werden in einigen anderen Arbeiten Methoden verwendet, für die die speicherlastigen Eigenvektoren gar nicht bestimmt werden müssen [LT75, RS03].

Der Speicherplatz auf den zur Verfügung stehenden Rechenanlagen beschränkte sich im Fall dieser Arbeit auf etwa 700 GiB. Einzige Alternative, diese Begrenzung zu umgehen, wäre der Verzicht auf den Datenerhalt von Zwischenergebnissen, was aber eine wissenschaftliche Entwicklungsarbeit eher behindert hätte, da u. U. bestimmte Daten im Laufe des Erkenntnisfortschritts wieder neu berechnet werden müssten. Gerade die durch die Diagonalisierung ermittelten Eigenzustände verbrauchen aber nicht nur den meisten Speicherplatz, sondern erfordern auch die meiste Erstellzeit. Um keine Daten vorzeitig löschen zu müssen, muss daher sorgfältig ausgewählt werden, für welchen Parameterbe-

reich wie viele Realisierungen benötigt werden, um eine gewisse Mindestgenauigkeit der Ergebnisse trotz des begrenzten Festplattenspeichers nicht zu unterschreiten.

Parallelisierung

Sowohl der Algorithmus zur Besetzung der Matrizen als auch der verwendete Diagonalisierungsalgorithmus sind nicht parallelisierbar, d. h. sie können nicht von Multiprozessor-CPU profitieren. Der Grund liegt in der verwendeten Version³ der Programmiersprache Python [Oli07], die generell keine Parallelisierung erlaubt.

Eine einfache Form der Parallelisierung ist dennoch möglich, indem mehrere Python-Skripte parallel gestartet werden, je nach Anzahl von Prozessorkernen des jeweiligen Computers und verfügbarem Arbeitsspeicher (vgl. Tab. 4.1). Die parallele Ausführung mehrerer Skripte ist für die Untersuchung ungeordneter Systeme fast genauso zweckmäßig, da immer mehrere Systeme zu verschiedenen Parameterkombinationen und nicht zuletzt mehrere Realisierungen ein und desselben Systems berechnet werden müssen. Der einzige Nachteil besteht darin, dass bei einer Parallelausführung mehrerer Skripte der Arbeitsspeicher aufgeteilt und von den laufenden Skripten gemeinsam genutzt wird, was ggf. dazu führen kann, dass nicht alle Prozessorkerne ausgenutzt werden können. Ein größeres Verhältnis Arbeitsspeicher pro Prozessorkern wäre daher für diese Art der Parallelisierung von Vorteil.

In Abbildung 4.4 sind die Performance-Daten aus den Tabellen 4.2 und 4.3 grafisch dargestellt. In Grafik 4.4a wird deutlich, dass der Arbeitsspeicherverbrauch bei der Besetzung der Matrix (mh) besonders stark mit der Systemgröße skaliert. Dadurch kann es für die größte betrachtete Systemgröße $N = 5100$ selbst bei den 8 GiB RAM der Rechner B und C dazu kommen, dass sich nicht mehr als zwei Prozesse (bei vier vorhandenen Prozessorkernen) zur gleichen Zeit mit dieser Aufgabe beschäftigen können, und bei den Rechnern A und D nur ein Prozess (bei zwei vorhandenen Prozessorkernen). Ein gewisses Potential zur weiteren Optimierung sowohl hinsichtlich der Speichernutzung als auch hinsichtlich der Ausführungsdauer ist bei diesem Skript allerdings auch nicht ausgeschlossen.

In Abbildung 4.4b ist der benötigte Festplattenspeicherplatz zum Abspeichern der Ergebnisse der beiden Skripte dargestellt. Die Größe der abzuspeichernden Sparse-Matrix (mh) geht nur linear mit der Systemgröße N , da nur die Matrixelemente verschieden von Null abgespeichert werden. Bei den Elementen handelt es sich zum einen um die Diagonalmatrixelemente mit den Potentialen ϵ_n , deren Anzahl genauso hoch ist wie die Systemgröße, und um die Hopping-Matrixelemente $-V$, deren Anzahl abhängig von der Dimensionalität d des Systems $4d$ beträgt, der doppelten Anzahl der nächsten Nachbarn (3.12) im verwendeten Modell (Koordinationszahl, siehe Tab. 3.1, S. 23). Es liegt also insgesamt ein proportionaler Zusammenhang vor. Der Speicherplatz zur Archivierung der Eigenwerte und Eigenvektoren (eev) hingegen geht im Wesentlichen mit dem Quadrat der Systemgröße, da neben dem Eigenwertvektor der Länge N vor allem eine vollbesetzte $N \times N$ -Matrix abgespeichert werden muss, die die N Eigenvektoren der Länge N enthält.

³Version 2.5.1 vom 18.04.2007.

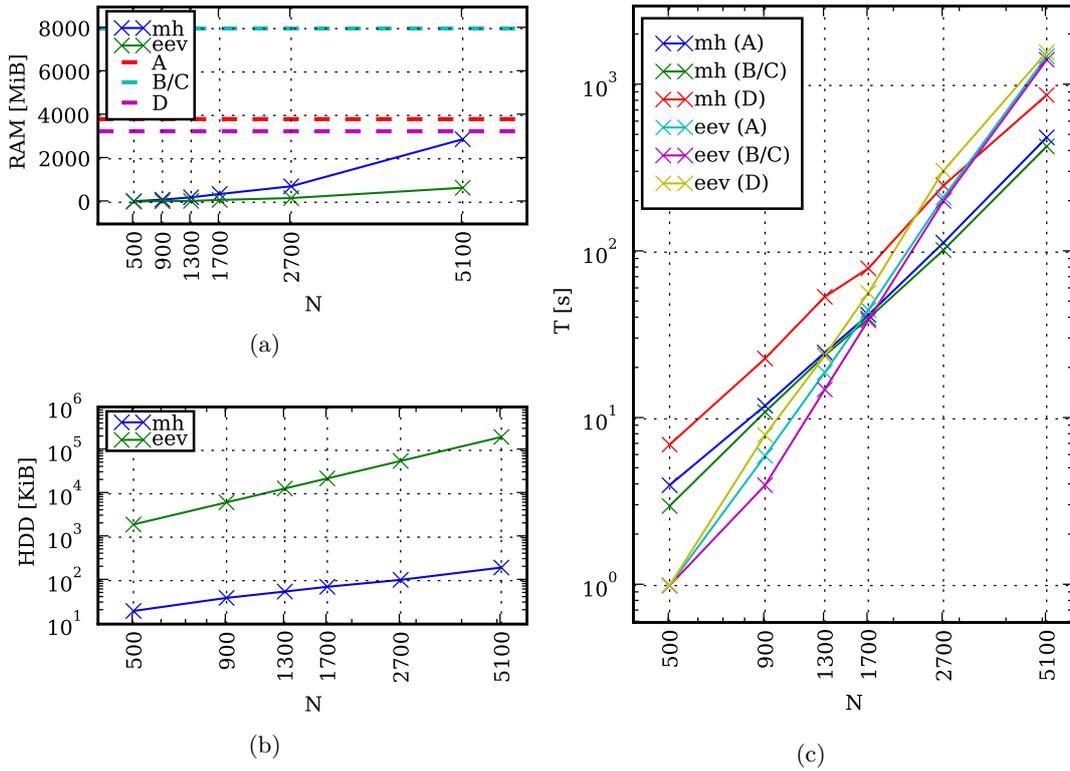


Abbildung 4.4.: Benötigter Arbeitsspeicher (RAM), Festplattenspeicher (HDD) und Rechenzeiten T von Besetzung (mh) und Diagonalisierung (eev) von $N \times N$ -Matrizen eindimensionaler Tight-Binding-Modelle im Vergleich. Bei der Arbeitsspeichernutzung (RAM) ist auch der jeweils verfügbare Arbeitsspeicher auf den Rechnern A-D angegeben.

4. Numerische Methoden

Folglich besitzt der lineare Zusammenhang in der doppelt logarithmischen Auftragung rund die doppelte Steigung. Eine leichte Reduktion des Speicherplatzbedarfs könnte sich eventuell durch die verwendete Datenkomprimierung (ZIP-Format) ergeben.

Abbildung 4.4c zeigt die Ausführungsdauer T der beiden Skripte (mh, eev) auf einem Prozessorkern der verschiedenen Rechner A-D. Neben der unterschiedlichen Geschwindigkeit der Prozessoren ist vor allem erkennbar, dass die Diagonalisierung (eev) stärker (mit höherer Potenz) mit der Systemgröße N skaliert als die Besetzung der Matrix (mh). Während die Diagonalisierung für kleine Systeme schneller von statten geht als die Matrixerzeugung, sind die Ausführungszeiten bei Systemgrößen von etwa 2000 vergleichbar, und für noch größere Systeme dauert die Diagonalisierung länger als die Besetzung der Matrix, bis zu drei mal so lange im Fall $N = 5100$.

Eigenwertspektrum

Es sollen nun die numerisch ermittelten Eigenwerte näher untersucht werden. In Abbildung 4.5 sind die Eigenwertspektren mehrerer Zufallsrealisierungen eines Anderson-Systems mit schwacher Unordnung ($W/V = 10$) gezeigt. Um die Effekte deutlich zu machen, wird ein sehr kleines System mit nur $4 \times 4 \times 4 = 64$ Gitterplätzen gewählt. Als Zufallsverteilung dient die Boxverteilung (3.2). Die jeweils n -ten Energieniveaus von jeder der fünf gezeigten Realisierungen sind durch gestrichelte Linien verbunden. Dadurch wird folgendes deutlich:

- Durch die Zufallspotentiale sind auch die Eigenwerte zufällig verteilt.
- Auch die Bandkanten unterscheiden sich von Realisierung zu Realisierung.
- Der mittlere Abstand zwischen den einzelnen Energien ist in der Bandmitte am geringsten und nimmt zu den Bandkanten hin zu. Das niedrigste (Grundzustand) und das höchste Energieniveau besitzen einen besonders hohen Abstand zum benachbarten Energieniveau.
- Manche Eigenwerte formen Gruppen, allerdings ebenfalls an zufälligen Energien. Gehört der n -te Eigenwert in einer Realisierung zu einer bestimmten Gruppe von Eigenwerten, so kann er in einer anderen Realisierung schon einer anderen oder gar keiner Gruppe angehören.

Die theoretischen Bandkanten bei einer Unordnung von $W/V = 10$ und einem dreidimensionalen System, dessen Bandkanten ohne Unordnung bei $(-6V, 6V)$ liegen würden (vgl. Tab. 3.1), liegen bei $(-11V, 11V)$. Diese werden aber bei einer so geringen Anzahl von Realisierungen wie in Abbildung 4.5 kaum erreicht. Um sich ihnen wenigstens anzunähern, müsste eine sehr große Anzahl von Realisierungen berechnet werden. Durch die unendliche Anzahl von Mikrozuständen (mögliche Kombinationen der Zufallspotentiale ϵ_n) im Anderson-Modell ist dies aber so gut wie unmöglich. Die Zustandsdichte ist für dreidimensionale Systeme am Rand gerade am geringsten. Dadurch ist es extrem unwahrscheinlich, dass Eigenwerte in der Nähe der theoretischen Bandkanten $(-11V, 11V)$ auftauchen.

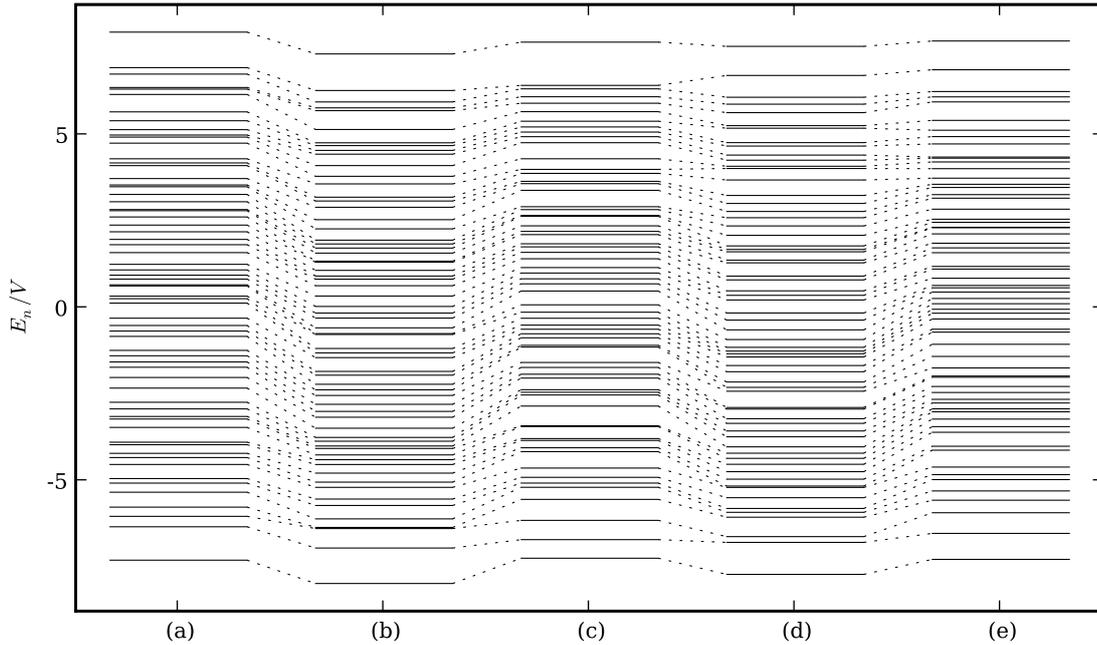


Abbildung 4.5.: Eigenwertspektren verschiedener Realisierungen eines dreidimensionalen Anderson-Modells (a-e).

In Abbildung 4.6 wird jeweils eine Realisierung des Beispielsystems zu unterschiedlicher Unordnung W gezeigt. Aus ihr wird ersichtlich, woher die Gruppen von Eigenwerten stammen: Sie sind ein Überbleibsel der Entartung, die bei idealen Kristallen ($W = 0$) vorliegt. Des weiteren geht aus der Abbildung hervor:

- Ohne Unordnung ($W = 0$) weisen alle Zustände bis auf die niedrigste und die höchste Energie mehrfache Entartung auf.
- Für steigende Unordnung ($W > 0$) wird die Entartung aufgehoben, und es entstehen zunächst Gruppen von Eigenwerten (*engl.* bunching effect), die bei noch stärkerer Unordnung in eine homogene Verteilung übergehen.
- Die Bandkanten verschieben sich immer weiter nach außen (Bandverbreiterung, *engl.* band broadening).

In Abbildung 4.7 sind die Eigenwerte zu Systemen mit fester Unordnung $W/V = 10$, aber unterschiedlicher Systemgröße N gezeigt. Es ist erkennbar, dass sich sowohl die Bandkanten als auch die allgemeine Verteilung der Energieniveaus nicht wesentlich mit der Systemgröße ändern. Fluktuationen der Bandkanten sind dem Umstand zuzuschreiben, dass hier nur eine einzelne Realisierung jedes Systems gezeigt ist. Die Dichte der Eigenwerte steigt selbstverständlich mit der Systemgröße. Wird die Zustandsdichte aber auf die Systemgröße normiert, ergibt sich kein wesentlicher Unterschied.

4. Numerische Methoden

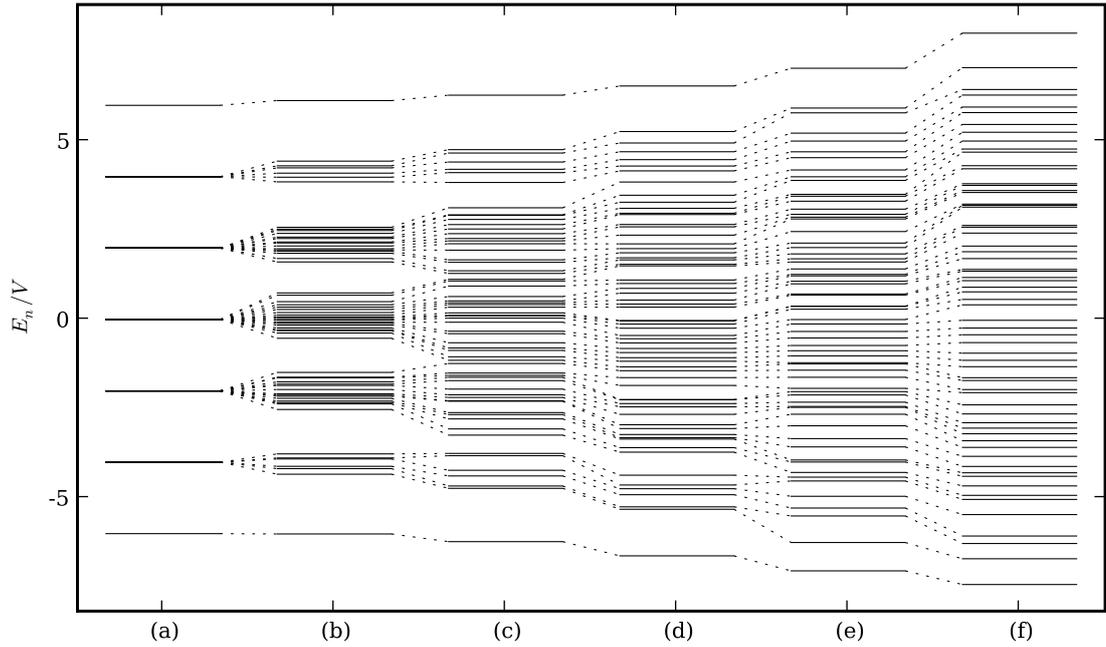


Abbildung 4.6.: Eigenwertspektrum eines dreidimensionalen Anderson-Modells bei steigender Unordnung $W/V \in \{0, 2, 4, 6, 8, 10\}$ (a-f).

Die Zustandsdichte

$$\rho(E) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \delta(E - E_j) \quad (4.5)$$

gibt an, wie viele der N Zustände mit Energie E_j sich in einem infinitesimal kleinen Energieintervall $[E, E + dE]$ befinden. Zur numerischen Bestimmung der Zustandsdichte kann die Energieachse von Bandkante zu Bandkante in I Intervalle diskretisiert werden. In jedem Intervall i der Breite Δ_i wird die Anzahl der Eigenwerte c_i bestimmt, die darin liegen. Der Wert der Zustandsdichte in diesem Intervall beträgt dann

$$\rho_i = \frac{c_i}{\Delta_i C} \quad (4.6)$$

Der Faktor

$$C = \sum_{i=1}^I c_i \quad (4.7)$$

stellt die Anzahl der Intervalle dar und sorgt dafür, dass die Zustandsdichte (4.6) gemäß

$$\sum_{i=1}^I \Delta_i \rho_i = 1 \quad (4.8)$$

auf den Wert 1 normiert ist. Besitzen alle Intervalle dieselbe Breite $\Delta_i \equiv \Delta_0$, vereinfacht sich (4.6) zu

$$\rho_i = \frac{c_i}{2B} \quad , \quad (4.9)$$

wobei $B = \frac{1}{2}C\Delta_0$ die halbe Bandbreite (3.11) ist.

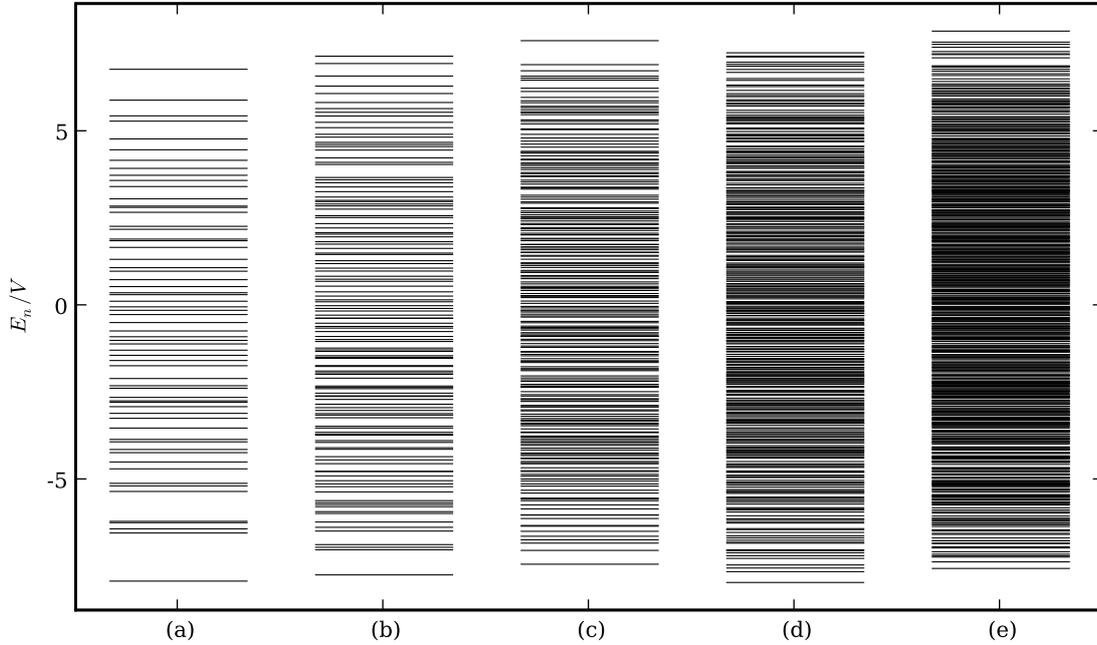


Abbildung 4.7.: Eigenwertspektrum eines dreidimensionalen Anderson-Modells mit $W/V = 10$ bei steigender Systemgröße $N = L^3$ für $L \in \{4, 5, 6, 7, 8\}$ (a-e).

Abbildung 4.8 zeigt die Zustandsdichten der Beispielsysteme unterschiedlicher Unordnung, deren Eigenwertspektren in Abbildung 4.6 gezeigt sind. Die Energieachse wurde dazu jeweils in Intervalle konstanter Breite unterteilt und der Wert der Zustandsdichte in jedem Intervall mit Hilfe von Gleichung (4.9) bestimmt. Auch hier wird die Verbreiterung des Bandes (*engl.* band broadening) sowie das Verschwinden der Entartung und die Aufweichung der Gruppen von Eigenwerten (*engl.* bunching effect) mit steigender Unordnung deutlich. Damit die Normierung (4.8) erfüllt ist, wird die Zustandsdichte mit steigender Verbreiterung und homogener Verteilung der Eigenwerte gleichzeitig immer flacher.

Darstellung der Eigenzustände

Um die Eigenzustände der untersuchten Systeme grafisch darzustellen, kann die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\underline{r})|^2$ gegen den Ort \underline{r} aufgetragen werden. In der gewählten Ortsbasis, die aus den N Gitterplätzen aufgespannt wird, müssen die numerisch ermittelten

4. Numerische Methoden

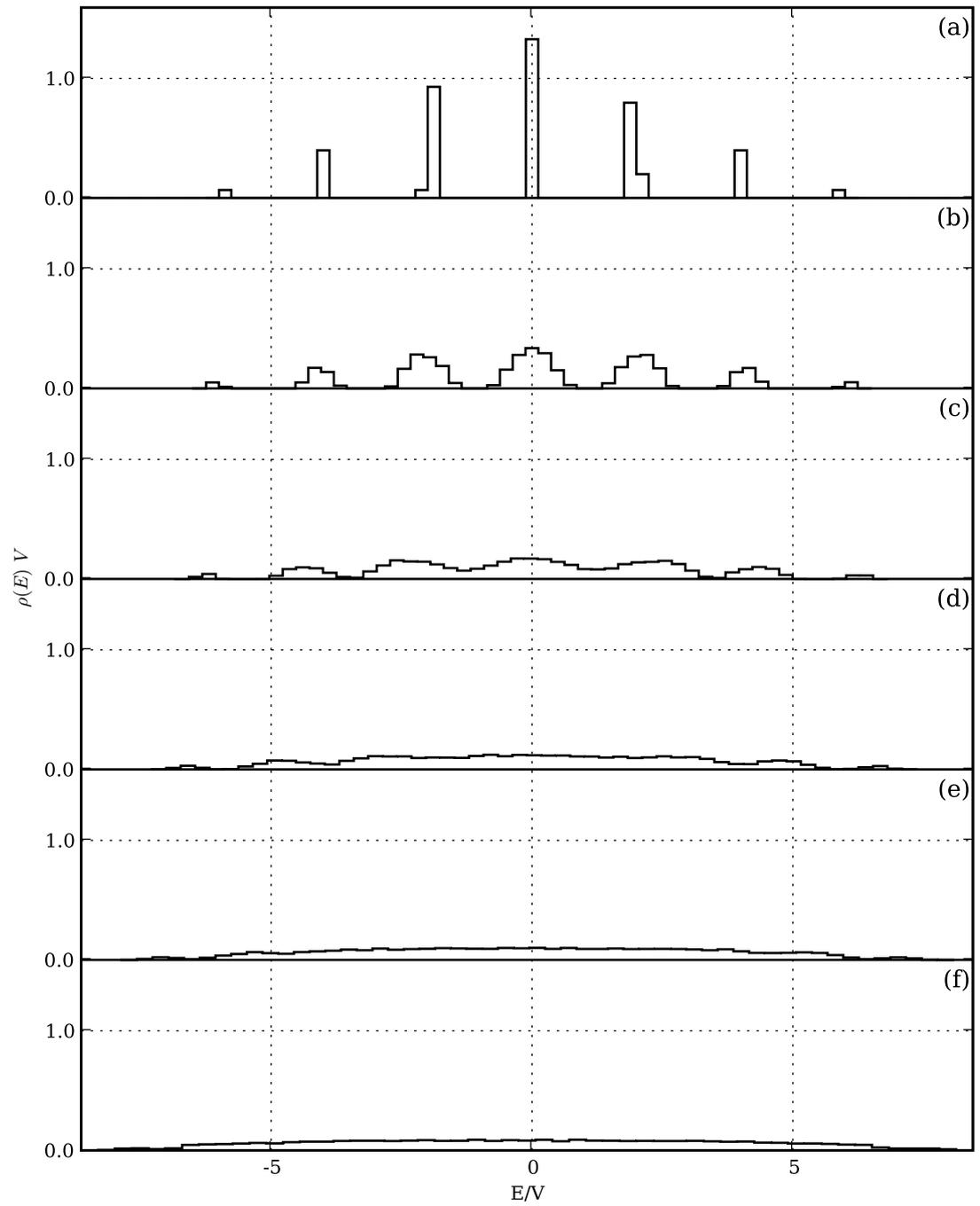


Abbildung 4.8.: Zustandsdichte des dreidimensionalen Anderson-Modells mit verschiedenen Unordnungsparametern $W/V \in \{0, 2, 4, 6, 8, 10\}$ (a-f).

Entwicklungskoeffizienten also lediglich quadriert werden ($|\psi_i|^2$), denn die Projektion der Entwicklungskoeffizienten auf das im Realraum befindliche Gitter ergibt zusammen mit der verwendeten Ortsbasis aus an den Gitterplätzen befindlichen Wannier-Funktionen gerade die gewünschte Darstellung im Ortsraum. In Abbildung 4.9 ist beispielhaft ein Zustand eines dreidimensionalen Systems gezeigt.

