Teilprojekt C1

2.1 Teilprojekt C1

Lokalisierung elektronischer Zustände in amorphen Materialien

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Michael Schreiber

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

2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl.-Phys. Philipp Cain
Dr. Frank Milde
M.Sc. Macleans L. Ndawana
PD Dr. Rudolf A. Römer
F.M. Ville Uski (C6)
M.Sc. Cristine Villagonzalo

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Die computergestützte Untersuchung des durch Unordnung induzierten Metall-Isolator-Übergangs (MIÜ) in ungeordneten und amorphen Materialien ist der Gegenstand dieses Teilprojekts. Dabei wird das Auftreten des Übergangs und das kritische Verhalten in seiner Nähe durch höchstpräzise numerische Methoden beschrieben und charakterisiert. Folgende physikalische Fragestellungen wurden untersucht: Gibt es schon bei geringfügiger Veränderung der Modelle Abweichungen vom universellen Verhalten für ungeordnete Systeme? Welche Änderungen der universellen Vorhersagen der Theorie der Zufallsmatrizen ergeben sich, wenn man sich dem MIÜ nähert? Wie wirkt sich Vielteilchenwechselwirkung auf die Lokalisierungseigenschaften in ungeordneten Systemen aus? Wie lassen sich im Anderson-Modell thermische Transportgrößen numerisch berechnen?

Die numerische Beschreibung der Elektronenzustände erfolgt über die Bestimmung der Lokalisierungslängen und des kritischen Exponenten durch die Transfer-Matrix-Methode (TMM) und Finite-Size-Scaling, über Untersuchungen zum multifraktalen und statistischen Verhalten von Wellenfunktionen sowie durch Analyse von Energieniveaustatistiken (ENS), wofür die Eigenwerte und Eigenzustände mit dem Lanczos-Algorithmus in der Cullum-Willoughby-Implementation (CWI) bestimmt werden. Der Einfluss von Wechselwirkung wird mit Hilfe exakter Diagonalisierung, einer speziellen Dezimationsmethode und der Dichtematrix-Renormierungsgruppen-Methode behandelt. Vollständig neue Herangehensweisen — basierend auf der linearen Antwort-Theorie — wurden für die Fragen bzgl. des thermischen Transports entwickelt.

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

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

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

Die im Teilprojekt gestellten Fragen verlangen ganz allgemein ein hohes Maß an Rechenleistung und Speicherkapazität, um die notwendige Genauigkeit und Verlässlichkeit der Forschungsarbeiten zu garantieren. Die im Antragszeitraum 1996-1998 entwickelten parallelen Algorithmen der TMM und der CWI [2] wurden deshalb im aktuellen Berichtszeitraum intensiv für Produktionsläufe genutzt. Ein sehr wichtiger Teil des Projekts ist auch die Anpassung dieser und der neu hinzugekommenen Algorithmen an die jetzt vorhandene Rechnerarchitektur im SFB 393. Sehr einflussreich und hilfreich war dabei der intensive und rege Kontakt mit den Teilprojekten A3 (Jung/Meyer) und A4 (Mehrmann). Mit den Teilprojekten A7 (Schneider), C2 (Vojta), und C6 (Schreiber/Mehlig) bestand aufgrund gemeinsamer methodischer und physikalischer Fragestellungen ebenso wie auf der numerischen Seite eine rege Zusammenarbeit.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

2.3.1 Teilaufgabe „Test und Entwicklung von Algorithmen"

Der Hamiltonoperator (2.1) des Anderson-Modells der Lokalisierung lässt sich durch den Lanczos-Algorithmus in der CWI [3] sehr effektiv diagonalisieren. Zur Parallelisierung bieten sich insbesondere die Matrix-Vektor-Multiplikation bei der Lanczos-Iteration und die Bisektionsroutinen der erzeugten Tridiagonalmatrix an und darauf beruhte die gewählte Grundstrategie für die Weiterentwicklung der parallelisierten CWI. Desweiteren stellte sich die Frage, ob der Lanczos-Algorithmus für das Anderson-Modell die effektivste Methode unter Verwendung massiv paralleler Rechner darstellt, oder ob es andere, besser parallelisierbare Algorithmen — basierend z.B. auf Konvergenzbeschleunigern, iterativen Gleichungssystemlösern [4], Präkonditionierern [5] — gibt. Insbesondere der Test von Mehrgitterverfahren [4] war ein Hauptschwerpunkt dieser Teilaufgabe. Für die TMM sollte die parallele Version weiterentwickelt und der neuen Rechnerarchitektur angepasst werden, um für die benötigten Größen der quasi-eindimensionalen (1D) Streifen und Balken eine entsprechende Genauigkeit erzielen zu können. Dabei sollte der verwendete

Algorithmus für den im SFB verfügbaren Dual-PC-Cluster "Roulette" mit verteiltem Speicher durch MPI parallelisiert werden. Auch musste getestet werden, ob die geteilte Nutzung des Speichers für beide Prozessoren auf einem PC-Knoten evt. zu einer Leistungssteigerung genutzt werden kann.