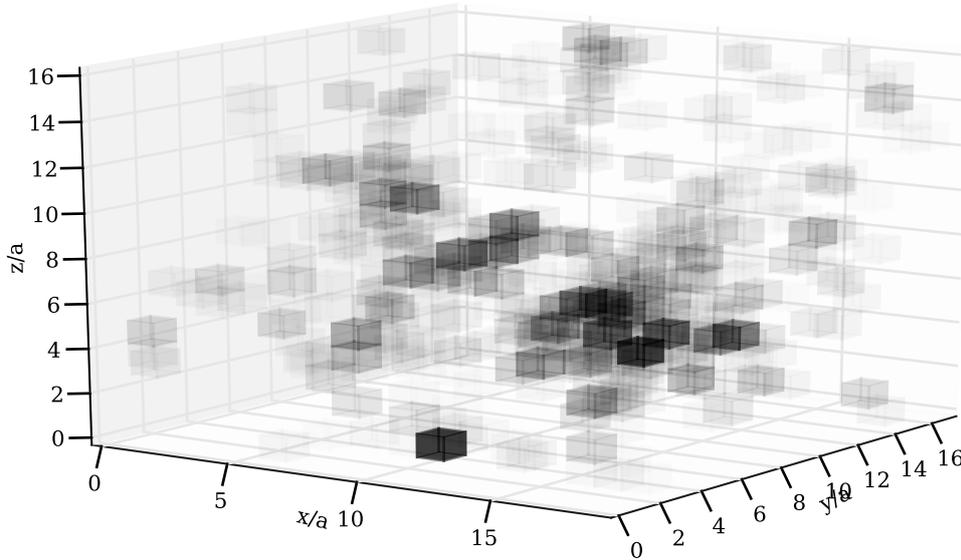


Abbildung 4.9.: Darstellung eines Zustands für $W/V = 18$ in der Bandmitte des dreidimensionalen Tight-Binding-Modells mit $19 \times 17 \times 16 = 5168$ Gitterplätzen und normalverteiltem Potential. An jeden Gitterplatz n wird ein Würfel mit Kantenlänge a gesetzt, dessen Transparenz (α -Wert) proportional zur Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_n|^2$ gewählt wird. Die Positionen (x, y, z) sind in Einheiten der Gitterkonstanten a angegeben.

4.2. Lokalisierungskriterien

Nachdem die Eigenwerte und Eigenzustände berechnet worden sind, soll für jeden einzelnen Zustand entschieden werden, ob es sich um einen lokalisierten oder einen ausgedehnten Zustand handelt. Nur so kann auf den Phasenübergang zwischen diesen beiden Regimes geschlossen werden. Ziel ist es, jedem Zustand einen einzelnen Zahlenwert (ein Maß) zuzuweisen, der den Lokalisierungsgrad des Zustands direkt angibt. Allerdings ist eine eindeutige Unterteilung in ausgedehnte und lokalisierte Zustände nicht möglich; der Übergang ist vielmehr fließend. Es kann nur der Lokalisierungscharakter eines Zustands

4. Numerische Methoden

angegeben werden, der jeden beliebigen Wert zwischen absolut homogener Ausdehnung über den Kristall hinweg und perfekter Lokalisierung an nur einem einzigen Gitterplatz annehmen kann.

Es existieren verschiedene Ansätze zur Wahl einer geeigneten Größe. Zum Beispiel könnte für jeden Zustand ψ_i eine Lokalisierungslänge λ_i berechnet werden. Dieses Konzept geht von der Annahme aus, dass lokalisierte Wellenfunktionen von der Form

$$\psi_i(\underline{r}) = f(\underline{r}) e^{-\frac{|\underline{r}|}{\lambda_i}} \quad (4.10)$$

sind, ihre Einhüllenden also mit $e^{-|\underline{r}|/\lambda_i}$ exponentiell abfallen (siehe Abb. 4.10). Es existieren Arbeiten, die für jeden Eigenzustand die Lokalisierungslänge berechnen und diese als Maß für den Lokalisierungscharakter der Zustände verwenden [Mil00, RS03].

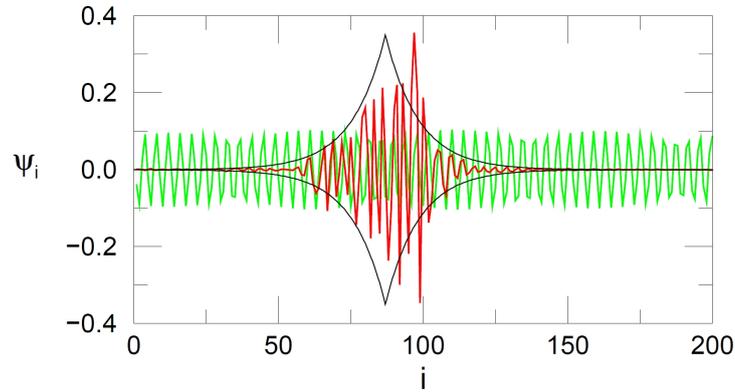


Abbildung 4.10.: Ausgedehnte (grün) und lokalisierte (rot) Eigenfunktion eines eindimensionalen Systems. In schwarz ist die Einhüllende der lokalisierten Eigenfunktion angedeutet. Quelle: [Mil00].

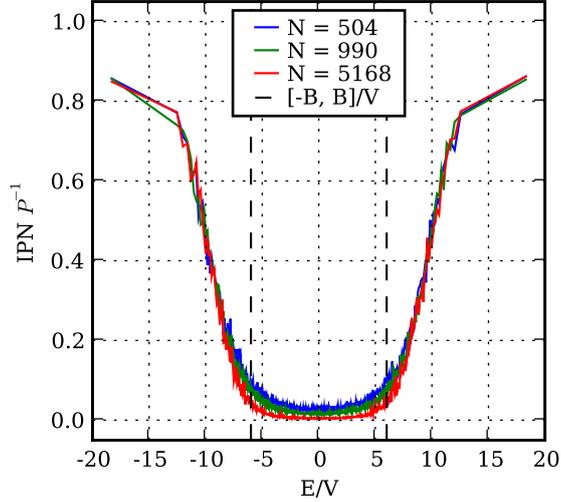
Ein anderer Ansatz misst die Zahl der Basiszustände, die maßgeblich zu einem Zustand beitragen, bzw. bei nur einem Basiszustand je Gitterplatz die Zahl der Gitterplätze, an denen die Wahrscheinlichkeitsdichte des Zustands $|\psi_j|^2$ einen merklich von Null verschiedenen Wert besitzt. Diese Größe wird Participation Number P (PN, *dt.* etwa 'Beteiligungszahl') genannt [Sch85b]. Ihr Inverses, die Inverse Participation Number P^{-1} (IPN), ist das zweite Moment der Wahrscheinlichkeitsdichte,

$$P^{-1}(E) = \frac{\left\langle \sum_{j=1}^N \delta(E - E_j) \sum_{n=1}^N |\psi_{j,n}|^4 \right\rangle}{\left\langle \sum_{j=1}^N \delta(E - E_j) \right\rangle} \quad [\text{Sch85b}]. \quad (4.11)$$

Dabei ist $\psi_{j,n}$ der n-te Entwicklungskoeffizient des j-ten Eigenzustands mit dazugehörigem Eigenwert E_j . Im Nenner von (4.11) steht gerade die Zustandsdichte (4.5). Die

Funktion $P^{-1}(E)$ gibt an, wie hoch die IPN der Eigenzustände in Abhängigkeit von ihren Eigenenergien E ist. Das typische Aussehen der Funktion $P^{-1}(E)$ ist beispielhaft für verschiedene Systemgrößen N in Abbildung 4.11 gezeigt.

Abbildung 4.11: IPN P^{-1} in Abhängigkeit von der Energie E für verschiedene Systemgrößen N eines dreidimensionalen Systems mit Unordnung $W/V = 16$ und normalverteilten Gitterpotentialen. Durch die gestrichelten Senkrechten sind die Bandkanten $-B = -6V$ und $B = 6V$ des geordneten Systems ($W = 0$) markiert.



Die spitzen Klammern in Gleichung (4.11) symbolisieren die Bildung des Ensemble-Mittelwerts über alle möglichen Unordnungsrealisierungen des Systems. Da in der Praxis nicht alle Realisierungen des Systems berechnet werden können, stellt diese Mittelung eine Näherung dar. Die Ensemble-Mittelung über verschiedene Realisierungen des Zufallsystems geschieht in dieser Arbeit einfach dadurch, dass die R berechneten Realisierungen des Systems der Größe N zu einem einzigen Datensatz mit RN Eigenwerten und RN IPN-Werten zusammengelegt werden und somit in die Formeln Einzug finden.

Auf dem diskreten Gitter des Tight-Binding-Modells vereinfacht sich Gleichung (4.11) zu

$$P_j^{-1} = \sum_{n=1}^N |\psi_{j,n}|^4 \quad . \quad (4.12)$$

Damit kann jedem Zustand $\underline{\psi}_j$ eine PN P_j zugeordnet werden. Aus der Funktion $P(E)$ wird ein Vektor \underline{P} mit Elementen P_j . Der Wertebereich der PN erstreckt sich zwischen 1 und N . Zu einem ausgedehnten Zustand trägt jeder Gitterpunkt bei (Abb. 4.12), die PN erreicht daher den Wert N . Ist die PN kleiner als N , liegt ein zu einem gewissen Grad lokalisierter Zustand vor. Im Extremfall eines perfekt lokalisierten Zustands ist nur noch ein $\psi_{j,n}$ an einem Gitterplatz verschieden von Null, und die PN erreicht ihr Minimum 1.

Für den Wertebereich der IPN müssen im wesentlichen nur die Kehrwerte berechnet werden. Somit erstreckt sich der Wertebereich der IPN zwischen N^{-1} (ausgedehnte Zustände) und 1 (stark lokalisierte Zustände). Im Grenzfall unendlicher Systemgröße kann die IPN Werte zwischen 0 und 1 annehmen, während die PN für ausgedehnte Zustände linear divergiert. Daher wird der IPN gegenüber der PN bei der Auswertung der Vorzug gegeben.

4. Numerische Methoden

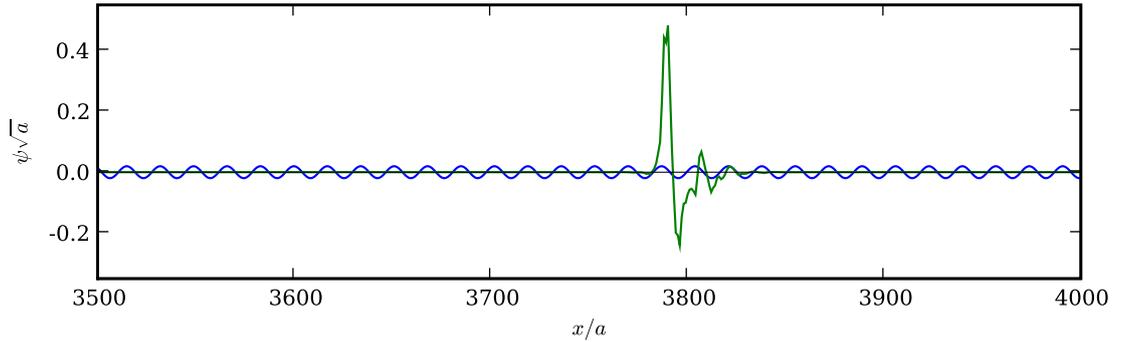


Abbildung 4.12.: Ausgedehnter (blau, $W = 0$) und lokalisierter (grün, $W > 0$) Eigenzustand des eindimensionalen Anderson-Modells mit $N = 5100$ Gitterplätzen (Ausschnitt). Die Ortskoordinate x ist in Einheiten der Gitterkonstanten a angegeben.

In der Literatur wird z. T. auch der Participation Ratio (PR, *dt.* etwa 'Beteiligungsanteil') verwendet [FM93]. Sein Inverses, der Inverse Participation Ratio (IPR), ist definiert als

$$p_j^{-1} = N \sum_{n=1}^N |\psi_{j,n}|^4 . \quad (4.13)$$

Der PR ist gewissermaßen eine auf 1 normierte PN, indem diese gemäß $p = P/N$ durch die Systemgröße N geteilt wird [Weg80]. Er beschreibt den Anteil der Gitterplätze eines Systems, die effektiv zum Eigenzustand beitragen. Aufgrund der Wertebereiche ist diesmal der PR das günstigere Lokalisierungsmaß, da der IPR bei lokalisierten Zuständen für $N \rightarrow \infty$ divergiert. Tabelle 4.4 gibt einen Überblick über die vier Lokalisierungsmaße und ihre Wertebereiche.

4.3. Skalenverhalten

Mit Hilfe der Lokalisierungskriterien aus dem vorigen Abschnitt kann nun eine Einschätzung darüber gegeben werden, welchen Lokalisierungscharakter die einzelnen Eigenzustände der berechneten Systeme besitzen. Die berechenbaren Systeme beschränken sich aber – je nach Aufwand und Vermögen der vorhandenen Rechnertechnologie – auf eine endliche Systemgröße N . Von eigentlichem Interesse sind jedoch die Eigenschaften des makroskopischen Systems, dessen Eigenschaften näherungsweise mit denen eines unendlichen Systems ($N = \infty$) gleichgesetzt werden können. Ob ein Zustand $\psi_j(x)$ zu einer bestimmten Energie E_j als lokalisiert oder ausgedehnt angesehen werden kann, hängt vom Verhalten seines Lokalisierungsmaßes für $N \rightarrow \infty$ ab (Finite Size Scaling, FSS).

Jedes endliche System besitzt Zustände, deren IPN noch keinen Aufschluss darüber gibt, ob er ins ausgedehnte oder ins lokalisierte Regime tendiert. Zum Beispiel könnten Zustände an einer Energie E existieren, deren IPN für eine kleine Systemgröße N einen

Tabelle 4.4.: Lokalisierungskriterien, ihre Wertebereiche, und ihre Grenzwerte im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$.

	PN P	IPN P^{-1}	PR p	IPR p^{-1}
Definition	$P^{-1} = \sum_{n=1}^N \psi_n ^4$		$p^{-1} = N \sum_{n=1}^N \psi_n ^4$	
ausgedehnt	N	$\frac{1}{N}$	1	1
lokalisiert	$1 \leq P < N$	$\frac{1}{N} < P^{-1} \leq 1$	$\frac{1}{N} \leq p < 1$	$1 < p^{-1} \leq N$
maximal lokalisiert	1	1	$\frac{1}{N}$	N
$\lim_{N \rightarrow \infty}$ ausgedehnt	∞	0	1	1
$\lim_{N \rightarrow \infty}$ lokalisiert	1	1	0	∞

Wert nahe $1/N$ besitzt, aber für höhere Systemgrößen nicht gemäß $1/N$ abfällt, sondern konstant bleibt und also doch als lokalisiert identifiziert werden muss. Dies ist dann der Fall, wenn der Zustand eine Lokalisierungslänge λ besitzt, die für kleinere Systemgrößen zunächst größer ist als das System selbst ($\lambda \gg L$). Solche schwach lokalisierten Zustände existieren prinzipiell in jedem endlichen System. Eine Reihe von Zuständen, die in der Nähe der Mobility Edges liegen, verhalten sich zunächst wie die übrigen ausgedehnten Zustände gemäß $1/N$, um dann für größere N davon abzuweichen und in einen konstanten Zusammenhang überzugehen. Je größer die betrachteten Systeme sind, desto sicherer kann also anhand des Skalenverhaltens der IPN der wahre Charakter der Zustände an einer bestimmten Energie ermittelt werden, und die Eingrenzung des wahren Phasenübergangs gelingt immer besser. Darin liegt die besondere Stärke von iterativen Methoden zur Bestimmung des Phasenübergangs, wie z. B. der Transfermatrixmethode (TMM) [MK81, KM93, Mil00, RS03, ZSEG85], begründet, denn bei ihnen vergrößert der Algorithmus die Systeme so lange, bis der Phasenübergang mit der gewünschten Genauigkeit bestimmt ist.

In Tabelle 4.4 sind die Grenzwerte $\lim_{N \rightarrow \infty}$ für die verschiedenen Lokalisierungsmaße angegeben. Das Skalenverhalten der IPN kann beispielsweise durch Bestimmung des Exponenten β ermittelt werden, der durch das Potenzgesetz

$$P^{-1} \propto N^\beta \quad (4.14)$$

definiert ist. Ist $\beta = -1$, so liegt gerade das $1/N$ -Verhalten vor, das auf ausgedehnte Zustände hinweist. Wird hingegen $\beta = 0$ bestimmt, ist die IPN für steigendes N offenbar eine Konstante, und es kann auf einen lokalisierten Zustand geschlossen werden. Darüber hinaus können in der Nähe der Mobility Edges auch Exponenten gefunden werden, die zwischen 0 und 1 liegen, da sie zu Zuständen gehören, deren Lokalisierungscharakter

4. Numerische Methoden

bei der betrachteten maximalen Systemgröße N_{\max} (in dieser Arbeit etwa 5100) nicht zweifelsfrei geklärt werden kann, aber zumindest die Tendenz erkennen lässt. Durch Definition eines geeigneten Cutoff-Parameters β_c können die beiden Regimes dennoch näherungsweise voneinander getrennt werden.

Prinzipiell kann jedes der Lokalisierungsmaße verwendet werden, um das Skalenverhalten zu ermitteln, und es kann auch das Skalenverhalten gegenüber der longitudinalen Ausdehnung L des Systems anstelle der Systemgröße N untersucht werden. Der Unterschied der ermittelten Exponenten liegt dann nur in einem gewissen Faktor, der die Systemgröße N oder die Dimensionalität d des Systems enthalten kann oder das Vorzeichen umkehrt. Für ein d -dimensionales System (sc) gilt

$$N = \prod_{m=1}^d L_m \quad . \quad (4.15)$$

Für ein annähernd würfelförmiges System ($L_1 \approx L_2 \approx L_3$) kann die longitudinale Systemausdehnung durch $L \approx \sqrt[3]{N}$ abgeschätzt werden.

Fraktale Dimension

Wird das Skalenverhalten der PN bezüglich der longitudinalen Systemausdehnung untersucht,

$$P \propto L^\tau \quad , \quad (4.16)$$

so lässt sich der Exponent τ als fraktale Dimension auffassen [Sch85a, VRR08]. Sie ist stets kleiner oder gleich der einbettenden Dimension d des Systems, der Wertebereich von τ erstreckt sich also von 0 bis d . Besitzt ein Zustand eines dreidimensionalen Systems eine fraktale Dimension von $\tau = 3$, so handelt es sich um einen ausgedehnten Zustand, bei $\tau < 3$ um einen lokalisierten und bei $\tau = 0$ um einen perfekt lokalisierten 'nulldimensionalen' Zustand. In dieser Arbeit wird gemäß Gleichung (4.14) das Skalenverhalten der IPN gegenüber der Systemgröße N bestimmt. Der Exponent β kann dann durch den einfachen Zusammenhang

$$\tau = -d\beta \quad (4.17)$$

in die fraktale Dimension τ umgerechnet werden.

Für die Wahl des Cutoff-Parameters τ_c , der lokalisierte und ausgedehnte Zustände voneinander trennt und somit die Lage der Mobility Edges festlegt, werden in der Literatur Argumente für $\tau_c = 2$ gegeben [Sch85a]. Im nächsten Kapitel wird zu klären sein, ob dieses Kriterium kompatibel mit Literaturwerten für die Mobility Edges E_c und die kritische Unordnung W_c ist.

Abbildung 4.13 verdeutlicht das Prinzip, wie die Mobility Edges durch Einführen eines Cutoff-Parameters τ_c bestimmt werden können. Für verschiedene Unordnungen W ist die fraktale Dimension τ gegen die Energie E aufgetragen. Der Cutoff-Parameter $\tau_c = 2$ ist markiert. Die Mobility Edges E_c können als Schnittpunkte der Kurven mit der konstanten Geraden $\tau(E) = 2$ abgelesen werden. In der Abbildung können auch schon wesentliche Merkmale des Anderson-Übergangs beobachtet werden: Für $W = 0$

erstreckt sich die Kurve zunächst nur von $-6V$ bis $6V$ und liegt in etwa konstant bei $\tau = 3$; sämtliche Zustände sind ausgedehnt. Für höhere Unordnung liegen nur noch die Zustände in der Nähe der Bandmitte ($E = 0$) in der Nähe von $\tau = 3$, während die Zustände an den Bandkanten des sich verbreiternden Bandes schon unterhalb des Cutoff-Parameters liegen und somit von diesem Kriterium als lokalisiert erkannt werden. Ab der Kurve für $W = 20V$ liegen sämtliche Werte vollständig unterhalb des Cutoff-Parameters; die kritische Unordnung W_c wurde also überschritten und alle Zustände sind lokalisiert.

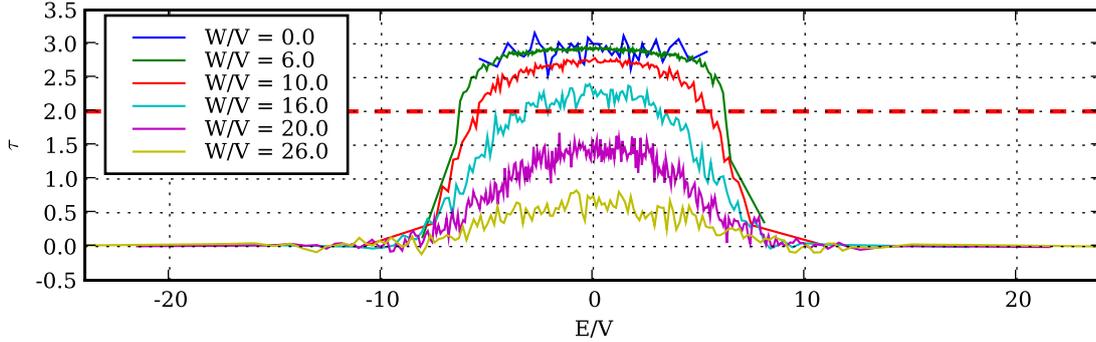


Abbildung 4.13.: Abhängigkeit der fraktalen Dimension τ von der Energie E in einem dreidimensionalen Anderson-Modell mit Hopping-Parameter $-V$ für verschiedene Unordnungsstärken W . Die gestrichelte rote Horizontale markiert den hier gewählten Cutoff-Parameter $\tau_c = 2$.

Mittelung über Energieintervalle

Um das Skalenverhalten des Lokalisierungsmaßes (IPN) zu bestimmen, muss die IPN für feste Energie E gegen die Systemgröße N aufgetragen werden. Dies ist aber nicht so einfach möglich, wie Abbildung 4.7 (S. 43) deutlich macht, da die Eigenenergien ja für jede Realisierung der Zufallspotentiale zufällig verteilt sind und nicht zuletzt weil Systeme unterschiedlicher Größe N ohnehin eine unterschiedlich hohe Anzahl von Eigenzuständen besitzen (nämlich gerade N Stück). Eine Möglichkeit, dieses Problem zu umgehen, besteht darin, die Energieachse in Intervalle einzuteilen und für jedes Intervall aus den IPN-Werten P_j^{-1} , deren Eigenenergien E_j innerhalb des Intervalls liegen, eine gemittelte IPN zu bestimmen. Aus den n_i Wertepaaren (E_j, P_j^{-1}) , die im i -ten Intervall liegen, entsteht also ein neues Wertepaar $(\bar{E}_i, \bar{P}_i^{-1})$, wobei als neue Energie \bar{E}_i einfach der Mittelpunkt

$$\bar{E}_i = \frac{\Gamma_i + \Gamma_{i+1}}{2} \quad (4.18)$$

der Intervallgrenzen Γ_i und Γ_{i+1} des i -ten Intervalls gewählt werden kann. Des weiteren dienen die Intervalle dem Ausgleich von Fluktuationen, die in den IPN-Daten aufgrund des Zufallscharakters der betrachteten Systeme immer vorhanden sind (siehe Abb. 4.13).

4. Numerische Methoden

Im Prinzip kann die Menge der IPN-Werte zu jeder festen Energie als Stichprobe einer Grundgesamtheit aufgefasst werden, die sich durch die unendlich vielen Kombinationsmöglichkeiten des Zufallspotentials im Anderson-Modell ergibt. Zur Berechnung des Mittelwerts kann also – zunächst unabhängig von einer möglicherweise zugrunde liegenden Häufigkeitsverteilung – das arithmetische Mittel

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n P_j^{-1} \quad (4.19)$$

(auch empirischer Mittelwert oder Stichprobenmittel genannt) herangezogen werden. Es stellt in der empirischen Statistik [BSMM00] einen erwartungstreuen Schätzer für den Erwartungswert dar. Je mehr Stichproben aus der Grundgesamtheit gezogen werden, d. h., je mehr Realisierungen des ungeordneten Systems berechnet werden, desto genauer wird der Stichprobenmittelwert μ mit dem theoretischen Erwartungswert übereinstimmen. Wie gut der Erwartungswert durch den Mittelwert abgeschätzt wird, ist durch den Standardfehler des arithmetischen Mittels

$$\vartheta = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \quad (4.20)$$

gegeben. n ist der Umfang der Stichprobe, also die Anzahl der IPN-Werte innerhalb des betrachteten Energieintervalls, und σ die empirische Standardabweichung, deren Quadrat die empirische Varianz

$$\sigma^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (P_j^{-1} - \mu)^2 \quad (4.21)$$

darstellt. Auch die empirische Varianz ist erwartungstreu, ist also eine Schätzfunktion für die wahre Varianz der Grundgesamtheit. Der Standardfehler ϑ wird demnach durch die Streuung der IPN-Werte – gegeben durch die Standardabweichung σ – und durch die Anzahl n der IPN-Werte beeinflusst. Je mehr Realisierungen berechnet werden, desto genauer kann der wahre Erwartungswert durch den Mittelwert abgeschätzt werden.

Bestimmung der fraktalen Dimension

Wird Gleichung (4.14) logarithmiert, ergibt sich

$$\log_2(P^{-1}) = \text{const} + \beta \log_2(N) \quad . \quad (4.22)$$

Der Exponent β aus kann also für jedes Energieintervall als Steigung in einer doppelt-logarithmischen Auftragung der (gemittelten) IPN P^{-1} gegen die Systemgröße N ermittelt werden. Dabei ist es unerheblich, zu welcher Basis der Logarithmus gebildet wird. In dieser Arbeit wird der Logarithmus zur Basis 2 verwendet. In Abbildung 4.14 ist erkennbar, dass die logarithmierten Wertepaare $(\log_2(N), \log_2(P^{-1}))$ innerhalb des ungestörten Bandes $E/V = [-6, 6]$ tatsächlich sehr exakt auf einer Geraden liegen (Abb.

4.14a), außerhalb jedoch, in den äußeren Ausläufern des durch die Unordnung verbreiterten Bandes, von der Geraden doch erheblich abweichen können (Abb. 4.14b).

In der Abbildung wird der Standardfehler (4.20) dazu benutzt, einen Fehler für die gemittelte IPN \bar{P}^{-1} anzugeben. Dabei erstrecken sich die Fehlerbalken über das Intervall $[\mu - \vartheta, \mu + \vartheta]$. Wären die IPN wenigstens annähernd normalverteilt, würde es sich dabei um das erste σ -Intervall handeln, so dass also 68,3 % der Werte innerhalb dieses Intervalls lägen. Welcher Verteilung die IPN tatsächlich unterliegen, wird im nächsten Abschnitt untersucht.

Durch die Fehlerbalken ist erkennbar, dass der Standardfehler ϑ für die IPN-Mittelwerte im äußeren Bandbereich (Abb. 4.14b) grundsätzlich größer ist als für die Werte im Bandzentrum (Abb. 4.14a), dass also der Erwartungswert der IPN für die äußeren Bandbereiche durch den empirischen Mittelwert (4.19) nicht so gut geschätzt werden kann wie für Bereiche näher an der Bandmitte. Es sei noch bemerkt, dass für die Unordnungen $W/V \in \{0, 6, 10\}$ in Abbildung 4.14b noch keine Zustände auftauchen, da sich das Band für diese Unordnungsstärken noch nicht bis $E/V = 16$ verbreitert hat.