2.3.2 Teilaufgabe „Lokalisierung bei Anisotropie und topologischer Unordnung"

Im Anderson-Modell (2.1) wird üblicherweise den Transferintegralen t_{ij} ein konstanter Wert zugewiesen [6]. Das Abweichen vom kristallinen, perfekt geordneten System wird demnach nur durch die zufällige Wahl der potentiellen Energien an den Gitterplätzen repräsentiert. Im Rahmen dieser Teilaufgabe wollten wir untersuchen, inwieweit sich die Lokalisierungseigenschaften ändern, wenn wir weitere, physikalisch mindestens genauso relevante Arten von Unordnung oder Störungen der t_{ij} im System berücksichtigen. Aufbauend auf den Resultaten und Erkenntnissen aus den Teilaufgaben C1.1 und C1.2 im ersten Förderungszeitraum [2] betrachten wir den Einfluss von (i) anisotroper, und (ii) zufälliger Wahl der t_{ij} auf periodischen Gittern, sowie (iii) konstantem t_{ij} auf räumlich nicht periodischen Gittern.

Für den Fall einer Anisotropie der t_{ij} [7] behandeln wir schwach gekoppelte Ebenen ($t_x = t_y = 1, t_z < 1$) und schwach gekoppelte Ketten ($t_x = t_y < 1, t_z = 1$). Dies ist von experimenteller Relevanz, da eine Reihe von Messungen zum kritischen Verhalten uniaxiale Druckveränderungen — also anisotrope Änderungen der Überlappintegrale t_{ij} — nutzen [8]. Zur Bestimmung der kritischen Eigenschaften am MIÜ verwenden wir neben dem parallelen TMM-Algorithmus [9] zur Berechnung der Lokalisierungslänge die parallelisierte CWI-Version des Lanczos-Algorithmus [3] zur Eigenwertberechnung. Durch die ENS haben wir damit eine weitere Methode, um die Resultate der TMM zu überprüfen. Für die Skalenanalyse nutzen wir eine nichtlineare Fitprozedur [10], die es ermöglicht, systematische Abweichungen zu berücksichtigen, die infolge der betrachteten endlichen Systemgrößen entstehen.

Das Anderson-Modell mit zufälligem Hüpfen [11] modelliert sehr gut die unterschiedlichen Werte der Überlappintegrale aufgrund variabler Atomabstände in amorphen Substanzen [12]. In Abwandlung von (2.1) werden jetzt die $t_{ij} \in [c - w/2, c + w/2]$ zufällig gewählt. Im 2D Modell ohne Potentialunordnung ist die Lokalisierungslänge im thermodynamischen Limes wesentlich größer als im Fall reiner Potentialunordnung und es wurde ein kritischer Zustand in der Bandmitte gefunden, der bereits bei geringer zusätzlicher Potentialunordnung lokalisierte [2]. Ein MIÜ exisitiert demnach nicht. Wir betrachteten nun die 3D Variante des Modells und benutzten die TMM zur Bestimmung der kritischen Eigenschaften des MIÜ. Desweiteren war mittels eines Focker-Planck-Ansatzes analytisch gezeigt worden [13], dass das funktionelle Verhalten der Divergenz der Zustandsdichte in 2D davon abhängt, ob die betrachtete Systemgröße gerade oder ungerade, d.h. das entsprechende Gitter bipartit bzw. nicht bipartit, ist. Wir untersuchten deshalb auch den Einfluß der Bipartitheit des Gitters auf die Divergenz der Lokalisierungslänge in der Nähe der Bandmitte.

Eine weitere Aufgabenstellung im Berichtszeitraum war die Beschreibung der Lokalisierungseigenschaften auf topologisch ungeordneten Gittern. Mit Hilfe der ENS und der Multifraktalanalyse wurden dabei zahlreiche Fragestellungen in Erweiterung der in [2] vorgelegten Arbeiten behandelt. Insbesondere untersuchten wir, ob das Energiespektrum universelle Eigenschaften hat.

2.3.3 Teilaufgabe „Einfluß von Wechselwirkung auf lokalisierte Zustände"

Konträr zu den Aussagen der Skalentheorie [14] für nicht-wechselwirkende 2D Systeme zeigen neuere Resultate experimentell einen MIÜ selbst bei Magnetfeld $B = 0$ für 2D Elektronensysteme mit hoher Ladungsträgerbeweglichkeit [15]. Eine einfache Abschätzung der relevanten Energieskalen ergibt, dass die charakteristische Coulombenergie wesentlich größer ist als die Fermienergie. Deshalb geht man davon aus, daß der beobachtete MIÜ durch die Coulomb-Wechselwirkung induziert wird [15].

Aufbauend auf Arbeiten von Dorokhov [16] hat Shepelyansky [17] gezeigt, daß eine lokale Wechselwirkung U von zwei mit Lokalisierungslänge λ_1 lokalisierten Teilchen in 1D zu Zuständen mit stark erhöhter Zwei-Teilchen-Lokalisierungslänge $\lambda_2 \sim (U/t)^2 \lambda_1^2$ führt. Die analytischen Argumente Shepelyansky's benutzen Vereinfachungen wie z.B. Vernachlässigungen der Phasenbeziehungen und sind deshalb von vielen Gruppen numerisch untersucht worden [18]. Diese Arbeiten konnten die qualitative Tendenz zur Delokalisierung durch Wechselwirkung bestätigen, ergaben aber untereinander abweichende Resultate bezüglich der experimentell relevanten Stärke der Delokalisierung. Im Rahmen dieser Teilaufgabe wurden deshalb hochpräzise Rechnungen zur Klärung der gefundenen Diskrepanzen durchgeführt.

Der von Shepelyansky vorhergesagte Effekt ist natürlich in Hinblick auf die obengenannten experimentellen Befunde eines MIÜ in 2D sehr suggestiv. Jedoch ist eine numerische Überprüfung in 2D sehr schwierig, da das ungeordnete Zwei-Teilchen-Problem äquivalent zu einem nicht-wechselwirkenden Problem in 4D mit starkkorrelierter Unordnung ist [RLS99b]. Die schon in [2] erwähnten Probleme mit Überschätzungen von λ_2 in endlichen Systemen [19] sind deshalb hier von besonderer Bedeutung und neue numerische Methoden müssen entwickelt werden. Desweiteren ist die naive Extrapolation des Zwei-Teilchen-Problems hin zum experimentall relevanten Fall endlicher Dichte [20] äußert problematisch und muss durch fundierte Untersuchungen unterstützt werden.

Wir haben deshalb mit verschiedenen numerischen Methoden den Einfluß von Hubbard- und langreichweitiger Wechselwirkung für zwei Teilchen und bei endlicher Dichte studiert. Um den Einfluß der Wechselwirkung am MIÜ zu analysieren, haben wir desweiteren ein spezielles Modell benutzt, dass auch in 1D einen MIÜ zeigt.

Das Problem zweier wechselwirkender Teilchen ist für den Fall anziehender Wechselwirkung in der Festkörperphysik natürlich eng mit Exzitonen verbunden. In der ersten Antragsperiode wurde dazu der Einfluss von Unordnung auf die Transporteigenschaften der Exzitonen betrachtet [21]. Hier behandeln wir nun das Problem eines Exzitons auf Nano-Ringen bei endlichem Aharonov-Bohm-Magnetfluss.

Diese Untersuchungen wurden durch neueste experimentelle Arbeiten zu selbstorganisierten InAs/GaAs Nano-Ringen angestoßen [22].

2.3.4 Teilaufgabe „Thermischer Transport in ungeordneten Systemen"

Die Thermokraft S ist ein Beispiel einer Transportgröße, deren Verhalten am Anderson-Übergang und bei endlichen Temperaturen T theoretisch noch nicht gut verstanden ist, obwohl zahlreiche experimentelle Resultate vorliegen. S ist dabei die Proportionalität zwischen Temperaturgradient in einem offenen Stromkreis und dem dadurch induzierten elektrischen Feld, $\vec{E} = S\vec{\nabla}T$. Im Metall gilt $S \propto T$ nach der Sommerfeld'schen Theorie [23]. In theoretischen Arbeiten wird kontrovers diskutiert, wie sich S bei $T \to 0$ in der Nähe des Anderson-MIÜ verhält. Es wurde z.B. vorhergesagt, daß S divergiert [24], während andere Arbeiten zeigten, dass S konstant [26, 27] bleibt. Messungen der Thermokraft, die an dotierten Halbleitern [28] und an amorphen Legierungen [29, 30] durchgeführt wurden, erbrachten Werte, die mindestens eine Größenordnung höher sind als die Vorhersagen der Theorie [26]. Weiterhin haben die Experimente gezeigt, dass die Thermokraft auch positive Werte annehmen kann. Das ist überraschend, da die Thermokraft vom Vorzeichen der Ladung der wärmetransportierenden Teilchen abhängt und demnach in Metallen, mit Elektronen als Ladungsträgern, negativ sein sollte.