Der Exponent β wird durch Anwendung einer linearen Regression mit der Modellfunktion einer Geraden ($y = \beta x + \text{const}$) auf die logarithmierten Daten ermittelt, woraus dann mit Gleichung (4.17) die fraktale Dimension τ berechnet werden kann. Der verwendete Algorithmus liefert auch Konfidenzintervalle für Steigung β und Ordinatenabschnitt für ein Vertrauensniveau von 95 %. Mit ihrer Hilfe können in Abbildung 4.14 nicht nur die Regressionsgeraden, sondern auch Fehlergeraden eingezeichnet werden, die der maximalen und der minimalen Steigung entsprechen, innerhalb derer sich die Steigung β der gesuchten Geraden mit einer Wahrscheinlichkeit von 95 % befinden sollte. Dabei muss beachtet werden, dass die Fehlerbalken der einzelnen Datenpunkte, die im Diagramm gezeigt sind, innerhalb der derzeitigen Implementation keinerlei Einfluss auf die Regression finden. Alle Punkte werden also vom Regressionsalgorithmus gleich gewichtet. Die Fehlergeraden bzw. der Fehlerwert für die Steigung β werden nur dadurch beeinflusst, in welchem Maße die Datenpunkte von der gefundenen Geraden abweichen.

Verteilung der IPN

Um die Häufigkeitsverteilung der IPN zu fester Energie (innerhalb eines nicht zu breiten Energieintervalls) zu bestimmen, werden die IPN innerhalb eines Intervalls um die Bandmitte herum (für genügend viele Realisierungen bzw. genügend große Systeme) in einem Histogramm aufgetragen (Abb. 4.15).

Wie sich zeigt, zeichnet sich bei der Häufigkeitsverteilung der IPN tatsächlich eine Tendenz ab. Es handelt sich allerdings nicht um eine symmetrische Wahrscheinlichkeitsverteilung (wie z. B. die Normalverteilung), sondern ist offenbar rechtsschief. Wie sich herausstellt, unterliegen die IPN zu fester Energie einer logarithmischen Normalverteilung. Diese beschreibt die Verteilung einer Zufallsvariablen, deren Logarithmus normalverteilt ist [BSMM00]. Werden der empirische Mittelwert μ (4.19) und die empirische Varianz σ^2 (4.21) in die Definition der Wahrscheinlichkeitsdichte (*engl.* probability den-

4. Numerische Methoden

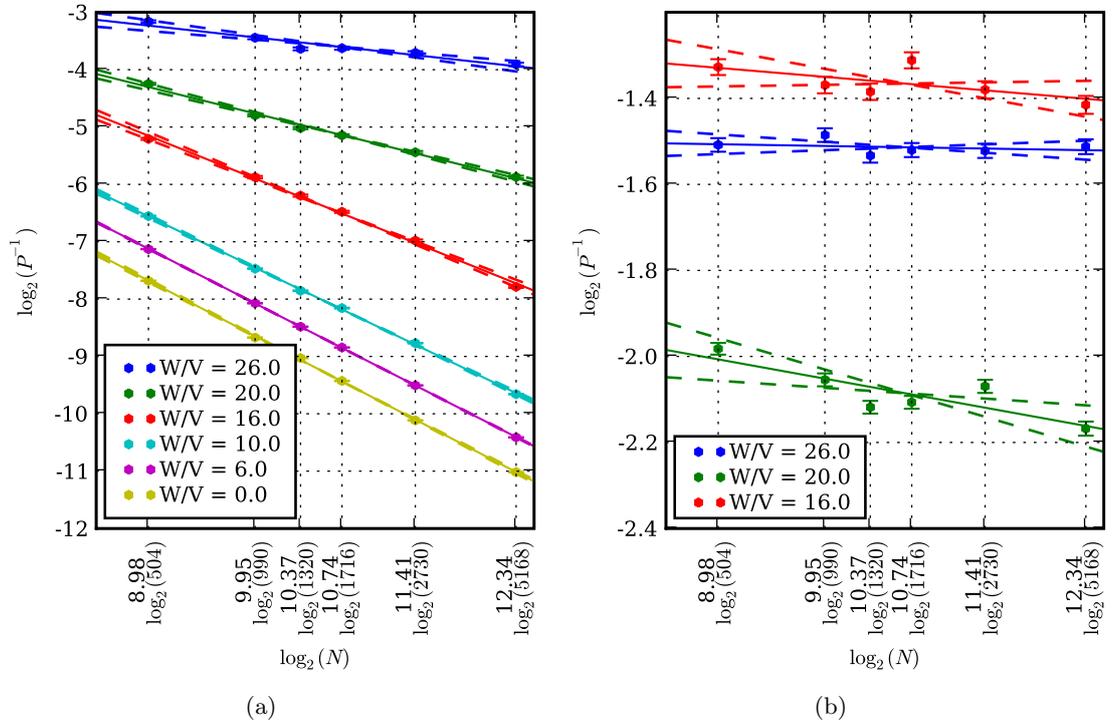


Abbildung 4.14.: Doppelt-logarithmische Auftragung der gemittelten IPN \bar{P}^{-1} gegen die Systemgröße N für unterschiedliche Unordnungen $W/V \in \{0, 6, 10, 16, 20, 26\}$ für Intervalle (a) in der Bandmitte ($E/V = 0$) und (b) im Randbereich des verbreiterten Bandes ($E/V = 16$). Die Datenpunkte besitzen als Fehlerbalken den Standardfehler des empirischen Mittelwerts (4.20). Durch eine lineare Regression ermittelte Geraden mit Steigung β sind eingezeichnet (durchgezogene Linien), sowie Fehlergeraden (gestrichelte Linien), die dem 95%-Vertrauensintervall für β entsprechen.

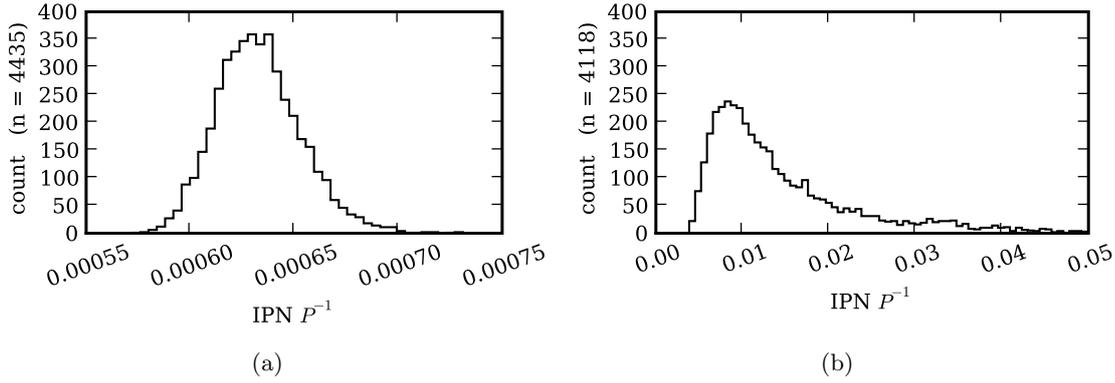


Abbildung 4.15.: Histogramm der IPN-Rohdaten innerhalb eines kleinen Energieintervalls um die Bandmitte $\bar{E} = 0$ für die Unordnungsstärken (a) $W/V = 4$ und (b) $W/V = 20$ zur Systemgröße $N = 19 \times 17 \times 16 = 5168$. Mit angegeben ist auch der Stichprobenumfang n (Anzahl der Eigenwerte innerhalb des betrachteten Intervalls).

sity function, PDF) der logarithmischen Normalverteilung

$$\mathcal{LN}(x; \mu, \sigma^2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma x} e^{-\frac{(\ln(x)-\mu)^2}{2\sigma^2}} & , \quad x > 0 \\ 0 & , \quad x \leq 0 \end{cases} \quad (4.23)$$

eingesetzt und die Histogrammdata aus Abb. 4.15 auf 1 normiert, so ergibt sich eine gute Übereinstimmung mit dem Histogramm (Abb. 4.16). Die logarithmische Normalverteilung erreicht ihren maximalen Wert

$$\begin{aligned} f_{\max} &= \mathcal{LN}(x_{\max}; \mu, \sigma^2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{\frac{\sigma^2}{2} - \mu} \end{aligned} \quad (4.24)$$

bei

$$x_{\max} = e^{\mu + \frac{\sigma^2}{2}} \quad . \quad (4.25)$$

Ihr theoretischer Erwartungswert liegt bei

$$e^{\mu + \frac{\sigma^2}{2}} \quad (4.26)$$

und ihre theoretische Varianz bei

$$e^{2\mu + \sigma^2} (e^{\sigma^2} - 1) \quad . \quad (4.27)$$

Wie bereits erwähnt, stellen der empirische Mittelwert μ (4.19) und die empirische Varianz (4.21) erwartungstreue Schätzer für den Erwartungswert (4.26) und die Varianz

4. Numerische Methoden

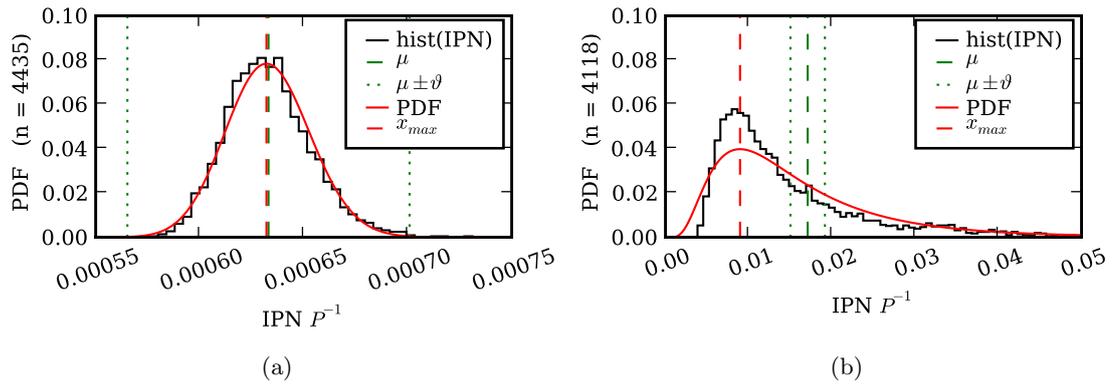


Abbildung 4.16.: Histogramm der IPN-Rohdaten innerhalb eines Energieintervalls in der Bandmitte um $\bar{E} = 0$ bei (a) schwacher ($W/V = 4$) und (b) starker Unordnung ($W/V = 20$) zur Systemgröße $N = 19 \times 17 \times 16 = 5168$. In rot ist die logarithmische Normalverteilung $\mathcal{LN}(\mu, \sigma^2)$ zusammen mit ihrem Maximum x_{\max} dargestellt. In grün sind der Stichprobenmittelwert μ und sein Standardfehlerintervall $\mu \pm \vartheta$ eingezeichnet.

(4.27) der unbekanntten Grundgesamtheit dar. Wie gut der Erwartungswert (4.26) durch den empirischen Mittelwert μ (4.19) angenähert wird, ist durch den Standardfehler ϑ (4.20) gegeben.

Wird das Histogramm aus IPN-Werten gebildet, die aus einem Intervall stammen, das sehr breit ist, kann die gute Übereinstimmung der Histogrammdata mit der Wahrscheinlichkeitsdichte der logarithmischen Normalverteilung (4.23) verloren gehen (Abb. 4.17). Dieser Umstand ist leicht zu verstehen, denn die Verteilung der IPN gilt nur für eine feste Energie E . Für schmale Energieintervalle ist diese Bedingung immer noch näherungsweise erfüllt. Wird das Intervall aber zu breit, so liegen nicht mehr nur IPN-Werte einer Energie, sondern sehr vieler Energien in diesem Intervall. Die zugrunde liegende Wahrscheinlichkeitsverteilung entspricht dann anzunehmenderweise einer Überlagerung mehrerer logarithmischer Normalverteilungen mit unterschiedlichen Parametern μ und σ^2 . Die Bildung des empirischen Mittelwerts μ (4.19) und dessen Standardfehlers ϑ (4.20) verliert dadurch aber nicht ihre Relevanz, denn diese Größen sind unabhängig von einer möglicherweise zugrunde liegenden Wahrscheinlichkeits- oder Häufigkeitsverteilung für jede Stichprobe einer Grundgesamtheit definiert.

Wahl geeigneter Energieintervalle

Um das Skalenverhalten der IPN ermitteln zu können, muss für jede Unordnung W ein für alle Systemgrößen N (und alle dazugehörigen Realisierungen) einheitlicher Satz an Energieintervallen gefunden werden, der folgende Eigenschaften erfüllt:

- Jedes Intervall muss zu jeder Systemgröße mindestens einen Eigenwert enthalten, damit zu jeder Systemgröße überhaupt ein IPN-Wert vorliegt.

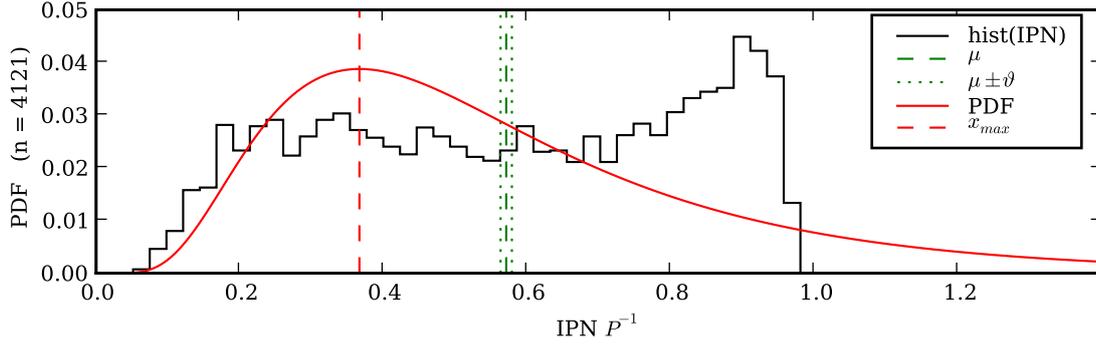


Abbildung 4.17.: Histogramm der IPN-Rohdaten innerhalb eines sehr breiten Energieintervalls an der Bandkante ($E/V = [9, 44, 27, 29]$) für Unordnungsstärke $W/V = 20$ und Systemgröße $N = 19 \times 17 \times 16 = 5168$. In rot ist die logarithmische Normalverteilung $\mathcal{LN}(\mu, \sigma^2)$ dargestellt. In grün sind der Stichprobenmittelwert μ und sein Standardfehlerintervall $\mu \pm \vartheta$ eingezeichnet.

- Jedes Intervall soll zu jeder Systemgröße eine Mindestanzahl von Eigenwerten enthalten, um Statistik betreiben zu können und damit der Standardfehler des Stichprobenmittelwerts nicht zu groß ist.
- Jedes Intervall soll zu jeder Systemgröße mindestens so viele Eigenwerte enthalten, dass auftretende Fluktuationen in den Daten der fraktalen Dimension τ ausgeglichen werden. Speziell beim Einsatz kontinuierlicher Verteilungsfunktionen für die Potentiale (Box, Normal, Lorentz) soll die Funktion $\tau(\bar{E})$ von der unteren Bandkante her monoton bis zur Bandmitte ansteigen, und danach bis zur oberen Bandkante wieder monoton fallen. Bei der binären Legierung darf die Funktion höchstens zweimal monoton steigen und wieder fallen. Nur so können die Mobility Edges E_c eindeutig anhand des Cutoffs τ_c bestimmt werden.
- Wegen der in kontinuierlichen Verteilungsmodellen enthaltenen Symmetrie sollen die Intervalle in diesem Fall symmetrisch zur Bandmitte ϵ_0 liegen und die Anzahl der Intervalle ungerade sein, und zwar so, dass das mittlere Intervall die Bandmitte ϵ_0 symmetrisch umschließt.

Um diesen Forderungen optimal nachkommen zu können, wurde ein Algorithmus entwickelt, der die Energieachse in Intervalle variabler Breite einteilt. So wird gewährleistet, dass in jedem der Intervalle zu jeder Systemgröße eine gewisse Mindestmenge an Eigenwerten liegt, um Statistik betreiben und Fluktuationen genügend ausgleichen zu können, die Intervalle aber auch nicht breiter sind als unbedingt notwendig, damit wenigstens in Bandbereichen höherer Zustandsdichte eine möglichst gute Energieauflösung erreicht wird.

In Abbildung 4.18 ist als Beispiel das Ergebnis der Intervalleinteilung zu sehen, die auf Grundlage des zuvor beschriebenen Algorithmus' erfolgt ist. In jedem Intervall befinden

4. Numerische Methoden

sich in diesem Beispiel zu jeder Systemgröße mindestens 4114 Eigenwerte, die Höchstzahl beträgt 4702. Die Differenz zwischen diesen beiden Zahlen wird durch einen nachgeschalteten Optimierungsprozess möglichst weit verringert, ohne die genannten Bedingungen zu verletzen und ohne die Intervallanzahl zu verringern.

Wie zu erwarten ist, sind die Intervalle in Bereichen höherer Zustandsdichte (in der Bandmitte) klein, während sie in Bereichen geringer Zustandsdichte (an den Bandkanten) größer sind, um noch die Mindesteigenwertanzahl für jede Systemgröße zu erreichen. Die variable Intervalleinteilung kann mit Hilfe von Gleichung (4.6) auch zur Darstellung der Zustandsdichte verwendet werden (Abb. 4.19). Die Breite der Stufen richtet sich dabei nach der Größe der Intervalle, was vor allem an den Bandkanten zu unschönen Sprüngen der Zustandsdichte führen kann, da die Stufen dort sehr breit sind.

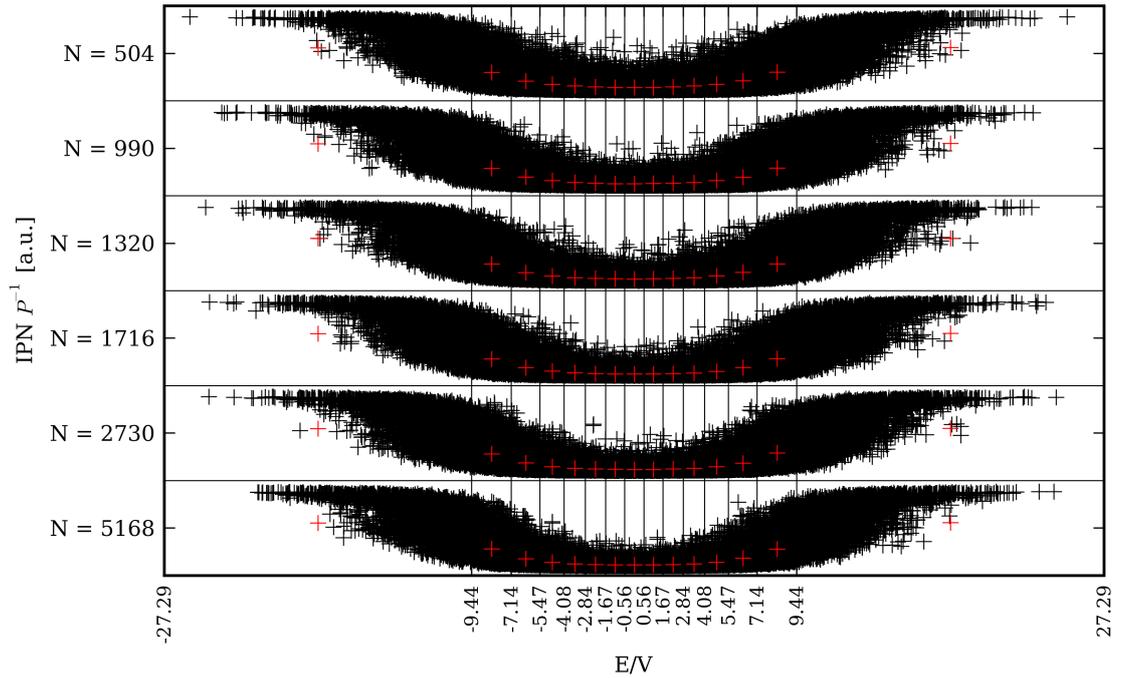


Abbildung 4.18.: Intervalleinteilung am Beispiel des Anderson-Modells mit Unordnungsstärke $W/V = 20$. Die Mindestanzahl von Eigenwerten in jedem Intervall zu jeder Systemgröße N beträgt in diesem Fall $m = 4114$. Auf der y-Achse sind die IPN-Rohdaten angedeutet (schwarze Kreuze). In rot sind die gemittelten IPN \bar{P}^{-1} am jeweiligen Intervallmittelpunkt \bar{E} eingezeichnet.

Damit der Algorithmus zur Bestimmung der Intervalle gut funktioniert, ist es zweckmäßig, zu jeder Systemgröße eine unterschiedlich hohe Anzahl von Realisierungen R zu berechnen, und zwar so, dass die Gesamtzahl der zur Verfügung stehenden Eigenwerte, also das Produkt aus Systemgröße N , was der Anzahl der Eigenwerte eines einzelnen Systems entspricht, und Realisierungen R , in etwa konstant ist ($NR \approx \text{const}$). So wird

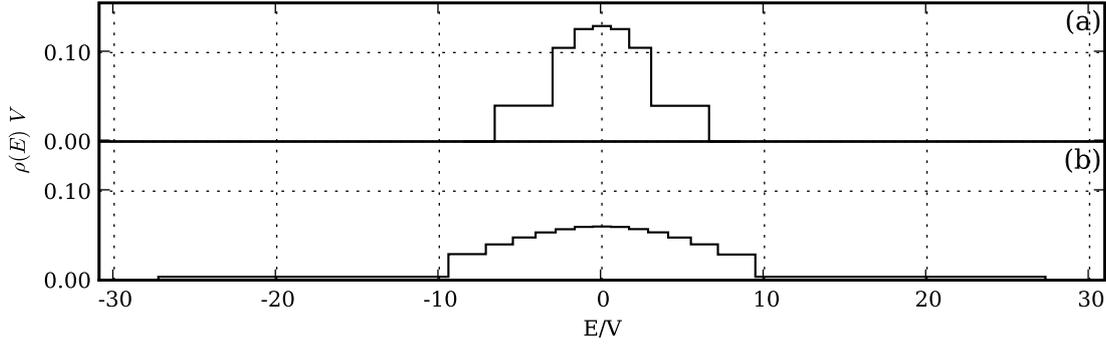


Abbildung 4.19.: Zustandsdichten eines dreidimensionalen Anderson-Modells zu den Unordnungen (a) $W/V = 4$ und (b) $W/V = 20$, dargestellt mit Hilfe der variablen Intervalleinteilung. Jede der Stufen entspricht einem der Intervalle, die Höhe jeder Stufe folgt Gleichung (4.6).

gewährleistet, dass in einem bestimmten Intervall zu jeder Systemgröße ungefähr gleich viele Eigenwerte liegen. Andernfalls, bei etwa gleicher Anzahl von Realisierungen je Systemgröße, würde die Mindestintervallbreite maßgeblich durch die kleinste Systemgröße N_0 bestimmt, und bei den größeren Systemen lägen dann ungefähr um den Faktor N/N_0 mehr Eigenwerte in jedem Intervall, als aufgrund der Anforderungen unbedingt nötig wäre.

Für ein System ohne Unordnung ($W = 0$ bei kontinuierlichen Verteilungen, $\Delta = 0$, $c_B = 0$ oder $c_B = 1$ beim Binärlegierungsmodell) existiert natürlich nur eine mögliche Realisierung. Um aber dennoch der Forderung $NR \approx \text{const}$ nachzukommen, können die Daten einfach vervielfältigt bzw. kann jeder Eigenwert als R -fach entartet angenommen werden.

4.4. Bestimmung des Phasenübergangs

In Abbildung 4.13 (Seite 51) wurde bereits das Prinzip verdeutlicht, wie in einem τ - E -Diagramm mit Hilfe eines Cutoff-Parameters τ_c , der diejenige fraktale Dimension angeben soll, die lokalisierte ($\tau < \tau_c$) von ausgedehnten ($\tau > \tau_c$) voneinander trennt, die Mobility Edges E_c als Schnittpunkte der $\tau(E)$ -Kurven mit dem Cutoff abgelesen werden können. Fluktuiert die fraktale Dimension allerdings (wie in Abb. 4.13) zu stark, können die Mobility Edges möglicherweise nicht eindeutig bestimmt werden, da τ um τ_c schwankt. Aus diesem Grund müssen die Energieintervalle so lange vergrößert werden, bis die Funktion $\tau(E)$ eine gewisse Stetigkeit besitzt. Im Fall der kontinuierlichen Verteilungsfunktionen heißt das konkret, $\tau(E)$ muss von der unteren Bandkante aus monoton bis zur Bandmitte ansteigen und danach wieder monoton bis zur oberen Bandkante abfallen. Bei binären Legierungen hängt es von der Kombination der beiden Unordnungsparameter ab, wie oft die Funktion $\tau(E)$ monoton steigen und fallen darf.

Durch diesen Vorgang können die Intervalle recht groß werden. Da eine Mobility Edge

4. Numerische Methoden

nur als Grenze zwischen zwei Intervallen abgelesen werden kann, sinkt damit auch die Genauigkeit, mit der die ME abgelesen werden können. Als Fehlerbalken kann jeweils die Hälfte der beiden angrenzenden Intervalle angenommen werden, denn ob ein Intervall schon als durchschnittlich eher lokalisiert oder als durchschnittlich eher ausgedehnt gefunden wird, hängt davon ab, ob innerhalb des Intervalls die lokalisierten oder die ausgedehnten Zustände in der Überzahl sind. Ob sich die Mobility Edge rechts oder links vom kritischen Intervall befindet, in der die wahre Mobility Edge zu suchen ist, ist also in erster Linie eine Mehrheitsentscheidung, je nach durchschnittlichem Lokalisierungscharakter der in ihm befindlichen Zustände. Dass als Fehlerbalken jeweils die Hälfte der beiden angrenzenden Intervalle angegeben werden kann, geht von der Annahme aus, dass die Eigenwerte in jedem Intervall annähernd gleichmäßig über das Intervall verteilt sind. Nur dann kann mit Sicherheit gesagt werden, dass die wahre ME irgendwo innerhalb des Fehlerbalkens zu finden sein muss.

Um die Genauigkeit zu verbessern, mit der die ME zu einer bestimmten Unordnung W gefunden werden können, müssen mehr Realisierungen für diese Unordnung berechnet werden, so dass die Funktion $\tau(E)$ schon für kleinere Intervalle die gewünschte Stetigkeit besitzt. Je mehr Realisierungen berechnet werden, desto mehr Eigenwert-IPN-Wertepaare liegen in einem bestimmten Energieintervall zur Mittelung (4.19) vor, und dann genügt möglicherweise schon eine etwas feinere Intervalleinteilung aus, um das monotone Steigen und Fallen von $\tau(E)$ zu gewährleisten.

In Abbildung 4.20 wurden die Intervalle aus Abbildung 4.13 für jede Unordnungsstärke W so lange vergrößert, bis die Funktion $\tau(E)$ monoton bis zur Bandmitte $\epsilon_0 = 0$ steigt und danach monoton wieder abfällt. Nun können die beiden ME zu jeder Unordnungsstärke eindeutig abgelesen werden. Die Lage der gefundenen ME wird natürlich wesentlich von der Annahme des Cutoff-Parameters τ_c beeinflusst.

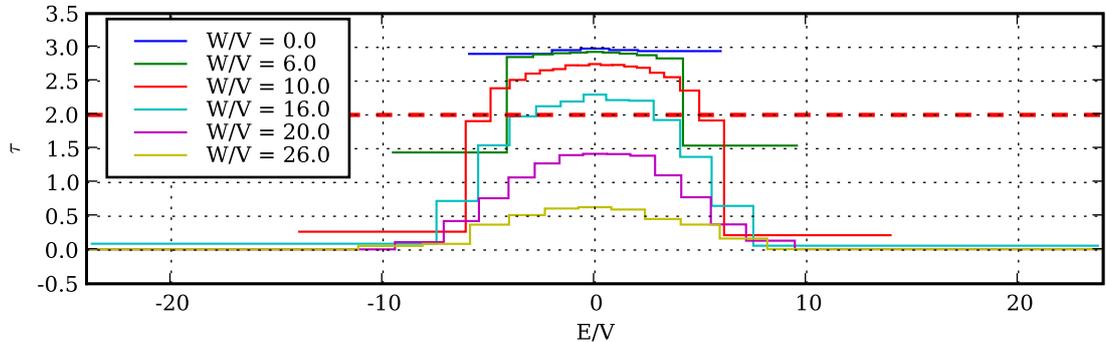


Abbildung 4.20.: Stufendiagramm der fraktalen Dimension τ in Abhängigkeit von der Energie E eines dreidimensionalen Anderson-Modells mit verschiedenen Unordnungsstärken $W/V \in \{0, 6, 10, 16, 20, 26\}$. Der Cutoff-Parameter $\tau_c = 2$ ist als gestrichelte rote Horizontale markiert.