Die Temperaturabhängigkeit von S und auch von der Leitfähigkeit σ, der thermischen Leitfähigkeit K, der Lorenzzahl L_0 und der dimensionslosen Gütezahl $ZT = S^2\sigma T/K$ im 3D Anderson-Modell der Lokalisierung kann im Rahmen der linearen Antwort-Theorie nach Chester, Thellung, Kubo und Greenwood [31] beschrieben werden. Die Anwendung der Theorie basiert auf der Annahme eines universellen Gesetzes $\sigma \sim |E - E_c|^\nu$ am MIÜ, sowie der Kenntnis des Temperaturverhaltens des chemischen Potentials $\mu(T)$. Im vorliegenden Falle nicht-wechselwirkender Teilchen ist $\mu(T)$ eindeutig durch die mittlere Teilchenzahl/Zustandsdichte gegeben, kann also für jede Fermienergie E berechnet werden. Damit erhalten wir die Temperaturabhängigkeit von S, K, L_0 und ZT sowohl am als auch in der Nähe des MIÜ.

2.3.5 Teilaufgabe „Statistik von Wahrscheinlichkeitsamplituden in ungeordneten Systemen im Magnetfeld"

Die Fluktuationen der Wellenfunktionen im metallischen Bereich des Anderson-Modells sind approximativ durch die Porter-Thomas-Verteilung gegeben [32]. Diese Verteilung folgt aus der Annahme, dass die Quantenlokalisierung, die mit verstärkter Unordnung W schließlich zum MIÜ führt, vernachlässigbar ist. Weil diese Annahme nur im Limes $W \to 0$ gilt, gibt es für endliche W immer kleine Abweichungen von der Porter-Thomas-Verteilung auch im metallischen Bereich [33]. Zusätzlich gibt es sogenannte anomal lokalisierte Zustände [34, 35], die sich stark von den typischen ausgedehnten Wellenfunktionen unterscheiden und große relative Abweichungen in den Ausläufern der Verteilungsfunktionen verursachen [36, 37]. Wir haben dieses statistische Verhalten numerisch im Anderson-Modell untersucht.

Das Ziel ist, die mikroskopische Elektronbewegung in ungeordneten Metallen besser zu verstehen. Das ist möglich durch Vergleich der numerischen Daten mit den analytischen Vorhersagen, die insbesondere auf dem nichtlinearen Sigma-Modell basieren [38, 39]. Das Sigma-Modell beschreibt den semiklassischen Elektrontransport, wo die Elektronen sich *lokal* diffusiv bewegen, aber der Quantenlokalisierung unterliegen.

Ein sehr interessanter Fall von Transport und Lokalisierung in ungeordneten Systemen ist das Quanten-Hall-Szenario [40]. Hier behandelten wir die Statistik von Transmissionsamplituden am Übergang mit Hilfe eines Renormierungsgruppenansatzes [41] für das Chalker-Coddington-Netzwerkmodell [42]. Die Motivation unserer Untersuchung basiert auf neueren experimentellen Arbeiten [43], in denen ein Abweichen vom erwarteten Skalenverhalten [44] gefunden wurde. Wir betrachten dabei die Möglichkeit, dass dieses Abweichen durch makroskopische Inhomogenitäten innerhalb der Quanten-Hall-Probe hervorgerufen wird.

Literaturverzeichnis

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

[2] Arbeitsbericht zum Teilprojekt C1 des SFB 393, Förderungszeitraum 1996–1998.

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

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

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

[6] B. Kramer, A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).

[7] Q. Li, C. Soukoulis, E. N. Economou, G. Grest, Phys. Rev. B **40**, 2825 (1989); I. Zambetaki, Q. Li, E. N. Economou, C. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. **76**, 3614 (1996); N. Panagiotides, S. Evangelou, Phys. Rev. B **49**, 14122 (1994).

[8] S. Waffenschmidt, C. Pfleiderer, H. v. Löhneysen, Phys. Rev. Lett. **83**, 3005 (1999), ArXiv: cond-mat/9905297.

[9] A. MacKinnon, B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **47**, 1546 (1981).

[10] K. Slevin, T. Othsuki, Phys. Rev. Lett., **82**, 382 (1999).

[11] C. Soukoulis, I. Webman, G. S. Grest, E. N. Economou, Phys. Rev. B **26**, 1838 (1982); T. A. L. Ziman, Phys. Rev. B **26**, 7066 (1982); M. Inui, S. A. Trugman, E. Abrahams, Phys. Rev. B **49**, 3190 (1994).

[12] P. Häussler, Phys. Rep. **222**, 65 (1992).

[13] P. W. Brouwer, C. Mudry, A. Furusaki, Phys. Rev. Lett. **84**, 2913 (2000); Nucl. Phys. B **565**, 653 (2000).

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

[15] S. V. Kravchenko *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 4938 (1996).

[16] O. N. Dorokhov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **98**, 646 (1990), [Sov. Phys. JETP **71**, 360 (1990)].

[17] D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **73**, 2607 (1994); D. L. Shepelyansky, in *Correlated fermions and transport in mesoscopic systems*, edited by T. Martin, G. Montambaux, J. T. T. Vân (Editions Frontieres, Proc. XXXI Moriond Workshop, Gif-sur-Yvette, 1996), S. 201.