Bestimmung der kritischen Unordnung bei kontinuierlichen Verteilungen

Ab einer bestimmten Unordnung W – der kritischen Unordnung W_c – fallen die ME für Systeme mit kontinuierlich verteilten Zufallspotentialen in der Bandmitte $\epsilon_0 = 0$ zusammen, und alle Zustände des Systems sind vollständig lokalisiert. Um die kritische Unordnung zu bestimmen, wird die fraktale Dimension τ des jeweils mittleren Intervalls um die Bandmitte $E = 0$ gegen die Unordnung W aufgetragen (Abb. 4.21). Damit der Zusammenhang $\tau(W)$ für feste Energie monoton sinkt, müssten die Intervalle zwar nicht so massiv vergrößert werden wie zuvor bei der Bestimmung der ME, da der Intervallalgorithmus dafür gesorgt hat, dass sämtliche Intervalle symmetrisch um die Bandmitte $\epsilon_0 = 0$ liegen. Dennoch werden die selben Energieintervalle wie zuvor verwendet, um insgesamt eine konsistente Auswertungsmethode anzubieten.

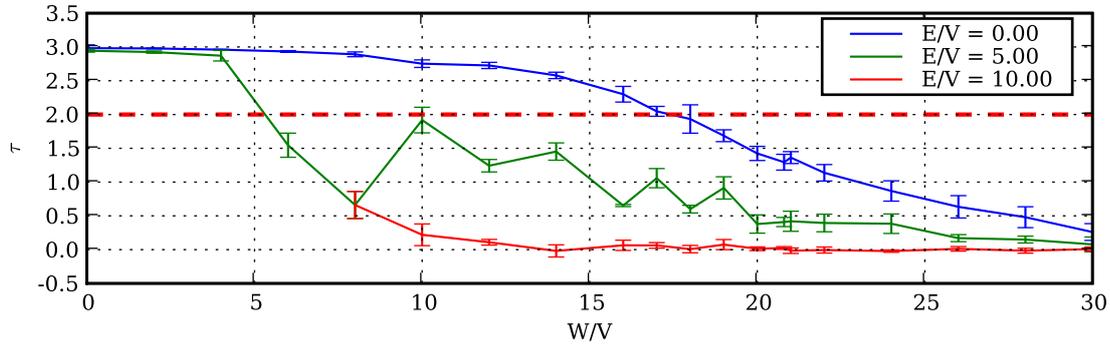


Abbildung 4.21.: Fraktale Dimension τ in Abhängigkeit vom Unordnungsparameter W für feste Energien $E/V \in \{0, 5, 10\}$. Der Cutoff-Parameter $\tau_c = 2$ ist als gestrichelte rote Horizontale markiert. Die Fehlerbalken entsprechen dem 95%-Konfidenzintervall, das die lineare Regression für die Steigung $-\tau/d$ der logarithmierten IPN- N -Daten geliefert hat.

Abbildung 4.21 enthält nicht nur die Zusammenhänge $\tau(W)$ für die Bandmitte ($E/V = 0$), sondern auch für Energien aus anderen Bandbereichen. Außerhalb des ungestörten Bandes $E = [-6V, 6V]$ tauchen wegen der Bandverbreiterung erst ab einer gewissen Unordnungsstärke Messwerte auf (z. B. im vorliegenden Beispiel $E/V = 10$ erst ab $W/V = 8$). Einige von ihnen befinden sich von Anfang an unterhalb des Cutoffs, sind also lokalisiert und durchlaufen mit steigender Unordnung keinen Phasenübergang. Das Phänomen der Delokalisierung könnte dadurch detektiert werden, dass eine Kurve für eine Energie, die etwas jenseits der ungestörten Bandkanten $|B/V| = 6$ liegt (z. B. $E/V = 6,3$), zunächst unterhalb des Cutoffs beginnt und den Cutoff nach oben hin überschreitet, um für höhere Unordnung W schließlich wieder unterhalb des Cutoffs herab zu sinken. Dies wäre bei der erreichten Genauigkeit innerhalb dieser Arbeit allerdings nur schwer zu beobachten, da die Diskretisierung der Energieachse in Intervalle zu grob ist.

Dass die fraktale Dimension τ für Bandbereiche außerhalb der Bandmitte so stark fluk-

4. Numerische Methoden

tuiert, liegt vor allem an der Größe und der unterschiedlichen Einteilung der Intervalle je Unordnungsparameter W . Das Problem lässt sich an Abbildung 4.22 gut erläutern: Für eine feste Energie, z. B. $E/V = 5$ wie in Abbildung 4.21, durchläuft der τ - W -Plot verschiedene Intervalle, deren Mittelpunkt mal rechts und mal links vom betrachteten E liegt. Der Mittelwert der jeweiligen IPN innerhalb der Intervalle bezieht sich demnach auf einen Intervallmittelpunkt, der desto unwahrscheinlicher mit der betrachteten Energie E übereinstimmt, je größer das Intervall ist. Auch hier hilft wieder nur eine Erhöhung der Anzahl der berechneten Realisierungen, um die Intervalle dann trotz Stetigkeitsbedingung des $\tau(E)$ -Zusammenhangs verkleinern zu können. Für die Bestimmung der kritischen Unordnung W_c ist dieses Problem glücklicherweise nicht vorhanden, da der Algorithmus zur Intervalleinteilung gerade dafür gesorgt hat, dass die mittleren Intervalle, die die Bandmitte $E/V = 0$ umgeben, für jedes W symmetrisch zu dieser liegen.

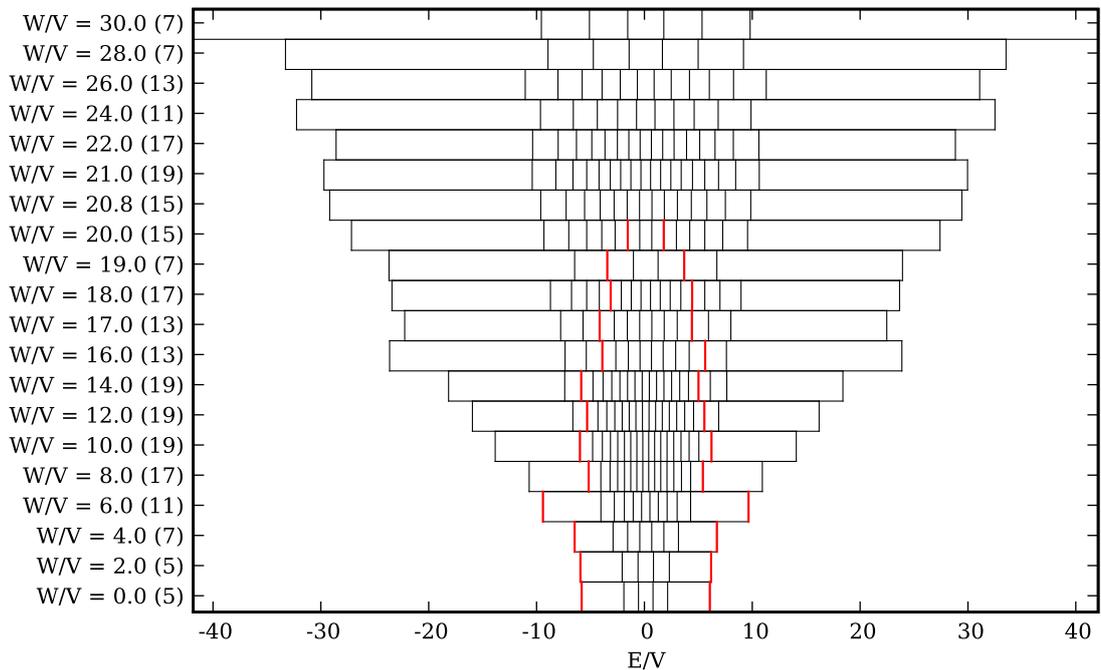


Abbildung 4.22.: Intervalleinteilungen für alle Unordnungsparameter W des Phasendiagramms in Abbildung 4.23. In rot sind die jeweiligen Intervallgrenzen markiert, die aufgrund des Cutoffs $\tau_c = 2$ als Mobility Edge gefunden werden. Die Anzahl der Intervalle ist für jedes W in Klammern angegeben.

Phasendiagramm

Werden die ME zu jeder berechneten Unordnungsstärke W bestimmt und gegen diese aufgetragen, so ergibt sich das Phasendiagramm des Metall-Isolator-Übergangs (Abb.

4.23). Mit eingezeichnet sind Fehlerbalken, die – wie zuvor erläutert – die Hälfte der beiden angrenzenden Intervalle umfassen. Durch gestrichelte Linien sind auch die numerisch ermittelten Bandkanten dargestellt, also die kleinsten und die größten Energieeigenwerte, die für die jeweilige Unordnung W in allen Realisierungen aller Systemgrößen gefunden wurden. Liegt eine ME für geringe Unordnung direkt an der Bandkante, so kann nur ein halber Fehlerbalken eingezeichnet werden, da auf der anderen Seite kein Intervall mehr existiert.

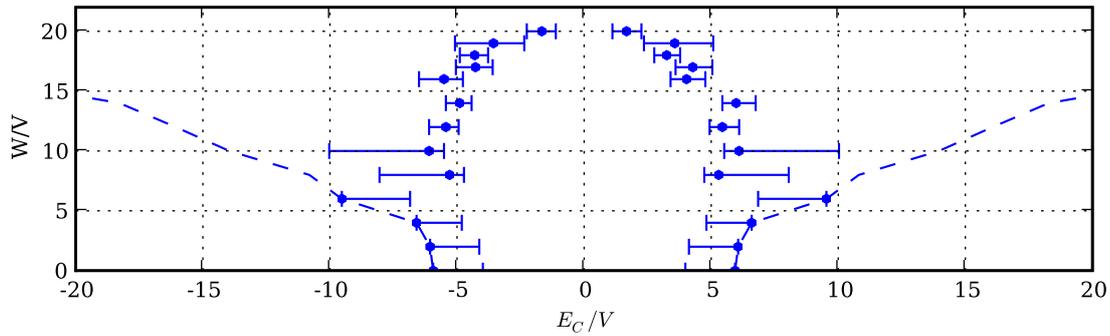


Abbildung 4.23.: Phasendiagramm des Metall-Isolator-Übergangs eines dreidimensionalen TBM mit normalverteiltem Potential. Die gestrichelten Linien stellen die numerisch ermittelten Bandkanten dar.

Die Trajektorie in Abbildung 4.23, die die isolierende und die leitende Phase voneinander trennt, weist z. T. erhebliche Schwankungen auf, vor allem in den bandkantennahen Bereichen (um $W/V = 8$). Dies liegt an der erheblichen Größe der Intervalle an den Bandkanten, wie aus Abbildung 4.22 ersichtlich wird. Abhilfe kann nur eine drastische Erhöhung der Realisierungszahlen für die betreffenden Unordnungsparameter leisten, durch die die Monotonie der $\tau(E)$ -Funktion schon für kleinere Intervalle erreicht würde und die Anzahl der Intervalle somit größer wäre.

4.5. Multifraktale Analyse

Wie bisherige Untersuchungen gezeigt haben, besitzen die Wellenfunktionen der kritischen Eigenzustände am Anderson-Übergang nicht bloß einen fraktalen, sondern sogar einen multifraktalen Charakter [SG91]. Sie zeigen gewissermaßen zugleich lokalisierte und ausgedehnte Eigenschaften. Würden die betrachteten Systeme groß genug sein, könnte bei den kritischen Wellenfunktionen Selbstähnlichkeit beobachtet werden.

Die IPN ist definiert als das zweite Moment der Wahrscheinlichkeitsdichte (4.11) ($q = 2$). Die Multifraktalität äußert sich dadurch, dass die fraktale Dimension nicht mehr unabhängig vom Moment q ist. Es lässt sich die generalisierte Inverse Participation

4. Numerische Methoden

Number (GIPN) als

$$P_{j,q}^{-1} = \sum_{n=1}^N |\psi_{j,n}|^{2q} \quad (4.28)$$

definieren, wobei auch ungeradzahlige und negative Momente durch q erfasst werden. q wird also als reelle Zahl aufgefasst. Für $q = 2$ ist diese Formel identisch zur Definition der herkömmlichen IPN (4.12).

Wie bisher (4.16) ist $\tau(q)$ der (nun q -abhängige) Exponent zur Beschreibung des Skalenverhaltens der GIPN,

$$P_q^{-1} \propto N^{-\frac{\tau(q)}{d}} \quad (4.29)$$

Allerdings wird $\tau(q)$ nun Massenexponent genannt [VRR08]. Nichtlineares Verhalten der Funktion $\tau(q)$ weist auf Multifraktalität und somit auf den Metall-Isolator-Übergang hin. Je nach q -Abhängigkeit lassen sich die verschiedenen Regimes unterscheiden:

$$\tau(q) = \begin{cases} d(q-1) & \text{metallisches Regime} \\ 0 & \text{isolierendes Regime} \\ D(q)(q-1) & \text{kritischer Zustand} \end{cases} \quad (4.30)$$

Bei $D(q)$ handelt es sich um die sog. generalisierte fraktale Dimension [VRR08], die durch

$$D(q) = \frac{\tau(q)}{q-1} \quad (4.31)$$

definiert ist. Ist sie konstant, sind die beiden Grenzfälle Metall oder Isolator erreicht,

$$D(q) = \begin{cases} d & \text{metallisches Regime} \\ 0 & \text{isolierendes Regime} \end{cases} \quad (4.32)$$

In den Abbildungen 4.24 und 4.25 sind Beispiele für die q -Abhängigkeit von $\tau(q)$ und $D(q)$ gezeigt. Mit eingezeichnet sind auch die Fehlerbalken, die den 95%-Konfidenzintervallen entsprechen, die die lineare Regression zur Bestimmung von $\tau(q)$ aus den GIPN-Daten zurückgeliefert hat. Dabei wird ein Problem deutlich: Während die Fehlerwerte für positive Momente q so gering sind, dass durchaus vernünftige Aussagen über das Verhalten von $\tau(q)$ bzw. $D(q)$ getroffen werden können, wachsen sie für negative q stark mit dem Betrag $|q|$ an. Offenbar weichen die zugrunde liegenden GIPN-Werte in der doppelt-logarithmischen Auftragung gegen die Systemgröße N für negative Momente q sehr stark von einer Geraden ab, so dass die lineare Regression nur mit hoher Unsicherheit eine Ausgleichsgerade mit Steigung $-\tau(q)/d$ durch die (P_q^{-1}, N) -Wertepaare legen kann, obwohl es sich bei den gezeigten Kurven um die Bandmitte $E = 0$ handelt. Die Fehler sind so immens, dass die nach (4.30) und (4.32) festgelegten Regimes nicht klar voneinander unterschieden werden können, da z. B. nicht festgestellt werden kann, ob $\tau(q)$ einen linearen Zusammenhang darstellt oder nicht.

Dieses Problem ist in der Literatur bereits bekannt [VRR08]. Es liegt an der in dieser Arbeit verwendeten Art der Systemskalierung. In dieser Arbeit wird immer das komplette System mit N Gitterplätzen vergrößert, was in der Literatur als System Size Scaling

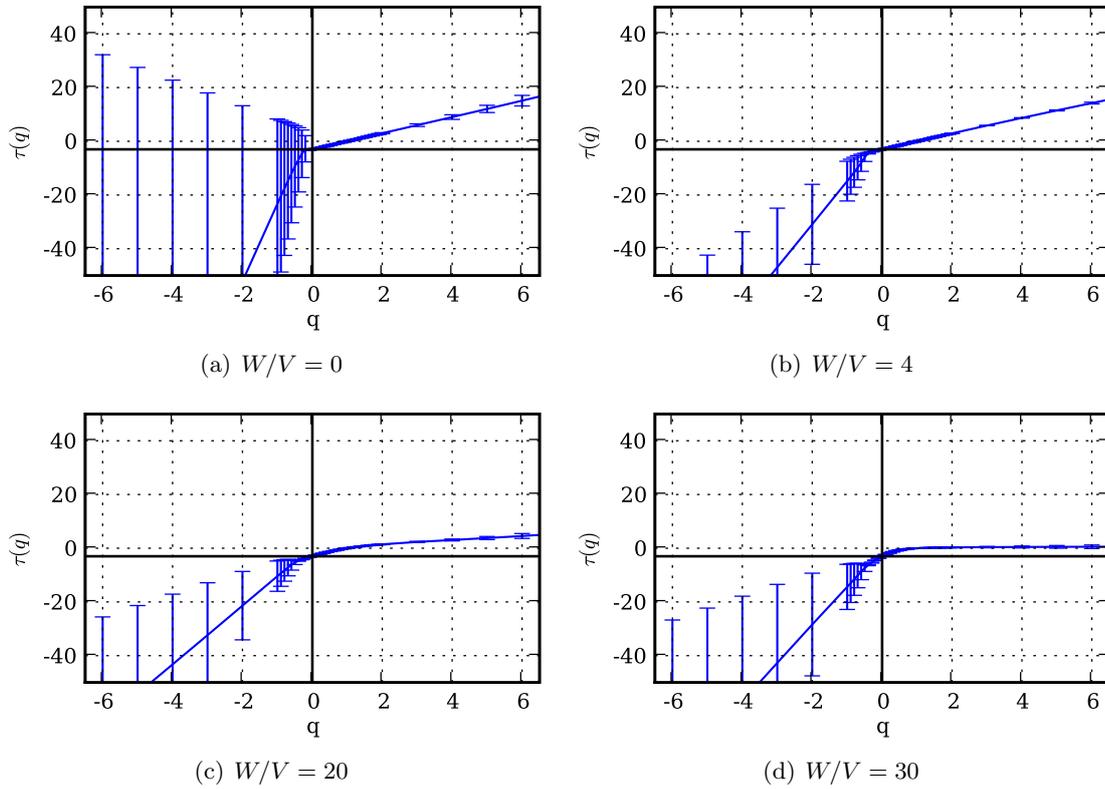


Abbildung 4.24.: Der Massenexponent $\tau(q)$ in Abhängigkeit vom Moment q eines dreidimensionalen TBM mit normalverteilten Gitterpotentialen an der Bandmitte $E = 0$ für verschiedene Unordnungsstärken $W/V \in \{0, 4, 20, 30\}$. Die Fehlerbalken entsprechen 95%-Konfidenzintervallen für die Steigung, die eine lineare Regression bei der Bestimmung von $\tau(q)$ aus den doppelt-logarithmierten GIPN- N -Daten ermittelt hat.

4. Numerische Methoden

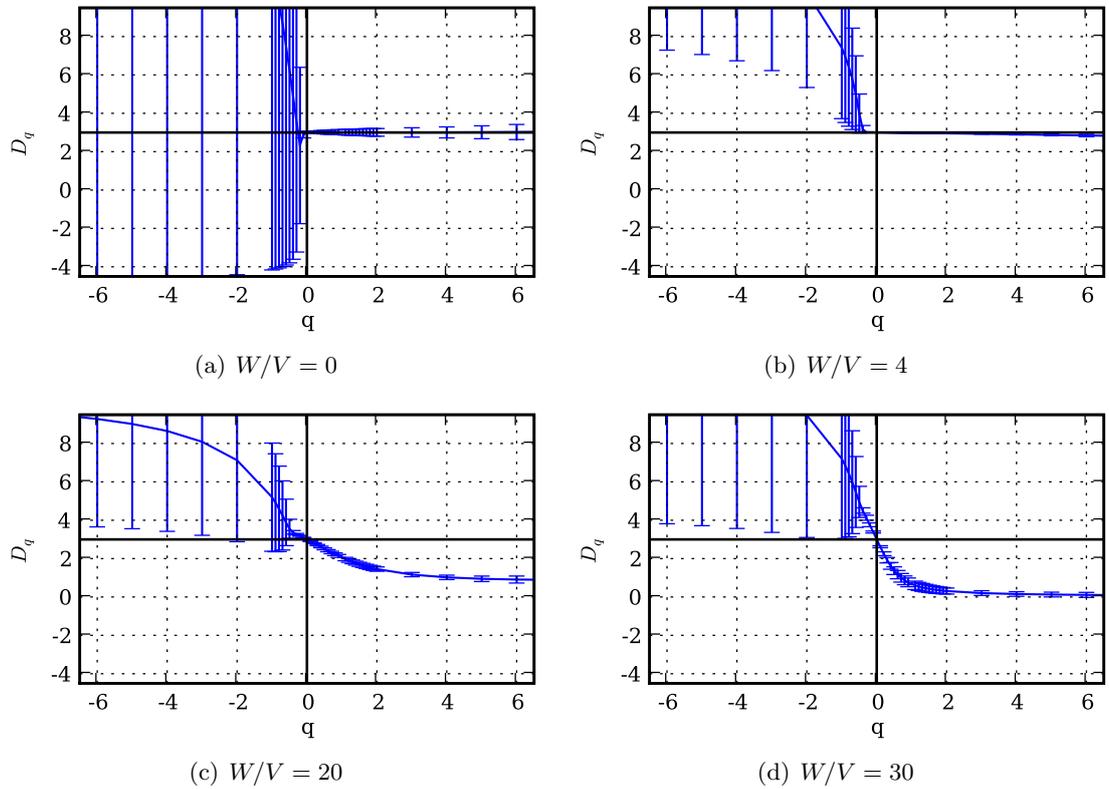


Abbildung 4.25.: Die generalisierte fraktale Dimension $D(q)$ in Abhängigkeit vom Moment q eines dreidimensionalen Systems mit normalverteilten Potentialen an der Bandmitte $E = 0$ für verschiedene Unordnungsstärken $W/V \in \{0, 4, 20, 30\}$. Die Fehlerbalken entsprechen 95%-Konfidenzintervallen für die Steigung, die eine lineare Regression bei der Bestimmung von $D(q)$ aus den doppelt-logarithmierten GIPN- N -Daten ermittelt hat.

(SSS) bezeichnet wird. Die Probleme können z. B. mit Hilfe des Box Size Scaling (BSS) umgangen werden [VRR08]. Bei dieser Methode wird nur eine einzige, möglichst große Systemgröße betrachtet. Das große System wird dann in kleine Boxen unterteilt. Das Skalenverhalten der GIPN wird durch Variation der Größe der kleinen Boxen ermittelt. Auf diese Weise sind die numerischen Fluktuationen der GIPN-Daten für negative Momente geringer, und es lassen sich aussagekräftige Ergebnisse der multifraktalen Analyse erzielen.

Aufgrund der gezeigten numerischen Messungenauigkeit für negative Momente q kann in dieser Arbeit nur die positive Hälfte der GIPN-Daten ausgewertet werden, was im nächsten Kapitel wenigstens exemplarisch für einige Systeme an der Bandmitte geschehen soll.

4. Numerische Methoden

5. Ergebnisse der kontinuierlichen Verteilungsfunktionen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse vorgestellt, die aus den drei Modellvarianten mit kontinuierlich verteilten Potentialen hervorgehen. Dazu werden die Methoden angewendet, die im vorigen Kapitel vorgestellt wurden.

Zunächst wird der betrachtete Parameterraum vorgestellt. Danach wird der Einfluss der Dimensionalität untersucht. Der Metall-Isolator-Übergang tritt nur bei dreidimensionalen Systemen auf. Bei ein- und zweidimensionalen Systemen liegen nur ohne Unordnung ($W = 0$) ausgedehnte Wellenfunktionen vor. Im darauf folgenden Abschnitt werden die verschiedenen kontinuierlichen Zufallsverteilungen verglichen, denen die Potentiale unterliegen, und speziell im dreidimensionalen Fall ihr Einfluss auf den Phasenübergang. Danach werden für jede der drei Verteilungen bei dreidimensionalen Systemen Cutoff-Parameter τ_c für die fraktale Dimension τ gesucht, die die jeweilige kritische Unordnung aus der Literatur (Tab. 3.2) so reproduzieren, dass die Phasendiagramme aus der Literatur [KM93] möglichst gut angepasst werden. Trotz der im Vorkapitel aufgezeigten numerischen Schwierigkeiten wird zuletzt in diesem Kapitel noch versucht, einige qualitative Aussagen mithilfe der multifraktalen Analyse (MFA) zu treffen.

5.1. Systemspezifikationen

Zur Ermittlung des Skalenverhaltens der IPN werden sechs verschiedene Systemgrößen N betrachtet, die im Fall der eindimensionalen Systeme zu $N_1 \in \{500, 900, 1300, 1700, 2700, 5100\}$ gewählt werden. Für die höherdimensionalen Systeme wird versucht, ebenfalls ungefähr diese Systemgrößen zu verwenden, um die Ergebnisse jeweils vergleichen zu können. Es können aber nicht exakt dieselben Systemgrößen erreicht werden, da darauf geachtet werden muss, dass die zweidimensionalen Systeme in etwa quadratisch und die dreidimensionalen Systeme in etwa würfelförmig bleiben, so dass die longitudinale Systemausdehnung in allen Raumrichtungen des Kristalls variiert wird. Im Grunde werden Zahlenkombinationen $\{L_i\}$ in der Nähe der Quadrat- bzw. der Qubikwurzel von N_1 gesucht, deren Produkt

$$N = \prod_{m=1}^d L_m \quad (5.1)$$

innerhalb des Intervalls $[N_1, N_1 + 100[$ liegen. Das Ergebnis dieser Suche wird in Tabelle 5.1 präsentiert.

Als Unordnungsparameter W werden für alle Dimensionalitäten d und alle Verteilungen generell Werte zwischen $W/V = 0$ und $W/V = 30$ verwendet. Die Schrittweite wird

5. Ergebnisse der kontinuierlichen Verteilungsfunktionen

Tabelle 5.1.: Systemausmaße $\{L_m\}$ der berechneten (a) zweidimensionalen und (b) dreidimensionalen Systeme mit N Gitterplätzen.

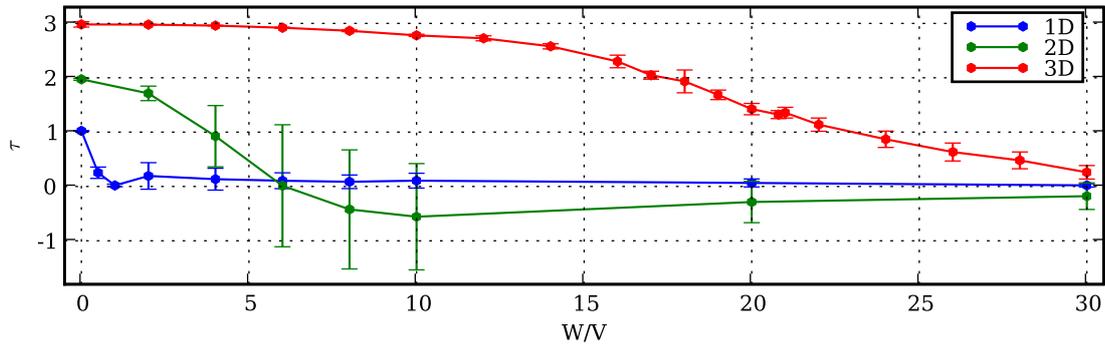
(a)			(b)			
L_1	L_2	N	L_1	L_2	L_3	N
$23 \times$	22	506	$9 \times$	$8 \times$	7	504
$31 \times$	30	930	$11 \times$	$10 \times$	9	990
$37 \times$	36	1332	$12 \times$	$11 \times$	10	1320
$42 \times$	41	1722	$13 \times$	$12 \times$	11	1716
$53 \times$	52	2756	$15 \times$	$14 \times$	13	2730
$72 \times$	71	5112	$19 \times$	$17 \times$	16	5168

aber individuell angepasst, je nachdem, in welchem Unordnungsbereich weitere Werte sinnvoll erscheinen. Ein genauer Überblick über den betrachteten Parameterraum und die Anzahl der berechneten Realisierungen je Parameterkombination ist in Anhang A zu finden.

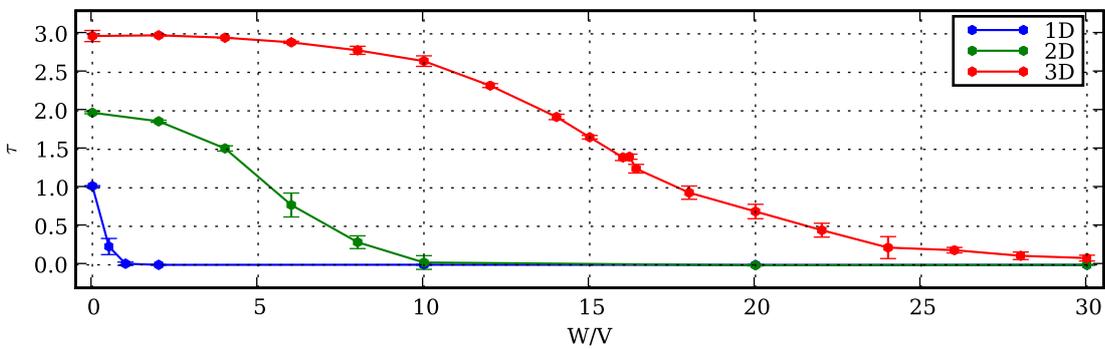
5.2. Einfluss der Dimensionalität

Es sollen nun zunächst verschiedendimensionale Systeme miteinander verglichen werden. In Abbildung 5.1 werden für jede der Zufallsverteilungen die Abhängigkeit der fraktalen Dimension τ in der Bandmitte $E = 0$ von der Unordnung W untersucht. Dabei werden die verschiedenen Dimensionalitäten d miteinander verglichen. Klar ist, dass die fraktale Dimension sämtlicher Zustände der geordneten Systeme mit $W = 0$ – nicht nur der in der Bandmitte – der einbettenden Dimension d entspricht. Daher beginnen die Kurven je nach Dimensionalität bei $\tau = 1$, $\tau = 2$ oder $\tau = 3$. Für den anderen Grenzfall großer Unordnung $W \rightarrow \infty$ streben sämtliche Zustände zu perfekt lokalisierten Wellenfunktionen, erkennbar am Wert der fraktalen Dimension $\tau = 0$. Der Abfall vom Wert $\tau = d$ bei $W = 0$ zum Wert $\tau = 0$ für große W findet aber unterschiedlich schnell statt. In den eindimensionalen Systemen fällt die Kurve sehr rasch ab, bei $W = 0$ hat die Funktion offenbar schon eine Tangente mit negativer Steigung. Bei zweidimensionalen Systemen hingegen lässt sich bei $W = 0$ noch eine waagerechte Tangente anlegen. Unmittelbar nach $W = 0$ beginnt τ aber zu sinken. Im dreidimensionalen Fall verbleibt die fraktale Dimension für einen gewissen Unordnungsbereich auf einem hohen Niveau in der Nähe von $d = 3$, bevor sie schließlich beim Erreichen der kritischen Unordnung herab sinkt und für große W ebenfalls gegen $\tau = 0$ strebt.

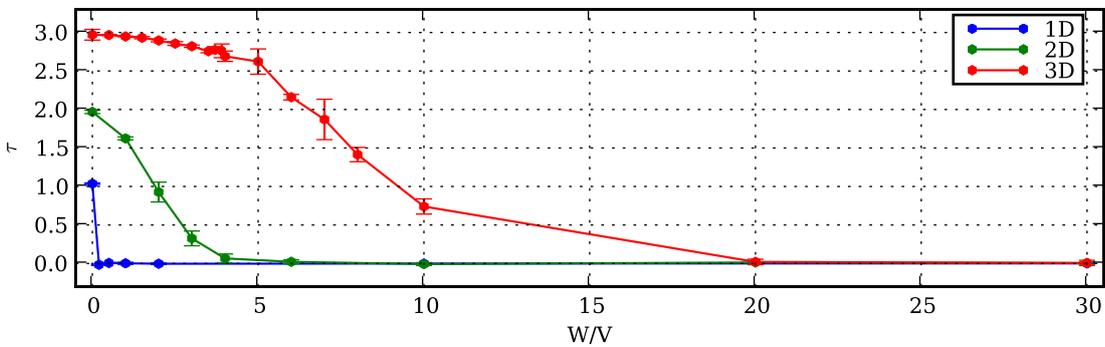
Für die zweidimensionalen normalverteilten Systeme zeigt die fraktale Dimension erstaunlich hohe Fehlerwerte für τ , erkennbar an den großen Fehlerbalken in Abbildung 5.1a, die den 95-%-Konfidenzintervallen für die Steigung in den doppelt-logarithmischen IPN- N -Diagrammen entsprechen, die die lineare Regression liefert. Offenbar unterliegt



(a) Normalverteilung



(b) Boxverteilung



(c) Lorentz-Verteilung

Abbildung 5.1.: Die fraktale Dimension τ in Abhängigkeit vom Unordnungsparameter W in der Bandmitte ($E = 0$) ein-, zwei- und dreidimensionaler Systeme mit (a) Normal-, (b) Box- und (c) Lorentz-Verteilung.

5. Ergebnisse der kontinuierlichen Verteilungsfunktionen

die IPN bei der berechneten Anzahl von Realisierungen immer noch zu starken Fluktuationen, was für die Bandmitte recht ungewöhnlich ist und in allen anderen Kombinationen aus Dimensionalität und Zufallsverteilung nicht in dem Ausmaß beobachtet wird. Die Kurve in Abbildung 5.1a sinkt sogar unterhalb von $\tau = 0$, wobei eine negative fraktale Dimension physikalisch natürlich nicht sinnvoll ist, und nähert sich dann für große W von unten dem Wert $\tau = 0$. Der Wert $\tau = 0$ liegt aber stets noch innerhalb der Fehlergrenzen, so dass sich die Frage nach dem Sinn der negativen fraktalen Dimension nicht zwingend stellt.

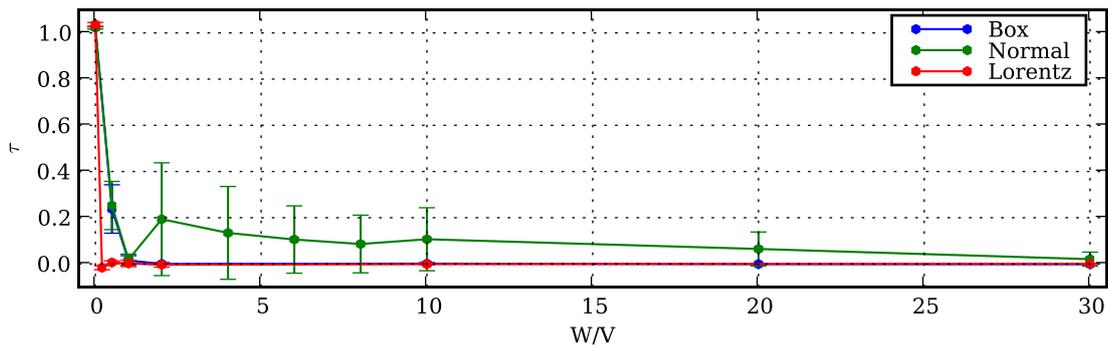
5.3. Einfluss der Zufallsverteilung

In Abbildung 5.2 sind die Kurven aus Abbildung 5.1 noch einmal in anderer Reihenfolge gezeigt, um die Abhängigkeit der fraktalen Dimension τ von der Stärke der Unordnung W für jede der drei Dimensionalitäten zu verschiedenen Zufallsverteilungen vergleichen zu können. Es zeigt sich, dass im eindimensionalen Fall die fraktale Dimension unabhängig von der Verteilung sehr schnell auf $\tau = 0$ abfällt. Die Normalverteilung besitzt offenbar nicht nur im zweidimensionalen, sondern auch im eindimensionalen Fall sehr viel größere Fehlerbalken als bei den anderen Verteilungen, die zugrunde liegenden IPN-Daten zeigen also bei vergleichbarer Realisierungsanzahl höhere Fluktuationen. Im eindimensionalen Fall sind diese großen Fluktuationen auch gut verständlich, da das eindimensionale Tight-Binding-Band in der Bandmitte für geringe Unordnung eine geringere Zustandsdichte als an den Bandkanten aufweist. Die zur Lorentz-Verteilung gehörende Kurve scheint für steigende Unordnung noch weitaus schneller auf $\tau = 0$ herab zu sinken als die der anderen Verteilungen.

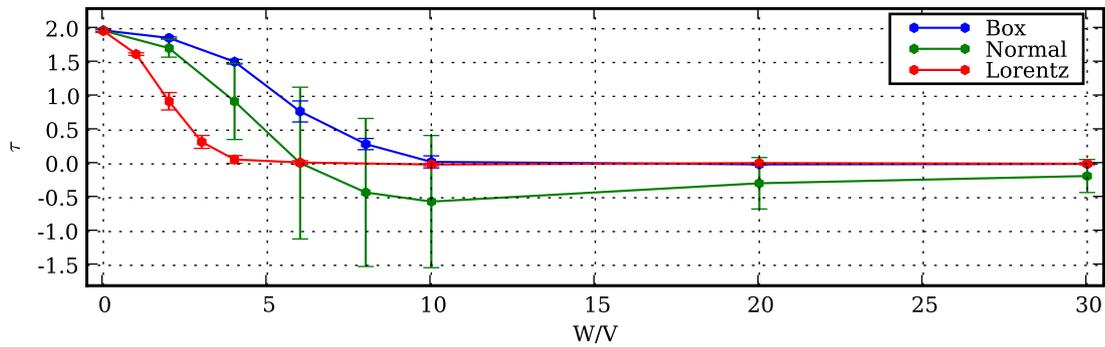
Auch im zweidimensionalen Fall (Abb. 5.2b) ist ein deutlicher Unterschied zwischen den verschiedenen Verteilungsfunktionen zu erkennen. Die Lorentz-Verteilung fällt hier ebenfalls mit steigender Unordnung W am schnellsten auf $\tau = 0$ ab. Die Boxverteilung scheint am langsamsten abzufallen, was aber nicht zweifelsfrei zu klären ist, da die Kurve der Normalverteilung dafür mit zu großen Fehlerbalken ausgestattet ist.

Auch im dreidimensionalen Fall (Abb. 5.2c) zeigt die Lorentz-Verteilung den deutlich schnellsten Abfall der fraktalen Dimension in der Bandmitte mit zunehmender Unordnung. Die kritische Unordnung W_c , ab der nur noch lokalisierte Zustände existieren, ist im Lorentz-Fall also auf jeden Fall am geringsten. Am zweitgeringsten ist die kritische Unordnung im Fall der Boxverteilung und am größten bei der Normalverteilung. Die Reihenfolge stimmt also mit den Literaturangaben überein (Tab. 3.2). Wo genau die jeweilige kritische Unordnung bestimmt wird, kann hier aber nur durch die Wahl eines Cutoff-Parameters τ_c entschieden werden. In Abbildung 5.2c werden die drei Cutoff-Parameter (siehe Tab. 5.2) dargestellt, die an die ebenfalls eingezeichneten kritischen Unordnungen W_c aus der Literatur [BSK87] angepasst wurden.

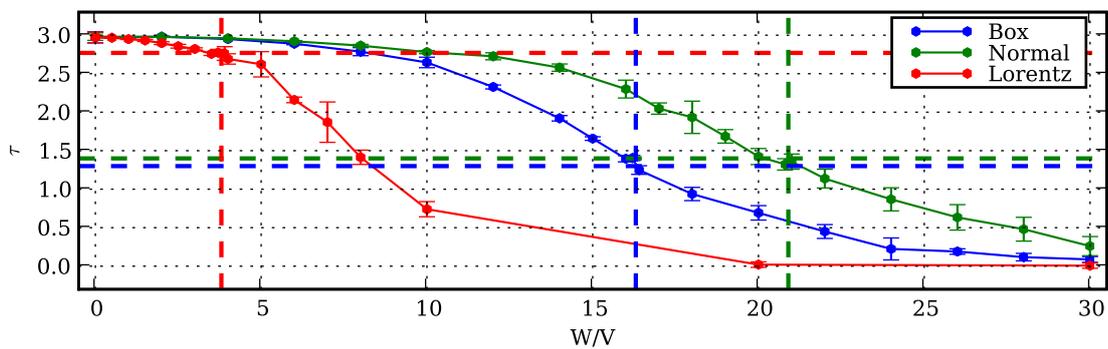
5.3. Einfluss der Zufallsverteilung



(a) 1D



(b) 2D



(c) 3D

Abbildung 5.2.: Die fraktale Dimension τ in Abhängigkeit von der Unordnung W in der Bandmitte ($E = 0$) (a) ein-, (b) zwei- und (c) dreidimensionaler Systeme mit Box-, Normal- und Lorentz-Verteilung. Die horizontalen gestrichelten Linien in (c) kennzeichnen den jeweils angepassten Cutoff-Parameter $\tau_c = (1,3, 1,4, 2,77)$, um die Literaturwerte für die kritische Unordnung aus Tabelle 3.2 zu reproduzieren, die wiederum durch die vertikalen gestrichelten Linien repräsentiert werden.

5.4. Einfluss des Cutoff-Parameters

Als wie groß die kritische Unordnung und die Lage der Mobility Edges jeweils genau bestimmt werden muss, kann ohne multifraktale Analyse oder anderen geeigneten Methoden, die lokalisierte und ausgedehnte Wellenfunktionen zweifelsfrei identifizieren können, hier nur durch die Einführung eines Cutoff-Parameters festgelegt werden. Dies bedeutet allerdings einen weiteren freien Parameter innerhalb des Modells, der an bestehende Literaturwerte angepasst werden muss. Werden die Literaturwerte aus Tabelle 3.2 verwendet [KM93], können die kritischen Unordnungen recht gut mit den gefundenen Cutoff-Parametern reproduziert werden, die in Tabelle 5.2 zusammengefasst sind. Die sich ergebenden Phasendiagramme unter Annahme dieser Cutoff-Parameter werden in Abbildung 5.3 mit den Phasendiagrammen aus derselben Literatur, auf dessen kritische Unordnungen die Anpassung erfolgte, verglichen. Wie zu erkennen ist, kann der generelle Verlauf der Literaturkurven durch bloße Anpassung des Cutoffs an die jeweilige kritische Unordnung im Rahmen der Fehlergrenzen einigermaßen gut wiedergegeben werden. Eine höhere Genauigkeit könnte nur durch eine um ein Vielfaches größere Anzahl von zu berechnenden Realisierungen gewährleistet werden, wodurch die Energieintervalle – und damit auch die Fehler in der Bestimmung der Mobility Edges – verkleinert würden.

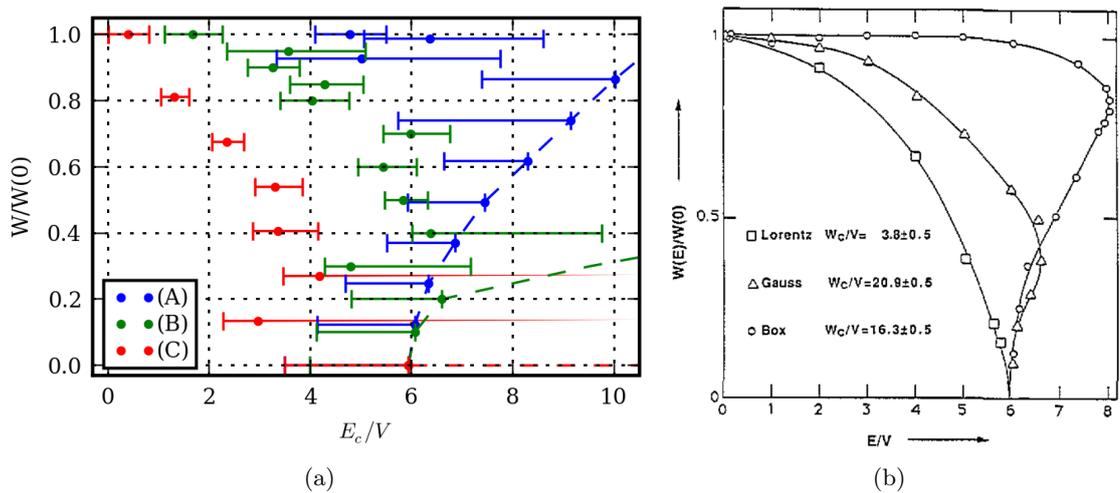


Abbildung 5.3.: (a) Vergleich der Phasendiagramme von (A) Box-, (B) Normal- und (C) Lorentzverteilung mit angepassten Cutoff-Parametern τ_c . Die Unordnung W wurde jeweils auf die kritische Unordnung $W(0) = W_c$ normiert. Die gestrichelten Linien markieren den Verlauf der numerisch bestimmten Bandkanten. (b) Zum Vergleich werden noch einmal die bereits in Abbildung 3.7 gezeigten Phasendiagramme aus der Literatur [KM93] gezeigt.

Das Problem mit einem Cutoff $\tau_c < 2$ besteht darin, dass bei Annahme dieses Cutoffs streng genommen auch bei zweidimensionalen Systemen ausgedehnte Zustände gefunden

Tabelle 5.2.: Die Cutoff-Parameter τ_c , die die Anpassung der kritischen Unordnung W_c an die Literaturwerte [BSK87] ergeben hat.

Verteilung	τ_c
Box	1,30
Normal	1,40
Lorentz	2,77

würden, für deren Eigenzustände man aufgrund von Renormierungsgruppenargumenten davon ausgeht, dass sie für jede noch so kleine Unordnung $W > 0$ bereits vollständig aus lokalisierten Eigenzuständen bestehen [AALR79]. So gesehen dürfte die fraktale Dimension $\tau_c = 2$ eigentlich die niedrigste Wahl für den Cutoff-Parameter sein. Dass sich mit $\tau_c = 2$ erhebliche Unterschiede in den Phasendiagrammen ergeben, wird in Abbildung 5.4 ersichtlich. Für alle drei Verteilungen ändert sich der Verlauf der Phasen-Trajektorie durch Variation des Cutoff-Parameters deutlich.

5.5. Ausblick zur multifraktalen Analyse

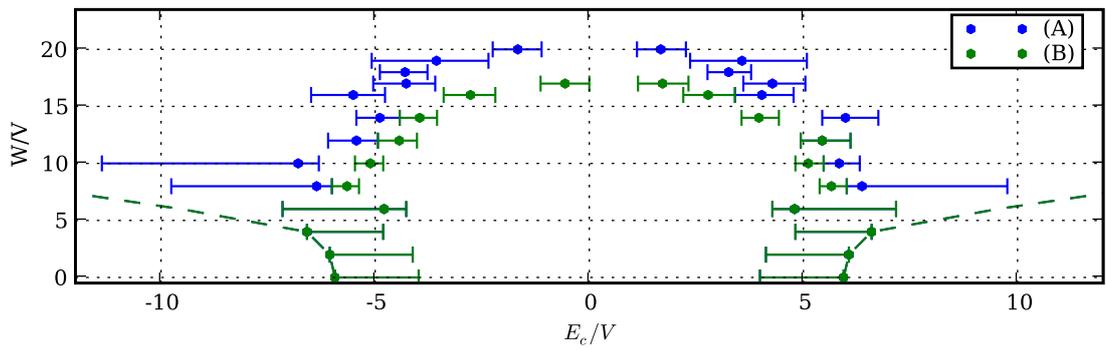
Aufgrund der in Kapitel 4 angesprochenen großen numerischen Fluktuationen für negative Momente q kann keine konsequente Auswertung mit Hilfe der multifraktalen Analyse durchgeführt werden. Für positive Momente können aber ein paar qualitative Schlüsse gezogen werden. Dazu wird q im Intervall $[0, 10]$ variiert, bis 2 mit der Schrittweite 0,1, darüber mit der Schrittweite 1. Es werden lediglich exemplarisch vier verschiedene Unordnungsparameter $W/V \in \{0, 4, 20, 30\}$ und Eigenwerte aus dem Energieintervall an der Bandmitte bei $E = \epsilon_0 = 0$ betrachtet. Als Wahrscheinlichkeitsverteilung der Potentiale kommt die Normalverteilung zur Anwendung.

Abbildung 5.5 zeigt sowohl den Massenexponenten $\tau(q)$ als auch die durch Gleichung 4.31 definierte generalisierte fraktale Dimension $D(q)$ in Abhängigkeit von q . Tatsächlich kann bestätigt werden, dass die generalisierte fraktale Dimension bei perfekten Kristallen ($W = 0$), bei denen auf jeden Fall ausnahmslos ausgedehnte Zustände vorliegen, gemäß Gleichung (4.32) konstant den Wert $D(q) = d = 3$ besitzt (Abb. 5.5a). $\tau(q)$ ist – wie laut der Fallunterscheidung (4.30) zu erwarten ist – eine Gerade mit Steigung d und Ordinatenabschnitt $-d$. Für eine geringe Erhöhung der Unordnung ($W/V = 4$) liegen die beiden Kurven schon etwas unterhalb der Kurven für $W = 0$.

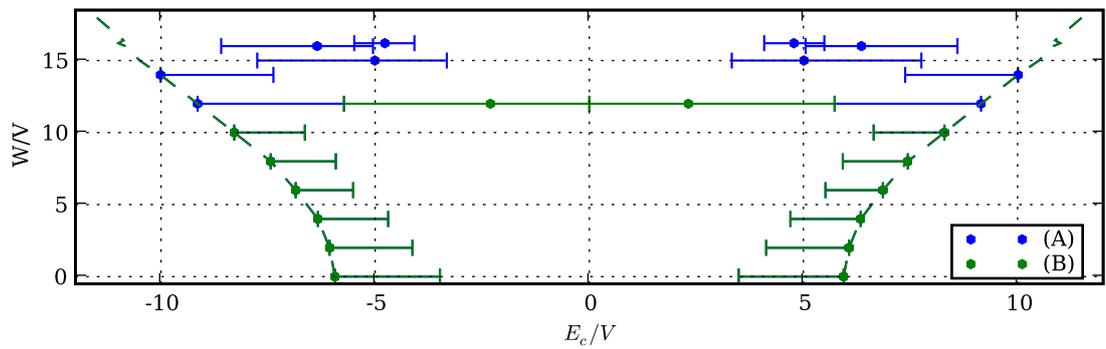
Mit $W/V = 20$ wird ein Zustand gezeigt, der in der Nähe der kritischen Unordnung $W/V = 20,9$ (vgl. Tab. 3.2) und damit – durch seine Lage an der Bandmitte – in der Nähe des Phasenübergangs liegt. Bei ihm wird also ein multifraktaler Charakter erwartet. Tatsächlich zeigt die generalisierte fraktale Dimension eine q -Abhängigkeit, was auf Multifraktalität hindeutet (Abb. 5.5b).

$W/V = 30$ sollte weit jenseits der kritischen Unordnung liegen und daher in jedem Fall für lokalisierte Zustände an der Bandmitte sorgen. Für die generalisierte fraktale Dimension $D(q)$ und ebenfalls für die Massenexponenten $\tau(q)$ werden hier laut den Fall-

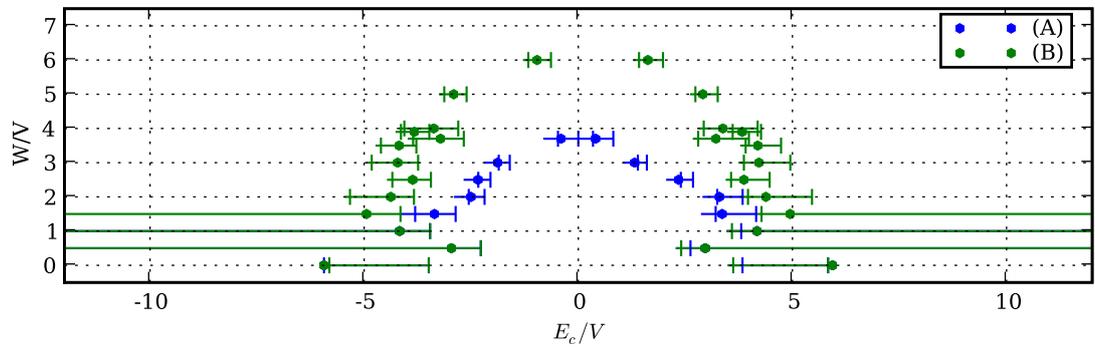
5. Ergebnisse der kontinuierlichen Verteilungsfunktionen



(a) Normalverteilung



(b) Boxverteilung



(c) Lorentz-Verteilung

Abbildung 5.4.: Phasendiagramme des Metall-Isolator-Übergangs von Systemen mit (a) Normal-, (b) Box- und (c) Lorentzverteilung, jeweils mit (B) Standard-Cutoff-Parameter $\tau_c = 2$ und (A) angepasstem Cutoff-Parameter $\tau_c = 1,3$ (Box), $\tau_c = 1,4$ (Normal) bzw. $\tau_c = 2,77$ (Lorentz).

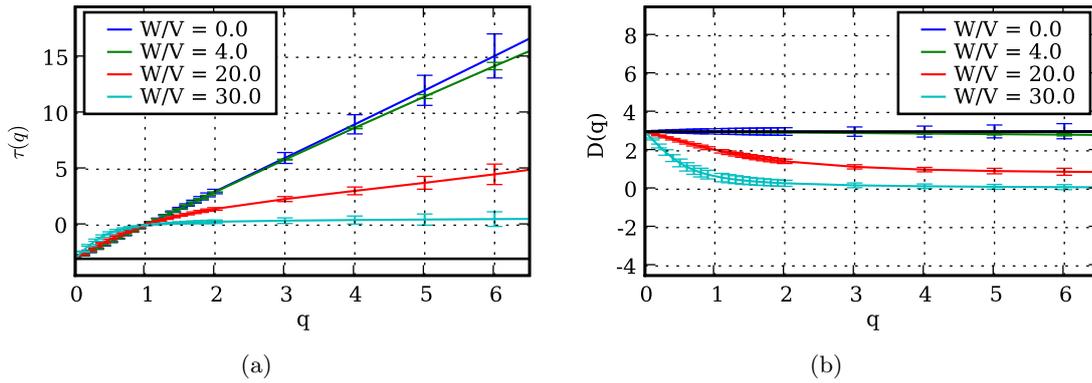


Abbildung 5.5.: (a) Massenexponent $\tau(q)$ und (b) generalisierte fraktale Dimension $D(q)$ für positive Momente q in der Bandmitte $E = 0$ für dreidimensionale ungeordnete Systeme mit Normalverteilung und den Unordnungsparametern $W/V \in \{0, 4, 20, 30\}$. Die durchgezogenen schwarzen Horizontalen markieren $\tau(q) = -3$ bzw. $D(q) = 3$.

unterscheidungen (4.30) und (4.32) konstante Geraden bei Null erwartet. Dies wird in Abbildung 5.5 aber nicht beobachtet. Detektiert werden nach wie vor Zustände mit multifraktalem Charakter, wenngleich sich die Werte gegenüber denen von $W/V = 20$ weiter in Richtung der Nullordinate bewegt haben. Ein Grund kann die geringe Größe der betrachteten Systeme sein, wodurch die multifraktalen Zustände nicht auf die scharfe Trajektorie des gesuchten Phasenübergangs beschränkt sind, sondern in einer breiteren Zone um die gesuchte Trajektorie herum gefunden werden können [Mil00]. Der Übergang zu immer größeren Systemen oder der Einsatz von iterativen Methoden wie die Transfermatrixmethode würde also auch hier Abhilfe schaffen. Unabhängig von der Systemgröße wird aber erwartet, dass die Werte von $D(q)$ und $\tau(q)$ für steigende Unordnung immer weiter gegen die Nullgerade streben werden, bis schließlich perfekt lokalisierte Zustände gefunden werden, die nicht mehr multifraktal sind.