[18] P. H. Song, F. v. Oppen, Phys. Rev. B **59**, 46 (1999); D. Weinmann, J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **77**, 1556 (1996); P. H. Song, D. Kim, Phys. Rev. B **56**, 12217 (1997); E. Akkermans, J.-L. Pichard, Eur. Phys. J. B **1**, 223 (1997); D. Brinkmann *et al.*, Eur. Phys. J. B **10**, 145 (1998); O. Halfpap, T. Kawarabayashi, B. Kramer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 483 (1998); X. Waintal, J.-L. Pichard, Eur. Phys. J. B **6**, 117 (1998); X. Waintal, D. Weinmann, J.-L. Pichard, Eur. Phys. J. B **7**, 451 (1999); O. Halfpap, B. Kramer, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 85 (1999); K. Frahm, Eur. Phys. J. B **10**, 371 (1999).

[19] K. Frahm, A. Müller-Groeling, J. L. Pichard, D. Weinmann, Europhys. Lett. **31**, 169 (1995); R. A. Römer, M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **78**, 515 (1997).

[20] P. Schmitteckert, R. Jalabert, D. Weinmann, J.-L. Pichard, Phys. Rev. Lett. **81**, 2308 (1998); T. Giamarchi, B. S. Shastry, Phys. Rev. B **51**, 10915 (1995); C. L. Kane, M. P. A. Fisher, Phys. Rev. Lett. **68**, 1220 (1992); R. Shankar, Int. J. Mod. Phys. B **4**, 2371 (1990).

[21] M. Leadbeater, R. A. Römer, M. Schreiber, in *Excitonic Processes in Condensed Matter*, R. T. Williams, W. M. Yen, Hrsg., S. 349–354, The Electrochemical Society, Pennington, NJ (1998)

[22] R. J. Warburton *et al.*, Nature **405**, 926 (2000).

[23] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Saunders College, New York (1976).

[24] C. Castellani, C. Di Castro, M. Gilli, G. Strinati, Phys. Rev. B **37**, 6663 (1988).

[25] D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **66**, 261 (1994).

[26] J. E. Enderby, A. C. Barnes, Phys. Rev. B **49**, 5062 (1994).

[27] U. Sivan, Y. Imry, Phys. Rev. B **33**, 551 (1986).

[28] M. Lakner, H. v. Löhneysen, Phys. Rev. Lett. **70**, 3475 (1993).

[29] C. Lauinger, F. Baumann, J. Phys. Condens. Matter **7**, 1305 (1995).

[30] G. Sherwood, M. A. Howson, G. J. Morgan, J. Phys. Condens. Matter **3**, 9395 (1991).

[31] G.V. Chester, A. Thellung, Proc. Phys. Soc. **77**, 1005 (1961); R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan, **12**, 570 (1957); D. A. Greenwood, Proc. Phys. Soc., **71**, 585 (1958).

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

[33] Y. V. Fyodorov, A. D. Mirlin, Phys. Rev. B **51**, 13403 (1995).

[34] A. D. Mirlin, J. Math. Phys. **38**, 1888 (1997).

[35] B. Muzykanstkii, D. E. Khmelnitskii, Phys. Rev. B **51**, 5480 (1995).

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

[37] I. E. Smolyarenko, B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **55**, 10451 (1997).

[38] K. B. Efetov, Adv. Phys. **32**, 53 (1983).

[39] A. D. Mirlin, Phys. Rep. **326**, 259 (2000).

[40] T. Chakraborty, P. Pietiläinen, *The Quantum Hall effects* (Springer, Berlin, 1995).

[41] A. G. Galstyan, M. E. Raikh, Phys. Rev. B **56**, 1422 (1997).

[42] J. T. Chalker, P. D. Coddington, J. Phys. C **21**, 2665 (1988).

[43] D. Shahar, M. Hilke, C. C. Li, D. C. Tsui, S. L. Sondhi, M. Razeghi, Solid State Commun. **107**, 19 (1998); N. Q. Balaban, U. Meirav, I. Bar-Jospeh, Phys. Rev. Lett. **81**, 4967 (1998).

[44] B. Huckestein, Rev. Mod. Phys. **67**, 357 (1995).
[45] A. MacKinnon, J. Phys. C **13**, L1031 (1980); Z. Phys. B **53**, 1 (1983).
[46] S. Waffenschmidt, C. Pfleiderer, H. v. Löhneysen, Phys. Rev. Lett. **83**, 3005 (1999).
[47] F. Wegner, Z. Phys. B **25**, 327 (1976).
[48] G. Wiedemann, R. Franz, Ann. Phys. (Leipzig) **89**, 497 (1853); (Pogg. Ann. Bd. **89**, 497 (1853)).
[49] G. Haase, T. Hommel, A. Meyer, M. Pester, *Bibliotheken zur Entwicklung paralleler Algorithmen*, SPC 95-20, Technische Universität Chemnitz-Zwickau, (1995).

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe „Test und Entwicklung paralleler Algorithmen"

Mitarbeiter: Cain, Milde, Ndawana, Römer, Schreiber, Elsner (A4), Jung (A3), Mehrmann (A4)
Stichworte: Lanczos, TMM, Parallelisierung, Mehrgitterverfahren

Wir hatten in enger Zusammenarbeit mit V. Mehrmann (A4) in einer Vergleichsstudie verschiedenste moderne Eigenproblemlöser mit der 1985er CWI des Lanczos-Algorithmus im Hinblick auf ihre Anwendbarkeit für das Anderson-Modell getestet [EMMRS99]. Zielstellung des Vergleichs war es, eine Methode zu finden, die in der Rechenzeit wesentlich schneller sein sollte als die CWI, jedoch nicht mehr oder nur wenig mehr Speicherplatz verbrauchen durfte. Wir fanden aber keine Methode, die diese Bedingungen erfüllt. Wir haben deshalb die CWI mit den uns vorliegenden Bibliotheken paralleler Routinen für den GCC 128 [49] und die mittlerweile im Rahmen des SFB und im Rechenzentrum der TU Chemnitz vorhandene Rechnerarchitektur parallelisiert. Dabei wurde besonderes Augenmerk auf die Skalierbarkeit des resultierenden Programmes gelegt. Die entstandenen Routinen eignen sich gut für die Diagonalisierung großer Anderson-Systeme und so konnten wir z.B. die Wellenfunktionen für die größten je berechneten Systeme mit 1367631 Gitterplätzen (siehe Abb. 2.1) für eine Multifraktalanalyse zur Charakterisierung des MIÜ nutzen [M00]. Die schon im Antragszeitraum 1996–1998 [2] entwickelte parallele Version der TMM wurde der neuen Rechnerarchitektur angepasst und für die Produktionsläufe in Kapitel 2.4.2 verwendet [R99, SMREM99].

Während der Projektlaufzeit haben wir intensive Anstrengungen in Hinblick auf die Entwicklung eines Mehrgitterverfahrens für das Anderson-Modell unternommen. In Zusammenarbeit mit M. Jung und A. Meyer (A3) sowie V. Mehrmann (A4) ergab sich aber, dass keines der üblichen Mehrgitterverfahren zu konsistenten, konvergenten Resultaten führte. Der Einfachheit halber betrachteten wir nicht die Eigenwertproblematik, sondern das Gleichungssystem

$$Ax = b \quad . \tag{2.2}$$

Die Systemmatrix $A \equiv H$ hat die Struktur $A = A_{\mathrm{L}} + D$. Dabei ist A_{L} z.B. in 2D