5.6. Fazit

Dieses Kapitel hat die numerischen Methoden aus dem vorigen Kapitel auf das Tight-Binding-Modell aus Kapitel 3 angewendet, wobei die Potentiale ϵ_n einer der drei kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsverteilungen (Box-, Normal- oder Lorentz-Verteilung) unterlagen. Nach einer Erläuterung des betrachteten Parameterraums wurde in Abschnitt 5.2 zunächst für jede der drei Verteilungen der Einfluss der Dimensionalität d des Systems untersucht. Dabei wurde beobachtet, dass der Übergang zwischen den beiden Grenzfällen $W = 0$ und $W \rightarrow \infty$ für alle Verteilungen unterschiedlich abläuft. Mit steigender Dimensionalität findet der Abfall der Funktion $\tau(W)$ von d auf 0 immer langsamer statt.

5. Ergebnisse der kontinuierlichen Verteilungsfunktionen

Im darauf folgenden Abschnitt wurden die gleichen Kurven noch einmal in anderer Reihenfolge dargestellt, um für jede der Dimensionalitäten die verschiedenen Verteilungen miteinander vergleichen zu können. Für alle drei Dimensionalitäten liegen Unterschiede im Verhalten der Funktion $\tau(W)$ an der Bandmitte statt. Im dreidimensionalen Fall sorgen diese dafür, dass die kritische Unordnung W_c an unterschiedlichen Unordnungsstärken W liegt, was konform mit der Literatur ist. Auch die Reihenfolge folgt der Literatur. Nur die genaue Lage der jeweiligen kritischen Unordnung lässt sich mit der in dieser Arbeit verwendeten Methodik nicht ermitteln. Dafür ist die Einführung eines Cutoff-Parameters notwendig, der ausgedehnte und lokalisierte Zustände voneinander trennt, was einen weiteren freien Parameter bedeutet, der für jede der Verteilungen an bestehende Literaturwerte, wie z. B. für die kritische Unordnung, angepasst werden muss. Dann aber entspricht der Verlauf der Phasen-Trajektorie innerhalb der Fehlergrenzen den Literaturvorgaben. Der erhoffte universelle Cutoff-Parameter (z. B. $\tau_c = 2$) existiert offenbar nicht.

Zuletzt wurde noch versucht, anhand weniger ausgewählter Systeme einige qualitative Aussagen zur multifraktalen Analyse zu überprüfen. Auch wenn die Ergebnisse wenigstens für die zugängliche positive Diagrammhälften $q > 0$ Sinn machen, so ist die erreichbare Genauigkeit für die geringe Größe der Systeme wieder stark beschränkt, so dass auch noch für sehr große Unordnungsparameter W multifraktale Zustände detektiert werden. Die maximale Systemgröße und die maximale Anzahl der Realisierungen, deren Berechnung mit der vorgestellten Methode möglich sind, ist aber durch die anfallenden Datenmengen vor allem durch den Verbrauch von Festplattenspeicher stark begrenzt.

Auch bei den Phasendiagrammen, die ohne MFA ermittelt werden, lässt sich die Größe der Fehlerbalken nur durch eine Vervielfachung der Realisierungen verkleinern. Die Erfahrung hat aber gezeigt, dass ganze Größenordnungen in der Realisierungszahl fehlen, um die Fehlerwerte auf ein vernünftiges Maß zu reduzieren. Daher muss das Fazit hier lauten, dass die vorgestellte Methode – zumindest was die Berechnung der Eigenzustände und des Lokalisierungsmaßes angeht – modifiziert oder teilweise durch modernere Methoden ersetzt werden muss, um in Zukunft die Genauigkeit und damit auch die physikalische Relevanz der Ergebnisse zu verbessern. Die bisher notwendige Archivierung von riesigen Mengen an Eigenvektordaten sollte umgangen werden.

6. Ergebnisse der binären Legierung

Die numerischen Methoden aus Kapitel 4 sollen nun auf das Modell einer binären Legierung (Kapitel 3) angewandt werden, d. h. die Gitterpotentiale ϵ_n unterliegen nun – statt wie im vorigen Kapitel einer kontinuierlichen – einer diskreten Wahrscheinlichkeitsverteilung mit zwei Ausprägungen.

Zunächst werden wieder der betrachtete Parameterraum und notwendige Modifikationen der numerischen Methodik erläutert. Die Bestimmung der Mobility Edges verläuft prinzipiell wie zuvor (Abschn. 6.2). Die darauf folgenden Abschnitte betrachten zunächst dreidimensionale Legierungen und untersuchen den in ihnen auftretenden Übergang von ausgedehnten zu lokalisierten elektronischen Wellenfunktionen. Zwei der drei möglichen zweidimensionalen Phasendiagrammtypen werden dabei zur Auswertung benutzt. Anschließend werden noch ein- und zweidimensionale Legierungen untersucht, in denen nur für den geordneten Fall ausgedehnte Zustände auftreten.

6.1. Systemspezifikationen und Energieintervalle

Für die zwei- und dreidimensionalen Systeme werden die selben Ausmaße wie im vergangenen Kapitel verwendet, die in Tabelle 5.1 (Seite 70) aufgeführt sind. Durch die Symmetrie in der Konzentration, die dadurch zum Vorschein kommt, dass gemäß $c_B = 1 - c_A$ Hauptmaterial A und Störstellenmaterial B miteinander vertauschbar sind, wird die Störstellenkonzentration c_B nur zwischen 0 und 0,5 variiert. Die betrachteten Werte für die Potentialdifferenz Δ ($\Delta = \epsilon_B \geq 0$, $\epsilon_A = 0$, $\epsilon_B \geq \epsilon_A$) werden dem Intervall $\Delta/V = [0, 8]$ entnommen, da sich für $\Delta/V = 8$ bereits ein eigenes, vom Hauptband getrenntes Störstellenband mit einer kleinen Bandlücke ausgebildet hat. Die Zahlen der letztendlich berechneten Realisierungen für jede der Parameterkombinationen (N, Δ, c_B) sind in Anhang A aufgelistet.

Bei der Einteilung der Energieachse in Energieintervalle unter Einhaltung der in Abschnitt 4.3 (S. 56) genannten Forderungen ist zu berücksichtigen, dass die bei den kontinuierlichen Verteilungen aus dem vorigen Kapitel vorliegende Symmetrie in der Zustandsdichte nicht mehr existiert. Daher muss die Forderung fallen gelassen werden, die zu bestimmenden Energieintervalle müssten symmetrisch sein. Auch muss die Anzahl der Intervalle nun nicht mehr unbedingt eine ungerade Zahl sein, sondern kann jede beliebige natürliche Zahl annehmen. Ein Beispiel für eine solche Intervalleinteilung ist in Abbildung 6.1 gezeigt.

6. Ergebnisse der binären Legierung

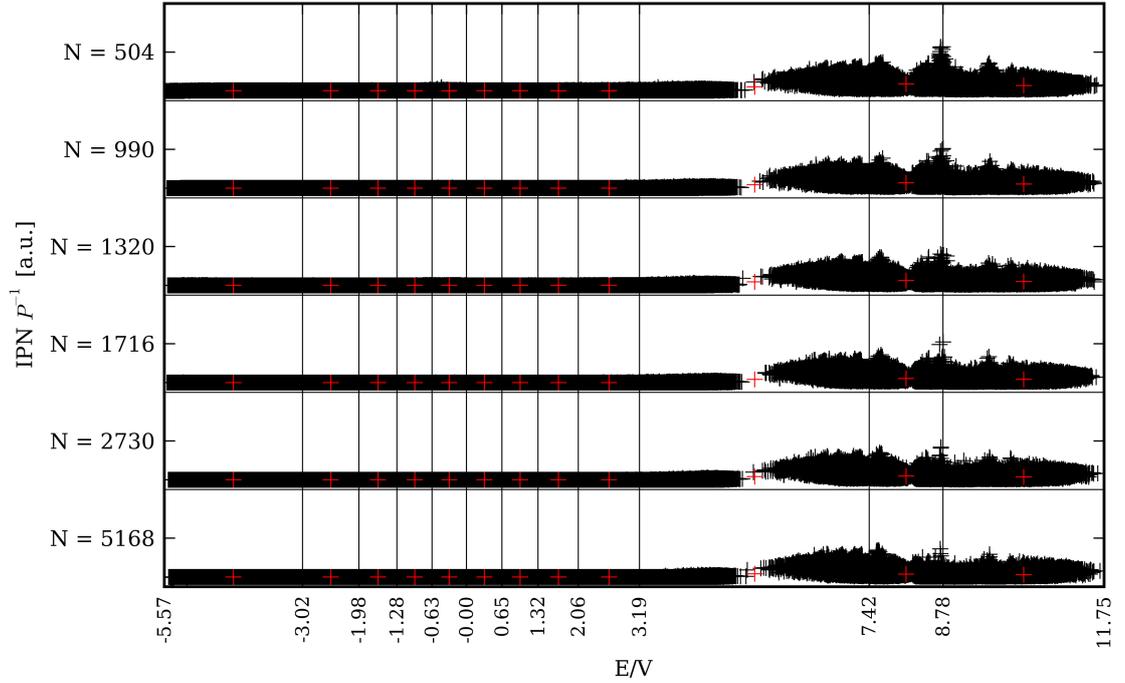


Abbildung 6.1.: Einteilung der Energieachse in Intervalle variabler Breite bei einer dreidimensionalen binären Legierung mit Potentialdifferenz $\Delta/V = 8$ und Störstellen-Konzentration $c_B = 0,2$. Die schwarzen Kreuze skizzieren die vorliegenden (P^{-1}, E) -Wertepaare sämtlicher Realisierungen für jede Systemgröße N . Die roten Kreuze markieren die gemittelten (\bar{P}^{-1}, \bar{E}) -Wertepaare. In jedem Intervall zu jeder Systemgröße N war in diesem Fall eine Mindestanzahl von 12920 Eigenwerten erforderlich, um die Monotoniebedingung zu erfüllen.

6.2. Bestimmung der Mobility Edges

In Abbildung 6.2 ist zu fester Potentialdifferenz $\Delta/V = 8$ für verschiedene Konzentrationen c_B die Abhängigkeit der fraktalen Dimension τ von der Intervallmittelpunktsenergie E angegeben. Liegen keine Störstellen des B-Materials vor ($c_B = 0$), handelt es sich um ein geordnetes System mit ausschließlich ausgedehnten Zuständen ($\tau(E) = d = 3$), und das Band erstreckt sich genau von $-6V$ bis $6V$ (vgl. Tab. 3.1). Für eine Konzentration von 10 % hat sich bereits ein Störstellenband um die Energie $E/V = 8$ gebildet.

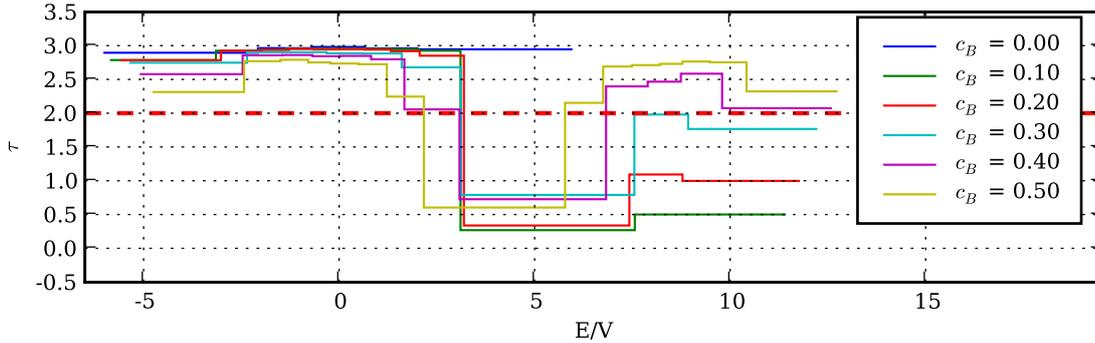


Abbildung 6.2.: Abhängigkeit der fraktalen Dimension τ von der Eigenenergie E für feste Potentialdifferenz $\Delta/V = 8$ und verschiedene Konzentrationen c_B einer dreidimensionalen binären Legierung $A_{1-c_B}B_{c_B}$. Durch die gestrichelte rote Horizontale ist der gewählte Cutoff-Parameter $\tau_c = 2$ markiert.

Durch einen geeigneten Cutoff-Parameter τ_c können wieder lokalisierte ($\tau < \tau_c$) von ausgedehnten Zuständen ($\tau > \tau_c$) unterschieden werden. Mangels Literaturwerte für etwaige kritische Werte der Konzentration c_B oder der Potentialdifferenz Δ wird das Kriterium $\tau_c = 2$ verwendet, welches in Abbildung 6.2 durch eine rote, gestrichelte waagerechte Gerade markiert ist.

Das Störstellenband besteht für geringe Konzentrationen ($c_B = 0,1$) ausschließlich aus lokalisierten Zuständen, wie an den Werten der fraktalen Dimension τ zu erkennen ist, die sämtlich unterhalb des Cutoffs liegen. Die Störstellen liegen weit voneinander entfernt im Kristall verstreut, der zum großen Teil aus A-Material besteht. Die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen den B-Atomen ist so gut wie Null, für den absoluten Temperaturnullpunkt $T = 0$ besitzen Elektronen, die an einer der Störstellen sitzen, also eine verschwindend geringe Mobilität.

Für höhere Konzentrationen nimmt zum Einen das Gewicht des Störstellenbandes zu, erkennbar auch an der Zustandsdichte (Abb. 6.3). Zum Anderen entstehen im Zentrum des Störstellenbandes die ersten ausgedehnten Zustände, wie an den Werten der kritischen Dimension τ über den Cutoff τ_c hinaus erkennbar ist (Abb. 6.2). Auch im Hauptband treten mit zunehmender Störstellenkonzentration Mobility Edges auf, die – ähnlich wie in Kapitel 5 bei den kontinuierlichen Verteilungsfunktionen – mit steigender Unordnung in Richtung Bandmitte wandern. Die durch den Cutoff $\tau_c = 2$ gefundenen

6. Ergebnisse der binären Legierung

Mobility Edges sind auch im Diagramm der Zustandsdichte (Abb. 6.3) markiert.

Im Unterschied zu vorher kollabieren die Mobility Edges für die maximale Unordnung, die durch die Konzentration $c_B = 0,5$ erreicht werden kann, aber nicht in der Hauptbandmitte. Die Potentialdifferenz ist nach oben hin aber nicht beschränkt und erhöht ebenfalls die Unordnung des Systems. Es kann aus den vorliegenden Berechnungen nicht zweifelsfrei geschlussfolgert werden, ob bei binären Legierungen eine kritische Gesamtunordnungsstärke existiert, ab der die Mobility Edges verschwinden und alle Zustände des Systems lokalisiert sind. Dennoch ist anzunehmen, dass immer ausgedehnte Zustände vorliegen werden, denn unabhängig von der Potentialdifferenz Δ gibt es immer eine Atomsorte (A oder B), der mindestens 50 % der Gesamtatomzahl angehören und die damit Cluster bilden können, entlang derer immer eine Bewegung eines Elektrons durch den Kristall möglich ist.

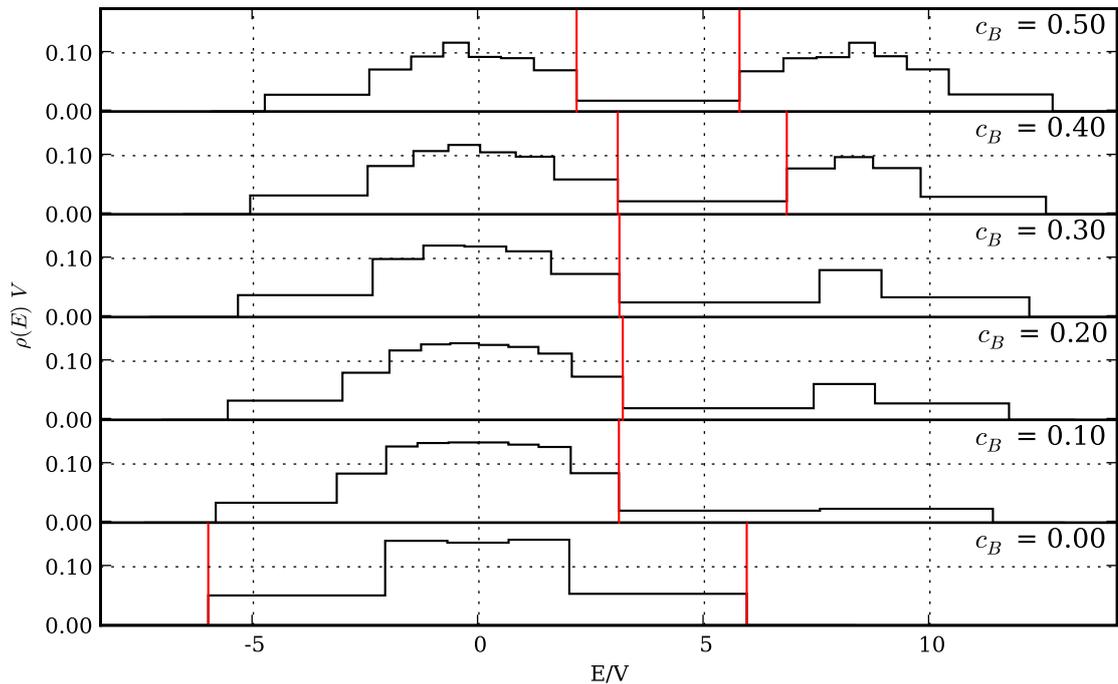


Abbildung 6.3.: Zustandsdichten für feste Potentialdifferenz $\Delta/V = 8$ und verschiedene Konzentrationen c_B einer dreidimensionalen binären Legierung $A_{1-c_B}B_{c_B}$. Die roten senkrechten Linien markieren die aufgrund des Cutoff-Parameters $\tau_c = 2$ gefundenen Mobility Edges.

6.3. Phasendiagramm der Konzentration

Es werden nun zunächst dreidimensionale binäre Legierungen betrachtet. In Abbildung 6.4a kann der Einfluss der Störstellen-Konzentration c_B auf den Bandverlauf der frak-

6.3. Phasendiagramm der Konzentration

talen Dimension $\tau(E)$ analysiert werden. Für $c_B = 0$ liegt keine Unordnung vor, also erstreckt sich das Band symmetrisch von $-6V$ bis $6V^1$ (vgl. Tab. 3.1). Für eine Konzentration des B-Materials von 10 % haben sich bereits lokalisierte Zustände in der Nähe von $\Delta = \epsilon_B = 8$ gebildet. Ist die Potentialdifferenz Δ wie hier groß genug, entsteht eine Bandlücke, und man spricht von Hauptband und Störstellenband (*engl.* Impurity Band). Ab einer gewissen Konzentration $c_{B,0}(\Delta)$ tauchen in der Mitte des Störstellenbandes auch ausgedehnte Zustände auf, erkennbar daran, dass τ den hier angenommenen Cutoff-Parameter $\tau_c = 2$ übersteigt. Für $c_B = 0,5$ liegen schließlich genauso viele Kristallionen vom Material B wie Kristallionen vom Material A vor. Beide Bänder enthalten sowohl ausgedehnte als auch lokalisierte Zustände, die durch jeweils zwei Mobility Edges voneinander getrennt sind.

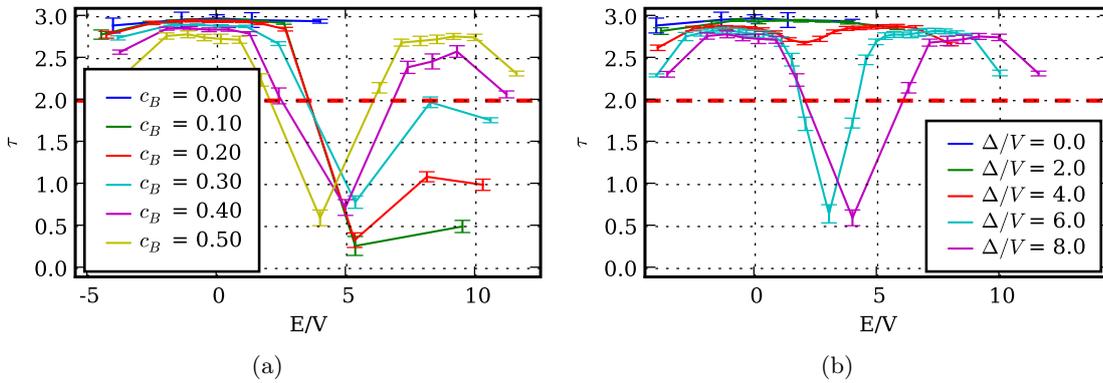


Abbildung 6.4.: Abhängigkeit der fraktalen Dimension τ von der Energie E bei dreidimensionalen binären Legierungen (a) für feste Potentialdifferenz $\Delta/V = 8$ und verschiedene Konzentrationen des B-Materials c_B und (b) für feste Konzentration $c_B = 0,5$ und verschiedene Potentialdifferenzen Δ . Die Fehlerbalken entsprechen 95-%-Konfidenzintervallen, die die lineare Regression zur Bestimmung der Steigung $-\tau/d$ aus den IPN- N -Daten ermittelt hat.

Im Phasendiagramm (Abb. 6.5a) werden für jede Konzentration die gefundenen Mobility Edges aufgetragen. Es ergibt sich ein ähnliches Bild wie in der Literatur (Abb. 3.8, S. 3.8) [PRS03]. Allerdings sind die Mobility Edges hier mit einer recht großen Ungenauigkeit bestimmt worden (Fehlerbalken), da die Energieintervalle, innerhalb derer die IPN-Werte gemittelt wurden, recht groß sein müssen (Abb. 6.6a), um die Bedingung zu erfüllen, dass die Funktion $\tau(E)$ von Intervall zu Intervall im Fall der binären Legierung höchstens zweimal monoton steigen und zweimal wieder monoton fallen darf.

¹Da in der Abbildung nur die zugrunde liegenden Intervallmittelpunkte gezeigt sind, können die Bandkanten in dieser Darstellungsform allerdings nicht abgelesen werden.

6. Ergebnisse der binären Legierung

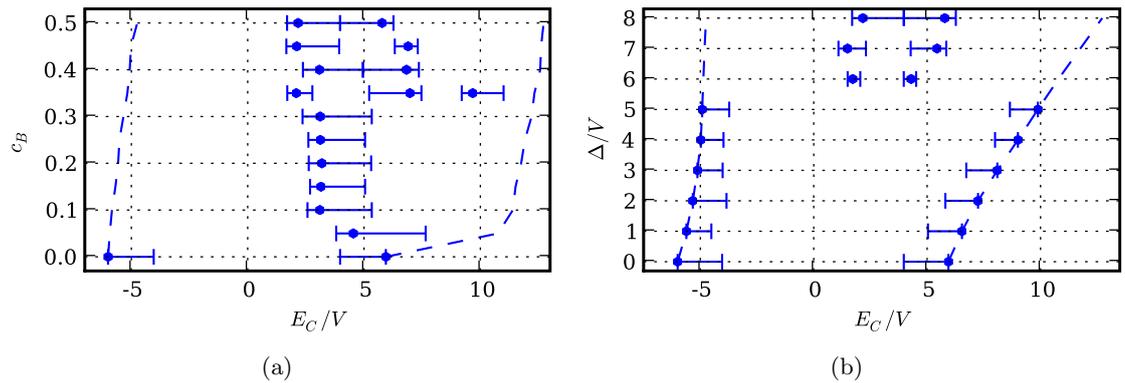


Abbildung 6.5.: Phasendiagramme der dreidimensionalen binären Legierung (a) bezüglich der Konzentration c_B und (b) bezüglich der Potentialdifferenz Δ . Die Fehlerbalken sind die Fehler, mit denen die Mobility Edges bestimmt wurden und entsprechen der halben Breite der beiden angrenzenden Intervalle.

6.4. Phasendiagramm der Potentialdifferenz

Nun wird umgekehrt der Einfluss der Potentialdifferenz Δ bei fester Konzentration $c_B = 0,5$ untersucht (Abb. 6.4b). Für $\Delta = 0$ ist wieder keine Unordnung vorhanden, und das Band ist das normale Tight-Binding-Band mit Bandkanten $E = [-6V, 6V]$. Ab einer gewissen Potentialdifferenz $\Delta_0(c_B)$ tauchen – abhängig von der Konzentration – in der Mitte des Energiespektrums und an den Bandkanten lokalisierte Zustände auf. Die Energieauflösung reicht bei der berechneten Anzahl von Zufallsrealisierungen möglicherweise nicht aus, um die Mobility Edge an den Bandkanten zu finden, da die Intervalle dort eine beträchtliche Größe haben und die in den Intervallen ermittelte fraktale Dimension τ noch über $\tau_c = 2$ liegt. Dies ist auch in den Phasendiagrammen in Abbildung 6.5 zu beobachten. Die Energieauflösung (Größe der Intervalle) und damit die Genauigkeit, mit der die Mobility Edges bestimmt werden, müsste viel höher sein, um ein exaktes Phasendiagramm zu erhalten. Dies ist auch in Abbildung 6.6b zu erkennen: Nicht für jede Potentialdifferenz werden alle zu erwartenden Mobility Edges gefunden, da die Intervalle zu groß bzw. ihre Anzahl zu klein ist, die Energieachse also nicht fein genug diskretisiert wird.

6.5. Ein- und zweidimensionale binäre Legierungen

Bei ein- und zweidimensionalen Systemen wird erwartet, dass schon bei der kleinsten Unordnung keine ausgedehnten Zustände mehr existieren können. Entsprechend findet ein Phasenübergang vom metallischen ins isolierende Regime wenn überhaupt nur für kleinste Unordnungen nahe am Fall des perfekten Kristalls statt ($\Delta = 0$, $c_B = 0$, $c_B = 1$).

In Abbildung 6.7 werden wie zuvor für feste Potentialdifferenz Δ die Konzentration

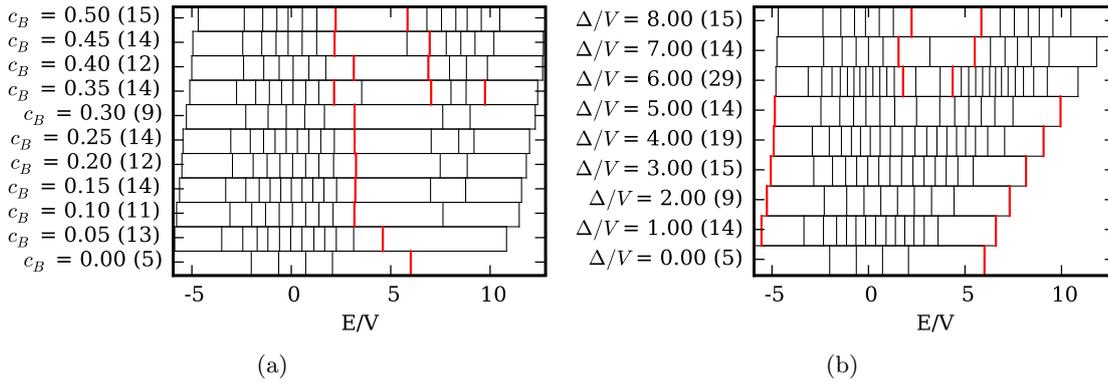


Abbildung 6.6.: Verwendete Energieintervalle zur Mittelung der IPN-Rohdaten, aufgetragen (a) für feste Potentialdifferenz $\Delta/V = 8$ und (b) für feste Konzentration $c_B = 0,5$. Die Lage der gefundenen Mobility Edges E_c aus den Phasendiagrammen in Abbildung 6.5 ist rot markiert.

c_B bzw. für feste Konzentration c_B die Potentialdifferenz Δ variiert, diesmal für $d = 1$. Ohne Unordnung liegen die gewöhnlichen eindimensionalen Tight-Binding-Systeme vor, deren Band sich von $-2V$ bis $2V$ erstreckt (vgl. Tab. 3.1, S. 23). Die fraktale Dimension τ besitzt für alle Zustände des Systems den Wert $\tau = d = 1$. Schon für die kleinsten betrachteten Unordnungen, also $\Delta/V = 1$ oder $c_B = 0,05$, liegt die fraktale Dimension aller Zustände schon bei $\tau = 0$, die also perfekt an einem der Gitterplätze lokalisiert sind.