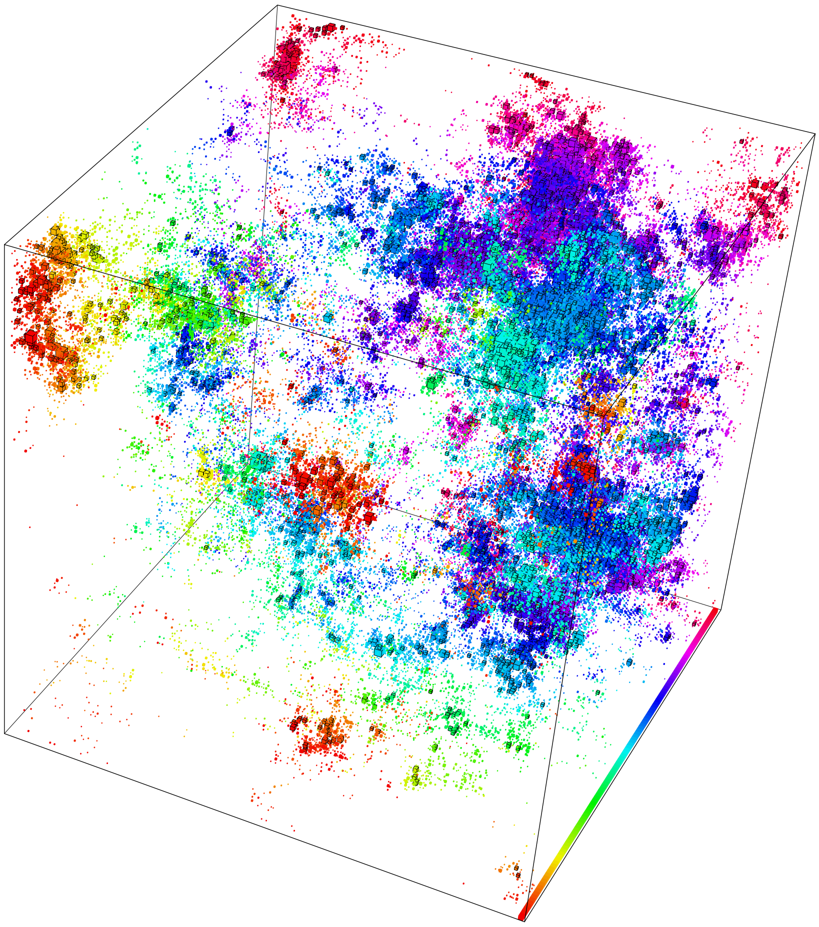


Abbildung 2.1: Räumliche Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi|^2$ eines Teilchens in einem Anderson-Modell mit 111^3 Gitterplätzen bei $E = 0$. Der Wert von $|\Psi(\vec{x})|^2$ am Platz $\vec{x}$ wird durch Würfel verschiedener Größe parametrisiert, wenn $|\Psi(\vec{x})|^2$ über dem Durchschnittswert liegt. Andernfalls bleibt die Stelle leer. Die Grauskala dient der räumlichen Orientierung.

durch den üblichen Fünf-Punkte-Stern

$$\begin{bmatrix} & -1 & \\ -1 & 4 & -1 \\ & -1 & \end{bmatrix}$$

definiert und D ist eine Diagonalmatrix, deren Einträge zufällig verteilte Zahlen aus dem Intervall $[-1, 1]$ sind. Zur Auflösung des Gleichungssystems (2.2) wurde folgende Strategie verfolgt. Anstelle des Gleichungssystems (2.2) wurde das äquivalente Gleichungssystem $A^2x = Ab$ betrachtet. Dieses Gleichungssystem wurde z.B. mittels des vorkonditionierten Verfahrens der konjugierten Gradienten (PCG-Verfahren) mit der a-priori Vorkonditionierungsmatrix A^2 gelöst. In jedem Iterationsschritt des PCG-Verfahrens ist dann ein Gleichungssystem der Gestalt $A^2w = d$

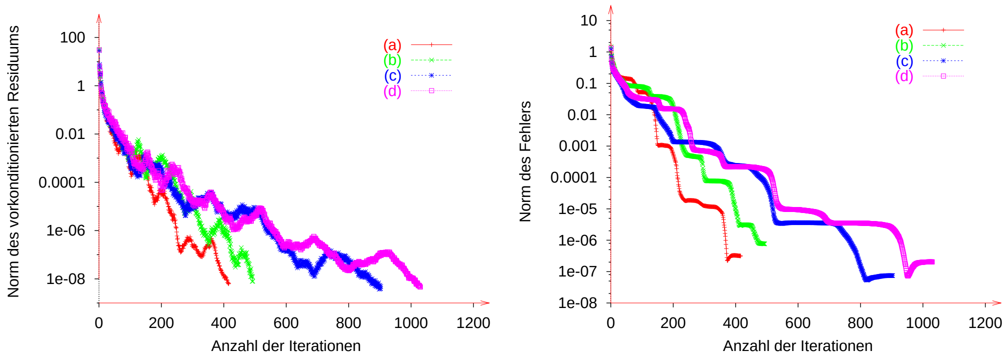


Abbildung 2.2: Euklidische Norm des vorkonditionierten Residuums und des Fehlers $z^{(j)} = x - x^{(j)}$ ($x^{(j)}$ die j-te Iterierte) im Verlaufe des PCG-Verfahrens bei $N = 961$ Unbekannten für (a) $n = 30$ Glättungsschritte und Dämpfungsparameter $\omega_q = 0.4$, (b) $n = 20$, $\omega_q = 0.4$, (c) $n = 10$, $\omega_q = 0.4$, (d) $n = 10$, $\omega_q = 0.5$.

zu behandeln. Dies erfolgte in den beiden Teilschritten $Ay = d$ und $Aw = y$, wobei jedes dieser Gleichungssysteme näherungsweise mittels eines Iterationsschrittes eines Mehrgitter-Verfahrens gelöst wurde. Die Komponenten im Mehrgitter-Verfahren waren:

- V-Zyklus,
- gedämpftes Jacobi-Verfahren als Glätter, wobei dies mit der Matrix A^2 durchgeführt wurde,
- lineare Interpolation I_q^{q+1},
- durch $I_{q+1}^q = (I_q^{q+1})^T$ definierte Restriktion,
- Grobgittermatrizen gemäß des Galerkin-Zugangs $A_q = I_{q+1}^q A_{q+1} I_q^{q+1}$, $q = \ell - 1, \ell - 2, \ldots, 1$, $A_\ell = A$.