Bei zweidimensionalen binären Legierungen hingegen lässt sich bei τ eine Abhängigkeit von den Unordnungsparametern Δ und c_B und von der Energie E erkennen (Abb. 6.8), wengleich sich die fraktale Dimension stets unterhalb von $\tau = 2$ befindet, so dass nach der in dieser Arbeit vorgestellten Interpretation alle Zustände lokalisiert sind.

6.6. Fazit

Das Modell der binären Legierung, das in Kapitel 3 vorgestellt wurde, war Gegenstand dieses Kapitels. Dabei kam die numerische Methodik zum Einsatz, die in Kapitel 4 erläutert wurde. Im Unterschied zur Auswertung der Modelle mit kontinuierlicher Verteilung der Gitterpotentiale (siehe Kapitel 5) entschieden hier gleich zwei Parameter über die dem System innewohnende Unordnung, nämlich die Differenz Δ zwischen den beiden Potentialstärken der beiden Materialien A und B sowie die Konzentration des Materials B c_B .

Nachdem auf den betrachteten Parameterraum und die Besonderheiten der Bestimmungsmethoden der Mobility Edges in Abschnitt 6.1 eingegangen wurde, wurde für jeden der Unordnungsparameter ein entsprechendes Phasendiagramm vorgestellt, das die Abhängigkeit der Lage der Mobility Edges vom Parameter Δ bzw. c_B angibt. Danach

6. Ergebnisse der binären Legierung

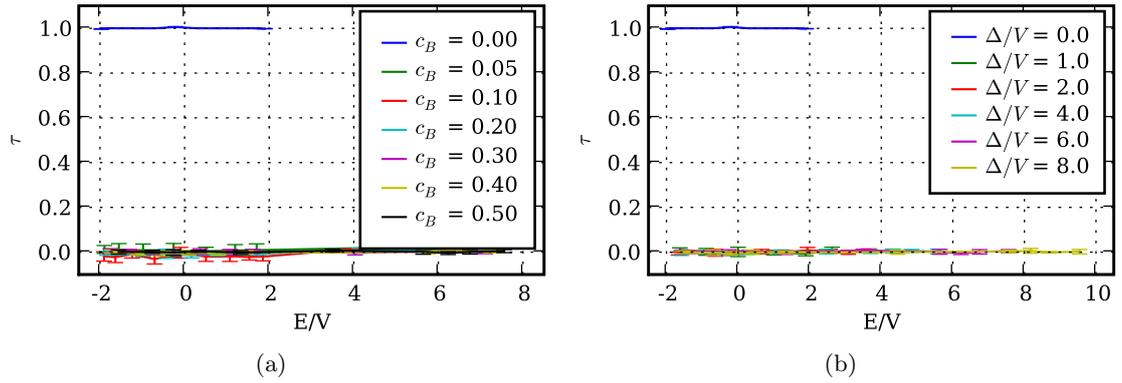


Abbildung 6.7.: Abhängigkeit der fraktalen Dimension τ von der Energie E bei eindimensionalen binären Legierungen (a) für feste Potentialdifferenz $\Delta/V = 6$ und verschiedene Konzentrationen des B-Materials c_B und (b) für feste Konzentration $c_B = 0,5$ und verschiedene Potentialdifferenzen Δ . Die Fehlerbalken entsprechen 95%-Konfidenzintervallen, die die lineare Regression zur Bestimmung der Steigung $-\tau/d$ aus den IPN- N -Rohdaten ermittelt hat.

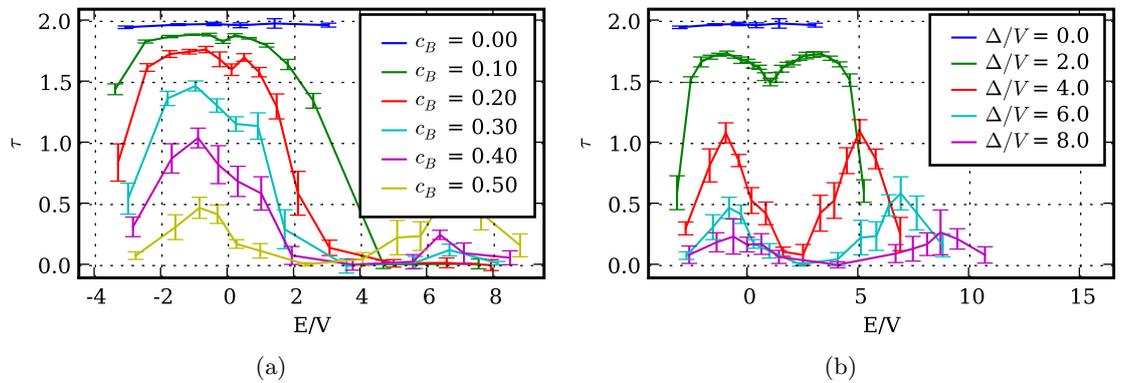


Abbildung 6.8.: Abhängigkeit der fraktalen Dimension τ von der Energie E bei zweidimensionalen binären Legierungen (a) für feste Potentialdifferenz $\Delta/V = 6$ und verschiedene Konzentrationen des B-Materials c_B und (b) für feste Konzentration $c_B = 0,5$ und verschiedene Potentialdifferenzen Δ . Die Fehlerbalken entsprechen 95%-Konfidenzintervallen, die die lineare Regression zur Bestimmung der Steigung $-\tau/d$ aus den IPN- N -Rohdaten ermittelt hat.

wurden noch kurz ein- und zweidimensionale binäre Legierungen vorgestellt.

Prinzipiell wäre bei zwei Unordnungsparametern auch ein dreidimensionales Phasendiagramm mit den Achsen (E_c, Δ, c_B) denkbar, in der die Phasen-Trajektorie als Fläche im dreidimensionalen Raum darstellbar ist. Aufgrund der geringen Datengrundlage wurde dies innerhalb dieser Arbeit aber nicht versucht. Der dritte mögliche Schnitt durch dieses 3D-Phasendiagramm, nämlich ein zweidimensionales Phasendiagramm mit den Achsen (Δ, c_B) ist in der Literatur bereits unternommen worden [PRS03]. Auch dieser Weg wurde in der vorliegenden Arbeit aber nicht besprochen, da hierfür für feste Mobility Edge E_c die beiden Unordnungsparameter hätten bestimmt werden müssen, was nur für eine größere Energieauflösung und mehr Systeme zu unterschiedlichen Parameterkombinationen vorstellbar wäre, d. h. die Parameterebene, die durch Δ und c_B aufgespannt wird, müsste viel feiner diskretisiert werden. Die Anzahl der zu berechnenden Systeme steigt bei binären Legierungen mit dem Quadrat der gewählten Diskretisierungsschrittzahl der beiden Unordnungsparameter.

Probleme und Verbesserungsvorschläge

Wie schon zuvor bei den kontinuierlichen Verteilungen wird auch bei den Legierungssystemen deutlich, wie die geringe Anzahl von Realisierungen die Genauigkeit in der Bestimmung der ME begrenzt, was wiederum mit dem hohen Bedarf von Festplattenkapazität der verwendeten Methode zusammenhängt. Daher lautet auch hier das Fazit, dass eine Überarbeitung bzw. Ersetzung desjenigen Teils der Methode, der für die großen Eigenzustands-Datenmengen sorgt, unumgänglich scheint, falls physikalisch relevante Ergebnisse mit höherer Genauigkeit erzielt werden sollen. Sollte die zukünftige Zielsetzung darin bestehen, die dreidimensionalen Legierungssysteme zu behandeln, lässt sich aber auch schon eine leichte Verbesserung aufgrund der Tatsache erreichen, dass dann die gesamte zur Verfügung stehende Speicherkapazität zur Untersuchung dieses einen Modells benutzt werden könnte.

Das Problem, dass bei der vorgestellten Methodik ein Cutoff-Parameter τ_c zur Unterscheidung von lokalisierten und ausgedehnten Zuständen nötig ist, kommt bei den binären Legierungen besonders zum Tragen, da hier nicht einmal Literaturwerte für bestimmte kritische Parameterwerte bekannt sind, an denen der Cutoff-Parameter hätte angepasst werden können. Ohnehin sollte die Methode in der Zukunft wenn möglich auf die Anwendung der multifraktalen Analyse erweitert werden, was durch das in Abschnitt 4.5 angesprochene Box Size Scaling (BSS) möglich wäre.

Spätestens bei der Behandlung von binären Legierungen mit der Methode der Energieintervalle variabler Breite stellt sich die Frage, ob die Bedingung, die die Breite der einzelnen Intervalle festlegt, sinnvoll ist. Die vorgegebene Mindestanzahl von Eigenwerten, die innerhalb jedes Intervalls liegen soll, in Kombination mit der Monotoniebedingung (höchstens zweimal monoton steigen und zweimal monoton fallen) sorgt dafür, dass einige wichtige Details in den Ergebnissen verloren gehen, wie Abbildung 6.9 zeigt. Das liegt daran, dass im Hauptband, wo die Funktion $\tau(E)$ eine nahezu waagerechte Tangente besitzt, die Intervalle sehr groß gewählt werden müssen, um die Fluktuationen vollständig zu unterdrücken und dafür zu sorgen, dass nur ein Maximum in der Mitte des Haupt-

6. Ergebnisse der binären Legierung

bandes vorliegt und die Funktion bis zu diesem Maximum monoton steigt und dahinter wieder monoton abfällt. Dieses Problem bestand prinzipiell auch schon bei den kontinuierlichen Verteilungen im Vorkapitel, fällt hier aber besonders unangenehm auf, da das Hauptband eine immense Mindestanzahl von Eigenwerten je Energieintervall erzwingt und im Störstellenband dann dieselbe Mindestanzahl verwendet wird. Eine Modifikation des Algorithmus', der die Größe der einzelnen Intervalle festlegt, wäre also wünschenswert. Dabei sollte es keine feste Mindestanzahl mehr geben, sondern der Algorithmus sollte sich zukünftig direkt an der Stetigkeit der Funktion $\tau(E)$ orientieren. Beispielsweise könnte dafür gesorgt werden, dass die zweite Ableitung (Krümmung) der Funktion gewisse Werte niemals über- bzw. unterschreitet, sich die Steigung also nicht zu schnell ändert. So oder auf ähnliche Weise könnte in Zukunft dafür gesorgt werden, dass die Intervalle wirklich nur dort vergrößert werden, wo dies durch eine nahezu waagerechte Tangente auch wirklich notwendig ist.

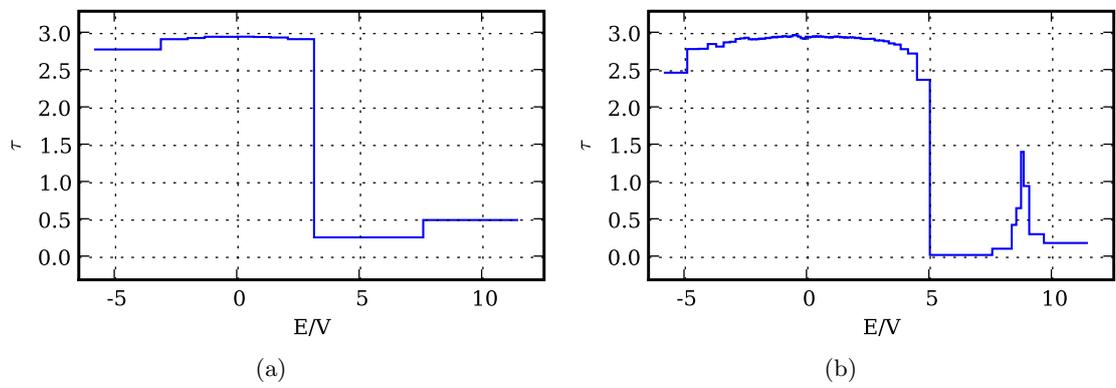


Abbildung 6.9.: Bandverlauf der fraktalen Dimension τ einer dreidimensionalen binären Legierung für Potentialdifferenz $\Delta/V = 8$ und Konzentration $c_B = 0,1$ (a) unter Berücksichtigung der Monotoniebedingung (11 Intervalle) und (b) bei Verwendung von kleineren Intervallen unter Verletzung der Monotoniebedingung (73 Intervalle). Die Breite der Stufen entspricht der Breite des jeweiligen Energieintervalls, innerhalb dessen über die IPN-Werte gemittelt wurde. Die Höhe jeder Stufe berechnet sich aus der Steigung $-\tau/d$ der doppelt-logarithmisch aufgetragenen, gemittelten IPN- N -Rohdaten.

7. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein einfaches Tight-Binding-Modell für ungeordnete Festkörpersysteme zur Untersuchung von Lokalisierungsphänomenen vorgestellt. Dabei kamen vier verschiedene Zufallsverteilungen für das Gitterpotential zum Einsatz, drei kontinuierliche (Box-, Normal- und Lorentzverteilung) sowie eine diskrete (binäre Legierungen). Die benötigten Grundlagen zum Verständnis des verwendeten Tight-Binding-Modells und der einfachen Gitterstruktur wurden in Kapitel 2 kurz beschrieben. In Kapitel 3 wurden die verwendeten Modelle und die in der Literatur bereits bekannten grundlegenden Eigenschaften und Effekte dieser (oder ähnlicher) Modelle vorgestellt. Dazu gehören der Einfluss der Unordnungsstärke auf die Zustandsdichte, die nach dem Lokalisierungscharakter der Zustände voneinander unterscheidbaren Bandbereiche, die Art des in dreidimensionalen Systemen existierenden Metall-Isolator-Phasenübergangs und die mikroskopische Interpretation von Lokalisierung und Delokalisierung.

Das darauf folgende Kapitel stellte die numerischen Methoden vor, die zur Untersuchung der Modellsysteme in dieser Arbeit verwendet wurden. Die Berechnung der Zustände fand durch exakte Diagonalisierung statt. Hierfür wurde auch der numerische Aufwand (Ausführungszeit sowie Verbrauch von Computerspeicherressourcen) diskutiert. Im Anschluss daran wurde beschrieben, wie aus den Eigenzuständen ein Maß für den Lokalisierungscharakter abgeleitet werden kann, was zur Verwendung der Inverse Participation Number (IPN) geführt hat. Durch die Ermittlung des Skalenverhaltens (FSS) der IPN wurde eine Einschätzung des Lokalisierungscharakters für große Systeme im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$ gegeben, was durch Definition der fraktalen Dimension τ quantifiziert wurde. Ebenfalls wurde untersucht, welcher Verteilung die IPN-Rohdaten zu fester Energie E unterliegen (logarithmische Normalverteilung).

Es wurde eine Methode vorgestellt, die Energieachse in Intervalle variabler Breite zu unterteilen, nicht nur um das Skalenverhalten zur ermitteln, sondern auch um Fluktuationen in den IPN-Rohdaten auszugleichen und einen aussagekräftigen empirischen Mittelwert mit geringem Standardfehler ermitteln zu können. Anschließend wurde dargestellt, wie die Mobility Edges (ME) E_c in dieser Arbeit ermittelt wurden, die innerhalb des Bandes Bereiche ausgedehnter und lokalisierter Zustände voneinander trennen, und diskutiert, wie die Genauigkeit bei der Bestimmung der ME mit der Breite der Intervalle zusammenhängt. Abschließend wurde ein Ausblick auf die Anwendung der multifraktalen Analyse (MFA) gegeben, welche aus numerischen Gründen (Verstärkung von Fluktuationen für negative Momente der Wahrscheinlichkeitsdichte) in dieser Arbeit nicht durchgeführt wurde.

Die Auswertung wurde nach der Art der Wahrscheinlichkeitsverteilung gegliedert, der die Gitterpotentiale ϵ_n unterliegen. In Kapitel 5 wurden zunächst nur Systeme mit kontinuierlicher Wahrscheinlichkeitsverteilung behandelt, in Kapitel 6 folgten Systeme mit

7. Zusammenfassung

diskreter Wahrscheinlichkeitsverteilung (binäre Legierungen). Im ersten Fall ist besonders das Verhalten der fraktalen Dimension τ in der Bandmitte in Abhängigkeit von der Unordnungsstärke interessant. Bei dreidimensionalen Systemen kann auf diese Weise die kritische Unordnung W_c bestimmt werden, ab der das System nur noch lokalisierte Zustände enthält. Es fand ein Vergleich für diesen Übergang in der Bandmitte statt, sowohl nach Dimensionalität d als auch nach Art der kontinuierlichen Verteilung.

Durch Einführung eines Cutoff-Parameters τ_c wurden im dreidimensionalen Fall die Mobility Edges (ME) E_c bestimmt, die ausgedehnte und lokalisierte Zustände voneinander trennen. Damit konnte für jede Verteilung das jeweilige Phasendiagramm erstellt werden. Durch eine Anpassung des Cutoff-Parameters an Literaturwerte für die kritische Unordnung folgt die Form der Trajektorien des Phasenübergangs tatsächlich der Literatur [BSK87]. Allerdings ist die Bestimmung mit dieser Methode aufgrund der geringen Anzahl berechneter Realisierungen und der geringen Systemgrößen mit einem großen Fehler behaftet.

Für den Cutoff-Parameter müssen teilweise kleinere Werte als erwartet angenommen werden, um die Literaturwerte für die kritische Unordnung zu reproduzieren. Außerdem ist er bei jeder Verteilung anders zu wählen, so dass offenbar kein universeller Cutoff-Parameter existiert und dieser nur ein weiterer freier Parameter ist, der an Literaturwerte angepasst werden muss. Somit leistet diese Methode keine eindeutige Bestimmbarkeit des Phasenübergangs. Eine Erweiterung der Methodik auf die multifraktale Analyse (MFA) verspricht eindeutige Ergebnisse. Dazu wäre allerdings eine Modifikation der Bestimmungsmethode des Skalenverhaltens des q -ten Moments der Wahrscheinlichkeitsdichte notwendig (evtl. Box Size Scaling, BSS). Bei dem verwendeten System Size Scaling (SSS) treten für negative Momente q immense numerische Fehler auf [VRR08]. Außerdem müsste die Genauigkeit (Anzahl der Realisierungen, Größe der Systeme) auch unter Verwendung der MFA drastisch erhöht werden, andernfalls werden in einem zu großen Bereich um den wahren Phasenübergang herum Zustände als multifraktal erkannt [Mil00]. Iterative Methoden, die den Phasenübergang für einen gegebenen Bandbereich mit gewünschter Genauigkeit selbstkonsistent bestimmen, sind für zukünftige Untersuchungen – ob MFA oder nicht – der in dieser Arbeit vorgestellten Methode vorzuziehen, in der weitere Realisierungen eines Systems 'von Hand' hinzugefügt werden mussten.

Die Auswertung der binären Legierungen in Kapitel 6 geschah wie die der kontinuierlichen Verteilungen, außer, dass die Energieintervalle, innerhalb derer die IPN-Daten gemittelt werden, nun nicht mehr inversionssymmetrisch zur Bandmitte liegen konnten, da eine solche Symmetrie bei Legierungen i. Allg. nicht existiert. Da es beim vorgestellten Modell für binäre Legierungen zwei Parameter gibt, welche die Unordnung des Systems beeinflussen (die Differenz Δ zwischen den beiden Gitterpotentialen der beiden Legierungskomponenten A und B und die Konzentration c_B des B-Materials), ist der Phasenraum des Metall-Isolator-Übergangs, der bei dreidimensionalen Legierungen ebenfalls erwartet wird, dreidimensional. In dieser Arbeit wurden lediglich zwei Schnitte durch dieses dreidimensionale Phasendiagramm betrachtet, zum einen ein Phasendiagramm zwischen c_B und E_c bei festem Δ und zum anderen ein Phasendiagramm zwischen Δ und E_c bei festem c_B . Um die Phasenübergangsflächen im dreidimensionalen Phasendiagramm darzustellen, müsste die Parameterebene, die durch die beiden Un-

ordnungsparameter aufgespannt wird, viel feiner diskretisiert werden, als das bei der vorgestellten Methode aufgrund des hohen Festplattenspeicherverbrauchs möglich ist. Es wäre zudem wünschenswert, wenn für jede einzelne der Parameterkombinationen um ein Vielfaches mehr Realisierungen berechenbar wären, so dass die Genauigkeit, mit der die einzelnen Mobility Edges bestimmt werden können, ebenfalls erhöht wird. Dies führt wieder zur Schlussfolgerung, dass in Zukunft die Methodik hin zu iterativen Algorithmen zur Bestimmung der Eigenwerte und der fraktalen Dimension τ modifiziert werden sollte. Aber auch eine Beschränkung auf ein spezielles Modell (z. B. binäre Legierung) und auf einen kleineren Parameterraum (z. B. $d = 3$) würden schon helfen, da dann die gesamte zur Verfügung stehende Speicherkapazität der Rechneranlagen für dieses Modell zur Verfügung stünde.

Die anschließend noch erfolgte Analyse ein- und zweidimensionaler binärer Legierungen bot keine nennenswerten Unterschiede zu ihren Gegenstücken mit kontinuierlichen Verteilungen. Während für eindimensionale Legierungen die fraktale Dimension sehr rasch mit steigender Unordnung auf Null abfällt, benötigt sie für zweidimensionale Systeme länger. Dass ein Phasenübergang erst in dreidimensionalen Systemen möglich ist, kann mit Hilfe der vorgestellten Methodik nicht gefolgert werden, ist aber aus der Literatur bekannt (One-parameter Scaling Theory) [AALR79].

Der Autor ist der Meinung, dass die vorgestellte Methodik mit der Einteilung der Energieachse in Intervalle variabler Breite prinzipiell gut funktionieren würde, jedoch nur für eine viel höhere Anzahl von Realisierungen bzw. für viel größere Systeme, so dass die Energieachse unter Berücksichtigung der Stetigkeits- bzw. Monotoniebedingungen viel feiner diskretisiert werden könnte. Dann wären die gezeigten Stufendiagramme so feinstufig, dass der funktionale Zusammenhang $\tau(E)$ zwangsläufig zu genaueren Ergebnissen führen würde. Dafür sind aber offenbar um Größenordnungen mehr Realisierungen notwendig, als berechnet werden konnten. Die Erfahrung hat gezeigt, dass sich die Fehlerbalken der ME nur sehr langsam mit der Hinzunahme von weiteren Realisierungen verkleinern. Allerdings können die Kriterien zur Auswahl der Intervalle auch noch verbessert werden. Momentan fallen insbesondere bei der Behandlung von binären Legierungen Probleme bei der Intervalleinteilung auf, die der Algorithmus mit Bandbereichen hat, in denen die Funktion $\tau(E)$ eine nahezu waagerechte Tangente besitzt, weil schon kleinste Fluktuationen hier zu einer unnötigen Verbreiterung der Intervalle in allen Bandbereichen führen (siehe Kap. 6). Denkbar wären Intervalle variabler Breite, die nicht einmal mehr eine gemeinsame Mindestanzahl von Eigenwerten aufweisen, sondern deren Breite sich nur noch nach gewissen Stetigkeitsbedingungen bezüglich einiger Nachbarintervalle richtet. Damit könnten die Fluktuationen von $\tau(E)$ in Bereichen mit nahezu waagerechter Tangente begrenzt werden, aber es könnte gleichzeitig in Bereichen mit steilerer Tangente eine feinere Diskretisierung der Energieachse – bei schon bestehendem Datenumfang – ermöglicht werden.

Aufgrund der hohen Datenmengen, die die direkte Diagonalisierung verursacht, ist eine Umgehung der Berechnung der kompletten Eigenvektorspektren wünschenswert. Möglicherweise kann ein geeignetes Lokalisierungsmaß auf einem anderen Weg ermittelt werden. Zum einen könnten Algorithmen zur näherungsweise Bestimmung nur einiger Eigenzustände in der Nähe einer vorgegebenen Energie benutzt werden, wie z. B.

7. Zusammenfassung

die Lanczos-Methode [Lan51] sowie Weiterentwicklungen hiervon. Andererseits existieren bereits viele Ansätze, die gänzlich ohne die Berechnung der Eigenvektoren auskommen, z. B. die sog. LD-Methode (Local Density) [SSB⁺10], die MFA durch Auswertung der PDF (Probability Density Function) [RVR09] oder auch die Transfermatrixmethode (TMM) [MK81, Mil00, RS03, ZSEG85]. Vorzuziehen sind Methoden, die durch Vorgabe der gewünschten Genauigkeit die Lage des Phasenübergangs für jede Unordnungsparameterkombination und jede Stelle des Bandes iterativ (selbstkonsistent) bestimmen.

Nach Einbringen der verschiedenen Verbesserungen könnten Ergebnisse mit höherer numerischer Genauigkeit produziert werden, die ohne die Einführung und die Anpassung eines Cutoff-Parameters auskommen und so den Lokalisierungscharakter eines Zustands von sich heraus bestimmen. Dann wäre z. B. eine Bestimmung sämtlicher kritischer Parameter, die innerhalb eines Legierungsphasendiagramms auftreten, denkbar.

Danksagung

Ich möchte den Mitgliedern meiner Arbeitsgruppe danken, namentlich Stefan Barthel und Daniel Mourad, die mir während der vergangenen neun Monate sehr geholfen haben, sowie meinem Betreuer Prof. Dr. Gerd Czycholl, der für Fragen immer eine offene Tür hatte. Außerdem möchte ich unseren Technikern Andreas Beuthner und Klaus Bower danken, denn ohne professionelle technische Unterstützung und den Aufbau zuverlässiger Rechenanlagen wären Arbeiten im Bereich der numerischen theoretischen Physik undenkbar. Dr. Stefan Kettemann danke ich für die Erstellung des Zweitgutachtens.

A. Übersicht über berechnete Realisierungszahlen

Da die gewonnenen Ergebnisse und die Größe der Fehlerbalken in den Diagrammen maßgeblich von der Anzahl der berechneten Realisierungen abhängt, werden hier die Parameter und die Realisierungszahlen sämtlicher Systeme angegeben, die der Arbeit zugrunde liegen. Damit soll der allgemeinen Dokumentationspflicht entsprochen werden und die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse ist prinzipiell gewährleistet.

Tabelle A.1.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des eindimensionalen Tight-Binding-Modells mit Boxverteilung (Anderson-Modell) für alle Kombinationen aus Systemgröße N und Unordnungsparameter W .

1D		N					
Box		500	900	1300	1700	2700	5100
W/V	0,0	68	34	26	20	12	6
	0,5	68	34	26	20	12	6
	1,0	68	34	26	20	12	6
	2,0	68	34	26	20	12	6
	10,0	68	34	26	20	12	6
	20,0	68	34	26	20	12	6
	30,0	68	34	26	20	12	6

Tabelle A.2.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des eindimensionalen Tight-Binding-Modells mit Normalverteilung für alle Kombinationen aus Systemgröße N und Unordnungsparameter W .

1D		N					
Normal		500	900	1300	1700	2700	5100
W/V	0,0	68	34	26	20	12	6
	0,5	68	34	26	20	12	6
	1,0	68	34	26	20	12	6
	2,0	68	34	26	20	12	6
	4,0	68	34	26	20	12	6
	6,0	68	34	26	20	12	6
	8,0	68	34	26	20	12	6
	10,0	68	34	26	20	12	6
	20,0	68	34	26	20	12	6
	30,0	68	34	26	20	12	6

A. Übersicht über berechnete Realisierungszahlen

Tabelle A.3.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des eindimensionalen Tight-Binding-Modells mit Lorentzverteilung für alle Kombinationen aus Systemgröße N und Unordnungsparameter W .

1D		N					
Lorentz		500	900	1300	1700	2700	5100
W/V	0,0	68	34	26	20	12	6
	0,2	68	34	26	20	12	6
	0,5	68	34	26	20	12	6
	1,0	68	34	26	20	12	6
	2,0	68	34	26	20	12	6
	10,0	68	34	26	20	12	6
	30,0	68	34	26	20	12	6

Tabelle A.4.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des zweidimensionalen Tight-Binding-Modells mit Boxverteilung (Anderson-Modell) für alle Kombinationen aus Systemgröße N und Unordnungsparameter W .

2D		N					
Box		506	930	1332	1722	2756	5112
W/V	0,0	68	34	26	20	12	6
	2,0	68	34	26	20	12	6
	4,0	68	34	26	20	12	6
	6,0	68	34	26	20	12	6
	8,0	68	34	26	20	12	6
	10,0	68	34	26	20	12	6
	30,0	68	34	26	20	12	6

Tabelle A.5.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des zweidimensionalen Tight-Binding-Modells mit Normalverteilung für alle Kombinationen aus Systemgröße N und Unordnungsparameter W .

2D		N					
Normal		506	930	1332	1722	2756	5112
W/V	0,0	68	34	26	20	12	6
	2,0	68	34	26	20	12	6
	4,0	68	34	26	20	12	6
	6,0	68	34	26	20	12	6
	8,0	68	34	26	20	12	6
	10,0	68	34	26	20	12	6
	30,0	68	34	26	20	12	6

Tabelle A.6.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des zweidimensionalen Tight-Binding-Modells mit Lorentzverteilung für alle Kombinationen aus Systemgröße N und Unordnungsparameter W .

2D		N					
Lorentz		506	930	1332	1722	2756	5112
W/V	0,0	68	34	26	20	12	6
	1,0	68	34	26	20	12	6
	2,0	68	34	26	20	12	6
	3,0	68	34	26	20	12	6
	4,0	68	34	26	20	12	6
	6,0	68	34	26	20	12	6
	10,0	68	34	26	20	12	6
	20,0	68	34	26	20	12	6
	30,0	68	34	26	20	12	6

Tabelle A.7.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des dreidimensionalen Tight-Binding-Modells mit Boxverteilung (Anderson-Modell) für alle Kombinationen aus Systemgröße N und Unordnungsparameter W .

3D		N					
Box		504	990	1320	1716	2730	5168
W/V	0,0	68	34	26	20	11	6
	2,0	68	34	26	20	12	6
	4,0	68	34	26	20	12	6
	6,0	68	34	26	20	12	6
	8,0	68	34	26	20	12	6
	10,0	68	34	26	20	12	6
	12,0	680	340	260	200	120	60
	14,0	680	340	260	200	120	60
	15,0	1000	680	520	400	240	112
	16,0	680	340	260	200	120	60
	16,2	680	340	260	200	120	60
	16,4	68	34	26	20	12	6
	18,0	68	34	26	20	12	6
	20,0	68	34	26	20	12	6
	22,0	68	34	26	20	12	6
	24,0	68	34	26	20	12	6
	26,0	68	34	26	20	12	6
	28,0	68	34	26	20	12	6
	30,0	68	34	26	20	12	6

A. Übersicht über berechnete Realisierungszahlen

Tabelle A.8.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des dreidimensionalen Tight-Binding-Modells mit Normalverteilung für alle Kombinationen aus Systemgröße N und Unordnungsparameter W .

3D		N					
Normal		504	990	1320	1716	2730	5168
W/V	0,0	68	34	26	20	12	6
	2,0	68	34	26	20	12	6
	4,0	68	34	26	20	12	6
	6,0	1000	680	520	400	240	120
	8,0	680	340	260	200	120	60
	10,0	680	340	260	200	120	60
	12,0	68	34	26	20	12	6
	14,0	68	34	26	20	12	6
	16,0	68	34	26	20	12	6
	17,0	68	34	26	20	12	6
	18,0	68	34	26	20	12	6
	19,0	68	34	26	20	12	6
	20,0	136	68	52	40	24	12
	20,8	340	170	130	100	60	30
	21,0	340	170	130	100	60	30
	22,0	68	34	26	20	12	6
	24,0	68	34	26	20	12	6
	26,0	68	34	26	20	12	6
	28,0	68	34	26	20	12	6
	30,0	68	34	26	20	12	6

Tabelle A.9.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des dreidimensionalen Tight-Binding-Modells mit Lorentzverteilung für alle Kombinationen aus Systemgröße N und Unordnungsparameter W .

3D		N					
Lorentz		504	990	1320	1716	2730	5168
W/V	0,0	68	34	26	20	12	6
	0,5	1000	680	520	400	240	120
	1,0	1000	680	520	400	240	120
	1,5	136	68	52	40	24	12
	2,0	68	34	26	20	12	6
	2,5	68	34	26	20	12	6
	3,0	136	68	52	40	24	12
	3,5	1000	680	520	400	240	120
	3,7	68	34	26	20	12	6
	3,9	68	34	26	20	12	6
	4,0	68	34	26	20	12	6
	5,0	68	34	26	20	12	6
	6,0	68	34	26	20	12	6
	7,0	68	34	26	20	12	6
	8,0	68	34	26	20	12	6
	10,0	68	34	26	20	12	6
	20,0	68	34	26	20	12	6
	30,0	68	34	26	20	12	6

Tabelle A.10.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des eindimensionalen Tight-Binding-Modells der binären Legierung für alle Kombinationen aus Konzentration c_B und Potentialdifferenz Δ . Für jede Kombination ist jeweils die Gesamtzahl für alle Systemgrößen N angegeben.

1D		c_B						
Legierung		0,00	0,05	0,10	0,20	0,30	0,40	0,50
Δ/V	0	166		166	166	166	166	166
	1		166	166	166	166	166	166
	2	166	166	166	166	166	166	166
	4	166	166	166	166	166	166	166
	6	166	166	166	166	166	166	166
	8	166	166	166	166	166	166	166

A. Übersicht über berechnete Realisierungszahlen

Tabelle A.11.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des eindimensionalen Tight-Binding-Modells der binären Legierung für alle Kombinationen aus Potentialdifferenz Δ und Systemgröße N . Für jede Kombination ist jeweils die Gesamtzahl für alle Konzentrationen c_B angegeben.

1D		N					
Legierung		500	900	1300	1700	2700	5100
Δ/V	0	408	204	156	120	72	36
	1	408	204	156	120	72	36
	2	476	238	182	140	84	42
	4	476	238	182	140	84	42
	6	476	238	182	140	84	42
	8	476	238	182	140	84	42

Tabelle A.12.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des eindimensionalen Tight-Binding-Modells der binären Legierung für alle Kombinationen aus Konzentration c_B und Systemgröße N . Für jede Kombination ist jeweils die Gesamtzahl für alle Potentialdifferenzen Δ angegeben.

1D		N					
Legierung		500	900	1300	1700	2700	5100
c_B	0,00	340	170	130	100	60	30
	0,05	340	170	130	100	60	30
	0,10	408	204	156	120	72	36
	0,20	408	204	156	120	72	36
	0,30	408	204	156	120	72	36
	0,40	408	204	156	120	72	36
	0,50	408	204	156	120	72	36

Tabelle A.13.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des zweidimensionalen Tight-Binding-Modells der binären Legierung für alle Kombinationen aus Konzentration c_B und Potentialdifferenz Δ . Für jede Kombination ist jeweils die Gesamtzahl für alle Systemgrößen N angegeben.

2D		c_B					
Legierung		0,00	0,10	0,20	0,30	0,40	0,50
Δ/V	0	166	166	166	166	166	166
	2	166	166	166	166	166	166
	4	166	166	166	166	166	166
	6	166	166	166	166	166	166
	8	166	166	166	166	166	166

Tabelle A.14.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des zweidimensionalen Tight-Binding-Modells der binären Legierung für alle Kombinationen aus Potentialdifferenz Δ und Systemgröße N . Für jede Kombination ist jeweils die Gesamtzahl für alle Konzentrationen c_B angegeben.

2D		N					
Legierung		506	930	1332	1722	2756	5112
Δ/V	0	408	204	156	120	72	36
	2	408	204	156	120	72	36
	4	408	204	156	120	72	36
	6	408	204	156	120	72	36
	8	408	204	156	120	72	36

Tabelle A.15.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des zweidimensionalen Tight-Binding-Modells der binären Legierung für alle Kombinationen aus Konzentration c_B und Systemgröße N . Für jede Kombination ist jeweils die Gesamtzahl für alle Potentialdifferenzen Δ angegeben.

2D		N					
Legierung		506	930	1332	1722	2756	5112
c_B	0,00	340	170	130	100	60	30
	0,10	340	170	130	100	60	30
	0,20	340	170	130	100	60	30
	0,30	340	170	130	100	60	30
	0,40	340	170	130	100	60	30
	0,50	340	170	130	100	60	30

Tabelle A.16.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des dreidimensionalen Tight-Binding-Modells der binären Legierung für alle Kombinationen aus Konzentration c_B und Potentialdifferenz Δ . Für jede Kombination ist jeweils die Gesamtzahl für alle Systemgrößen N angegeben.

3D		c_B										
Legierung		0,00	0,05	0,10	0,15	0,20	0,25	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50
Δ/V	0,0	166		166		166		166		166		166
	1,0											830
	2,0	166		166		166		166		166		830
	3,0											830
	4,0	166		166		166		166		166		830
	5,0											830
	6,0	166		166		166		166		166		830
	7,0											830
	8,0	166	830	830	830	830	830	830	830	830	830	830

A. Übersicht über berechnete Realisierungszahlen

Tabelle A.17.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des dreidimensionalen Tight-Binding-Modells der binären Legierung für alle Kombinationen aus Potentialdifferenz Δ und Systemgröße N . Für jede Kombination ist jeweils die Gesamtzahl für alle Konzentrationen c_B angegeben.

3D		N					
Legierung		504	990	1320	1716	2730	5168
Δ/V	0	408	204	156	120	72	36
	1	340	170	130	100	60	30
	2	680	340	260	200	120	60
	3	340	170	130	100	60	30
	4	680	340	260	200	120	60
	5	340	170	130	100	60	30
	6	680	340	260	200	120	60
	7	340	170	130	100	60	30
	8	3468	1734	1326	1020	612	306

Tabelle A.18.: Übersicht über die berechneten Realisierungen des dreidimensionalen Tight-Binding-Modells der binären Legierung für alle Kombinationen aus Konzentration c_B und Systemgröße N . Für jede Kombination ist jeweils die Gesamtzahl für alle Potentialdifferenzen Δ angegeben.

3D		N					
Legierung		504	990	1320	1716	2730	5168
c_B	0,00	340	170	130	100	60	30
	0,05	340	170	130	100	60	30
	0,10	612	306	234	180	108	54
	0,15	340	170	130	100	60	30
	0,20	612	306	234	180	108	54
	0,25	340	170	130	100	60	30
	0,30	612	306	234	180	108	54
	0,35	340	170	130	100	60	30
	0,40	612	306	234	180	108	54
	0,45	340	170	130	100	60	30
	0,50	2788	1394	1066	820	492	246

Abbildungsverzeichnis

2.1. Zustandsdichte des 3D-TBM	16
3.1. Ausgedehnter und lokalisierter 2D-Zustand	18
3.2. Veranschaulichung des TBM für Unordnung und Vergleich der kontinuierlichen Wahrscheinlichkeitsverteilungen	19
3.3. Beispiel einer diskreten Wahrscheinlichkeitsdichte einer dreikomponentigen Legierung	21
3.4. Zustandsdichte eines 3D-TBM mit normalverteiltem Gitterpotential bei steigender Unordnung	24
3.5. Zustandsdichte einer binären Legierung in Abhängigkeit von der Potentialdifferenz Δ für zwei Konzentrationen c_A	25
3.6. Band eines 3D-Einband-TBM mit und ohne Unordnung und Lage der ME	26
3.7. Phasendiagramm des MIÜ für Box-, Normal- und Lorentzverteilung aus der Literatur	28
3.8. Phasendiagramme einer binären Legierung	29
4.1. Hamilton-Matrix des 1D-Anderson-Modells	33
4.2. Hamilton-Matrix des 2D-Anderson-Modells	34
4.3. Hamilton-Matrix des 3D-Anderson-Modells	34
4.4. Benötigte Ressourcen zur Besetzung und Diagonalisierung der Tight-Binding-Matrizen im Vergleich	39
4.5. Eigenwertspektren verschiedener Realisierungen des 3D-Anderson-Modells	41
4.6. Eigenwertspektrum des 3D-Anderson-Modells bei steigender Unordnung	42
4.7. Eigenwertspektrum des 3D-Anderson-Modells bei steigender Systemgröße	43
4.8. Zustandsdichte des 3D-Anderson-Modells mit verschiedenen Unordnungsparametern W	44
4.9. Darstellung eines Eigenzustands des 3D-Unordnungsmodells	45
4.10. Ausgedehnte und lokalisierte Eigenfunktion eines 1D-Systems	46
4.11. Bandverlauf der IPN in einem 3D-TBM mit Unordnung	47
4.12. Ausgedehnter und lokalisierter 1D-Zustand	48
4.13. Bandverlauf der fraktalen Dimension τ eines 3D-Anderson-Modells für verschiedene Unordnungsstärken W	51
4.14. Doppelt-logarithmische Auftragung der gemittelten IPN gegen die Systemgröße und lineare Regression zur Ermittlung der Steigung β	54
4.15. Histogramm der IPN-Rohdaten zu fester Energie	55
4.16. Histogramm der IPN-Rohdaten zu fester Energie mit dazugehöriger logarithmischer Normalverteilung	56

4.17. Histogramm der IPN-Rohdaten innerhalb eines sehr breiten Energieintervalls	57
4.18. Intervalleinteilung am Beispiel des 3D-Anderson-Modells mit Unordnungsstärke $W/V = 20$	58
4.19. Zustandsdichten eines 3D-Anderson-Modells unter Verwendung der variablen Intervalleinteilung	59
4.20. Stufendiagramm des Bandverlaufs der fraktalen Dimension τ eines 3D-Anderson-Modells	60
4.21. Fraktale Dimension τ in Abhängigkeit vom Unordnungsparameter W für feste Energie	61
4.22. Intervalleinteilungen für verschiedene Unordnungsparameter W eines 3D-TBM mit Markierung der jeweiligen ME	62
4.23. Phasendiagramm des MIÜ eines 3D-TBM mit normalverteilten Gitterpotentialen	63
4.24. Der Massenexponent $\tau(q)$ in Abhängigkeit vom Moment q	65
4.25. Die generalisierte fraktale Dimension $D(q)$ in Abhängigkeit vom Moment q	66
5.1. Fraktale Dimension in Abhängigkeit von der Unordnung: Vergleich der Dimensionalitäten	71
5.2. Fraktale Dimension in Abhängigkeit von der Unordnung: Vergleich der Verteilungen	73
5.3. Vergleich der angepassten Phasendiagramme der kontinuierlichen Verteilungen mit denen aus der Literatur	74
5.4. Einfluss unterschiedlicher Cutoff-Parameter τ_c auf die Phasendiagramme der Modelle mit kontinuierlich verteilten Gitterpotentialen	76
5.5. Massenexponent $\tau(q)$ und generalisierte fraktale Dimension $D(q)$ eines 3D-TBM für positive Momente $q > 0$ und einige ausgewählte Unordnungsstärken W	77
6.1. Einteilung der Energieachse in Intervalle variabler Breite bei einer binären 3D-Legierung	80
6.2. Bandverlauf der fraktalen Dimension τ einer binären 3D-Legierung	81
6.3. Zustandsdichten einer binären 3D-Legierung	82
6.4. Bandverlauf der fraktalen Dimension von binären 3D-Legierungen für verschiedene Potentialdifferenzen Δ und verschiedene Konzentrationen c_B	83
6.5. Phasendiagramme der binären 3D-Legierung	84
6.6. Verwendete Energieintervalle zur Mittelung der IPN-Rohdaten bei binären 3D-Legierungen	85
6.7. Bandverlauf der fraktalen Dimension τ von binären 1D-Legierungen für verschiedene Potentialdifferenzen Δ und verschiedene Konzentrationen c_B	86
6.8. Bandverlauf der fraktalen Dimension τ von binären 2D-Legierungen für verschiedene Potentialdifferenzen Δ und verschiedene Konzentrationen c_B	86
6.9. Bandverlauf der fraktalen Dimension τ einer binären 3D-Legierung mit und ohne Monotoniebedingung	88

Tabellenverzeichnis

3.1. Bandausdehnung in Einband-TBM ohne Unordnung	23
3.2. Literaturwerte für die kritische Unordnung W_c	27
4.1. Spezifikationen der verwendeten Rechneranlagen	32
4.2. Benötigte Ressourcen zur Besetzung der Tight-Binding-Matrizen	36
4.3. Benötigte Ressourcen zur Diagonalisierung der Tight-Binding-Matrizen	37
4.4. Lokalisierungskriterien, ihre Wertebereiche, und ihre Grenzwerte im thermodynamischen Limes	49
5.1. Systemausmaße der berechneten 2D- und 3D-Systeme	70
5.2. Die durch die Anpassung bestimmten Cutoff-Parameter τ_c	75
A.1. Berechnete Realisierungen des 1D-TBM mit Boxverteilung	93
A.2. Berechnete Realisierungen des 1D-TBM mit Normalverteilung	93
A.3. Berechnete Realisierungen des 1D-TBM mit Lorentzverteilung	94
A.4. Berechnete Realisierungen des 2D-TBM mit Boxverteilung	94
A.5. Berechnete Realisierungen des 2D-TBM mit Normalverteilung	94
A.6. Berechnete Realisierungen des 2D-TBM mit Lorentzverteilung	95
A.7. Berechnete Realisierungen des 3D-TBM mit Boxverteilung	95
A.8. Berechnete Realisierungen des 3D-TBM mit Normalverteilung	96
A.9. Berechnete Realisierungen des 3D-TBM mit Lorentzverteilung	97
A.10. Berechnete Realisierungen des binären 1D-Legierungsmodells (Δ - c_B)	97
A.11. Berechnete Realisierungen des binären 1D-Legierungsmodells (Δ - N)	98
A.12. Berechnete Realisierungen des binären 1D-Legierungsmodells (c_B - N)	98
A.13. Berechnete Realisierungen des binären 2D-Legierungsmodells (Δ - c_B)	98
A.14. Berechnete Realisierungen des binären 2D-Legierungsmodells (Δ - N)	99
A.15. Berechnete Realisierungen des binären 2D-Legierungsmodells (c_B - N)	99
A.16. Berechnete Realisierungen des binären 3D-Legierungsmodells (Δ - c_B)	99
A.17. Berechnete Realisierungen des binären 3D-Legierungsmodells (Δ - N)	100
A.18. Berechnete Realisierungen des binären 3D-Legierungsmodells (c_B - N)	100

Tabellenverzeichnis

Literaturverzeichnis

- [AALR79] ABRAHAMS, E. ; ANDERSON, P. W. ; LICCIARDELLO, D. C. ; RAMAKRISHNAN, T. V.: Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions. In: *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979), März, Nr. 10, S. 673–676. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.42.673>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.42.673
- [ABB⁺99] ANDERSON, E. ; BAI, Z. ; BISCHOF, C. ; BLACKFORD, S. ; DEMMEL, J. ; DONGARRA, J. ; CROZ, J. D. ; GREENBAUM, A. ; HAMMARLING, S. ; MCKENNEY, A. ; SORENSEN, D.: *LAPACK Users' Guide*. 3. Aufl. Philadelphia : Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999. – ISBN 0–89871–447–8
- [ADH⁺99] ASCHER, David ; DUBOIS, P. F. ; HINSEN, Konrad ; HUGUNIN, James ; OLIPHANT, Travis: *Numerical Python*. Livermore, CA : Lawrence Livermore National Laboratory, 1999. – 93 S.
- [AF05] ALVERMANN, A. ; FEHSKE, H.: Local distribution approach to disordered binary alloys. In: *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* 48 (2005), 295–303. <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2005-00408-8>. – ISSN 1434–6028. – 10.1140/epjb/e2005-00408-8
- [And58] ANDERSON, P. W.: Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. In: *Phys. Rev.* 109 (1958), März, Nr. 5, S. 1492–1505. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.109.1492>. – DOI 10.1103/PhysRev.109.1492
- [BKM85] BULKA, B. R. ; KRAMER, B. ; MACKINNON, A.: Mobility edge in the three dimensional Anderson model. In: *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* 60 (1985), 13–17. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01312638>. – ISSN 0722–3277. – 10.1007/BF01312638
- [BSK87] BULKA, B. ; SCHREIBER, M. ; KRAMER, B.: Localization, quantum interference, and the metal-insulator transition. In: *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* 66 (1987), 21–30. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01312758>. – ISSN 0722–3277. – 10.1007/BF01312758
- [BSMM00] BRONSTEIN, Ilja N. ; SEMENDJAJEW, Konstantin A. ; MUSIOL, Gerhard ; MÜHLIG, Heiner: *Taschenbuch der Mathematik*. 5., überarb. u. erw. Aufl. Harri Deutsch, 2000. – 1234 S. – ISBN 3–8171–2005–2
- [Czy08] CZYCHOLL, Gerd: *Theoretische Festkörperphysik*. 3. Aufl. Springer, 2008. – 498 S. – ISBN 978–3–540–74789–5

- [FM93] FYODOROV, Yan V. ; MIRLIN, Alexander D.: Level-to-level fluctuations of the inverse participation ratio in finite quasi 1D disordered systems. In: *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993), Juli, Nr. 3, S. 412–415. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.412>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.71.412
- [JOP⁺07] JONES, Eric ; OLIPHANT, Travis ; PETERSON, Pearu u. a.: *SciPy: Open source scientific tools for Python*. <http://www.scipy.org/>. Version: 2007
- [KM93] KRAMER, B. ; MACKINNON, A.: Localization: theory and experiment. In: *Reports on Progress in Physics* 56 (1993), Nr. 12, 1469. <http://stacks.iop.org/0034-4885/56/i=12/a=001>
- [Lan51] LANCZOS, C.: An Iteration Method for the Solution of the Eigenvalue Problem of Linear Differential and Integral Operators. In: *Journal of research of the National Bureau of Standards* 45 (1951), 255–282. <http://www.cs.duke.edu/courses/fall06/cps258/references/Krylov-space/Lanczos-original.pdf>
- [LT75] LICCIARDELLO, D. C. ; THOULESS, D. J.: Conductivity and mobility edges for two-dimensional disordered systems. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 8 (1975), Nr. 24, 4157. <http://stacks.iop.org/0022-3719/8/i=24/a=009>
- [LvW09] LAGENDIJK, Ad ; VAN TIGGELEN, Bart ; WIERSMA, Diederik S.: Fifty years of Anderson localization. In: *Physics Today* 62 (2009), Nr. 8, 24-29. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3206091>. – DOI 10.1063/1.3206091
- [Mil00] MILDE, Frank: *Disorder-induced metal-insulator transition in anisotropic systems*, Technische Universität Chemnitz, Dissertation, Juli 2000
- [MK81] MACKINNON, A. ; KRAMER, B.: One-Parameter Scaling of Localization Length and Conductance in Disordered Systems. In: *Phys. Rev. Lett.* 47 (1981), November, Nr. 21, S. 1546–1549. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.47.1546>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.47.1546
- [Nol05] NOLTING, Wolfgang: *Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie*. 5. Aufl. Berlin : Springer, 2005
- [Oli07] OLIPHANT, T. E.: Python for Scientific Computing. In: *Computing in Science and Engineering* 9 (2007), Mai, Nr. 3, S. 10–20. <http://dx.doi.org/10.1109/MCSE.2007.58>. – DOI 10.1109/MCSE.2007.58. – ISSN 1521–9615
- [PRS03] PLYUSHCHAY, I. V. ; RÖMER, R. A. ; SCHREIBER, M.: Three-dimensional Anderson model of localization with binary random potential. In: *Phys. Rev. B* 68 (2003), Aug, Nr. 6, S. 064201. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.68.064201>. – DOI 10.1103/PhysRevB.68.064201

- [RS03] RÖMER, R. A. ; SCHREIBER, M.: *Numerical investigations of scaling at the Anderson transition*. <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0212569v1>. Version: 2003
- [RVR09] RODRIGUEZ, Alberto ; VASQUEZ, Louella J. ; RÖMER, Rudolf A.: Multifractal Analysis with the Probability Density Function at the Three-Dimensional Anderson Transition. In: *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009), März, Nr. 10, S. 106406. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.106406>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.102.106406
- [Sch85a] SCHREIBER, M.: Fractal character of eigenstates in weakly disordered three-dimensional systems. In: *Phys. Rev. B* 31 (1985), Mai, Nr. 9, S. 6146–6149. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.31.6146>. – DOI 10.1103/PhysRevB.31.6146
- [Sch85b] SCHREIBER, M.: Numerical evidence for power-law localisation in weakly disordered systems. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 18 (1985), Nr. 12, 2493. <http://stacks.iop.org/0022-3719/18/i=12/a=012>
- [SG91] SCHREIBER, Michael ; GRUSSBACH, Heiko: Multifractal wave functions at the Anderson transition. In: *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991), Juli, Nr. 5, S. 607–610. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.67.607>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.67.607
- [SSB⁺10] SCHUBERT, Gerald ; SCHLEEDE, Jens ; BYCZUK, Krzysztof ; FEHSKE, Holger ; VOLLHARDT, Dieter: Distribution of the local density of states as a criterion for Anderson localization: Numerically exact results for various lattices in two and three dimensions. In: *Phys. Rev. B* 81 (2010), April, 155106. <http://www.cs.duke.edu/courses/fall106/cps258/references/Krylov-space/Lanczos-original.pdf>
- [The10] THE MATHWORKS INC.: *MATLAB*. Natick, Massachusetts, 1984–2010
- [VRR08] VASQUEZ, Louella J. ; RODRIGUEZ, Alberto ; RÖMER, Rudolf A.: Multifractal analysis of the metal-insulator transition in the three-dimensional Anderson model. I. Symmetry relation under typical averaging. In: *Phys. Rev. B* 78 (2008), November, Nr. 19, S. 195106. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.78.195106>. – DOI 10.1103/PhysRevB.78.195106
- [Weg80] WEGNER, F.: Inverse participation ratio in $2+\epsilon$ dimensions. In: *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* 36 (1980), 209–214. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01325284>. – ISSN 0722–3277
- [WZ10] WANG, Limin ; ZHANG, Weiyi: Disorder-type-dependent phase diagram in a CsCl-type complex Anderson lattice model. In: *Phys. Rev. B* 81 (2010), Februar, Nr. 5, S. 054204. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.054204>. – DOI 10.1103/PhysRevB.81.054204

- [YH02] YAMASAKI, Junko ; HATANO, Naomichi: A new algorithm of analyzing the metal-insulator transition of the Anderson model. In: *Computer Physics Communications* 147 (2002), Nr. 1-2, 263-266. [http://dx.doi.org/10.1016/S0010-4655\(02\)00259-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0010-4655(02)00259-X). – DOI 10.1016/S0010-4655(02)00259-X. – ISSN 0010-4655
- [ZSEG85] ZDETISIS, A. D. ; SOUKOULIS, C. M. ; ECONOMOU, E. N. ; GREST, Gary S.: Localization in two- and three-dimensional systems away from the band center. In: *Phys. Rev. B* 32 (1985), Dezember, Nr. 12, S. 7811–7816. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.32.7811>. – DOI 10.1103/PhysRevB.32.7811