In den numerischen Experimenten wurde die Anzahl der Glättungsschritte variiert, und es wurden verschiedene Dämpfungsparameter getestet. Um das Konvergenzverhalten des PCG-Verfahrens gut verfolgen zu können, wurde $b = 0$ gewählt, so dass die exakte Lösung des Gleichungssystems (2.2), der Nullvektor, bekannt ist. Als Startvektor des PCG-Verfahrens diente der Vektor, dessen Komponenten identisch Eins sind. Die Iteration wurde beim Erreichen eines relativen vorkonditionierten Residuums von 10^{-10} abgebrochen. Wie Abb. 2.2 zeigt, ist die Konvergenzgeschwindigkeit des PCG-Verfahrens völlig unbefriedigend. Bei der Lösung von Gleichungssystemen mit einer größeren Anzahl von Unbekannten wurde eine wesentlich langsamere Konvergenz bzw. sogar Divergenz beobachtet. Ein wesentliches offenes Problem bei der Anwendung der Mehrgitter-Verfahren ist die Definition eines geeigneten Glättungsverfahrens. Außerdem ist noch nicht geklärt, ob ein anderer Weg als der Galerkin-Zugang zur Definition der Grobgittermatrizen genutzt werden sollte. Experimente mit anderen Mittelungstechniken und anderen Mehrgitterverfahren führten zu keiner Konvergenzverbesserung.

Unsere Untersuchungen zeigten, dass das Kernproblem auf die schlechten Glättungseigenschaften der gängigen Verfahren zurückzuführen ist. Da aber geeignete Strategien zur Entwicklung eines Glätters für zufällige Systeme nicht existieren, mussten wir die Entwicklung eines Anderson-Mehrgitterverfahrens leider zurückstellen.

2.4.2 Teilaufgabe „Lokalisierung bei Anisotropie und topologischer Unordnung"

Mitarbeiter: Cain, Milde, Römer, Schreiber, Biswas (Calcutta), Eilmes (Kraków)
Stichworte: Hüpfunordnung, Parallelisierung, TMM, Universalität

Im Anderson-Modell der Lokalisierung mit anisotropen Transferintegralen t_{ij} wurden schwach gekoppelte Ebenen und Ketten untersucht. Der MIÜ wurde durch TMM und ENS identifiziert und charakerisiert [D99mrs, M99mrs, M00, MR98, MRSU00, MRS00, O01mrs, R00mrs]. Durch eine Verbesserung der von uns parallelisierten Algorithmen für TMM und CWI konnten wir größere Systeme mit erhöhter Genauigkeit berechnen. Abb. 2.3 zeigt ein Beispiel für die Bestimmung der Lokalisierungslänge und die anschliessende Skalenanalyse. Aufgrund der hohen Rechengenauigkeit war es möglich, eine systemgrößenabhängige systematische Verschiebung des Schnittpunktes der Kurven zu identifizieren. Wir benutzten bei der Skalenanalyse deshalb eine nichtlineare Fitprozedur, die Korrekturen aufgrund dieser im unendlichen System irrelevanten Störungen berücksichtigt. Diese Methode [10] führte im Berichtszeitraum zu einer Korrektur des universellen Wertes des kritischen Exponenten ν, mit dem die Lokalisierungslänge am MIÜ divergiert, von 1.35 auf 1.57, sowie zu einer verlässlicheren Fehlerangabe. Die numerische Verbesserung unserer Skalenanalyse erwies sich auch bei der Auswertung der ENS als hilfreich. Das Ergebnis für die kritische Unordnung W_c ist konsistent mit Resultaten aus unseren früheren Arbeiten, in denen TMM oder Multifraktalanalyse der Wellenfunktion genutzt wurden. Der Wert von W_c verringert sich algebraisch mit steigender Anisotropie ausgehend vom Wert des isotropen Modells. Der kritische Exponent der Lokalisierungslänge λ wurde mit $\nu = 1.45 \pm 0.2$ ermittelt und stimmt mit dem Wert für den isotropen Fall sowie für andere Modelle aus der orthogonalen Universalitätsklasse überein. Die kritische ENS, die unabhängig von der Systemgröße ist, verändert sich mit steigender Anisotropie von ihrer isotropen Gestalt hin zu einer Poisson-Verteilung.

Zur Berechnung von λ im 3D Anderson-Modell mit zufälligem Hüpfen wurde die TMM eingesetzt [B98crs, BCRS00, C98, CRS99, D99crs, H99crs, M99crs, Mu99crs]. Wir konnten zeigen, dass reine Hüpfunordnung mit Transferintegralen $t_{ij} \in [c - w/2, c + w/2]$ nicht ausreicht, um alle Zustände des Systems zu lokalisieren. Wir betrachteten deshalb den MIÜ als Funktion der Energie E sowie der Stärke der Potentialunordnung W. Zur Skalenanalyse unserer Daten verwendeten wir wieder die nichtlineare Fitprozedur, die es ermöglichte, neben den kritischen Werten E_c bzw. W_c auch den kritischen Exponenten sehr genau zu bestimmen. Die erhaltenen Werte für den Exponenten des Übergangs bei Variation der Energie, $\nu_E = 1.61 \pm 0.07$, und den Exponenten des Übergangs bei konstantem E, $\nu_W = 1.54 \pm 0.03$, stimmen innerhalb ihrer Fehler mit Ergebnissen für das

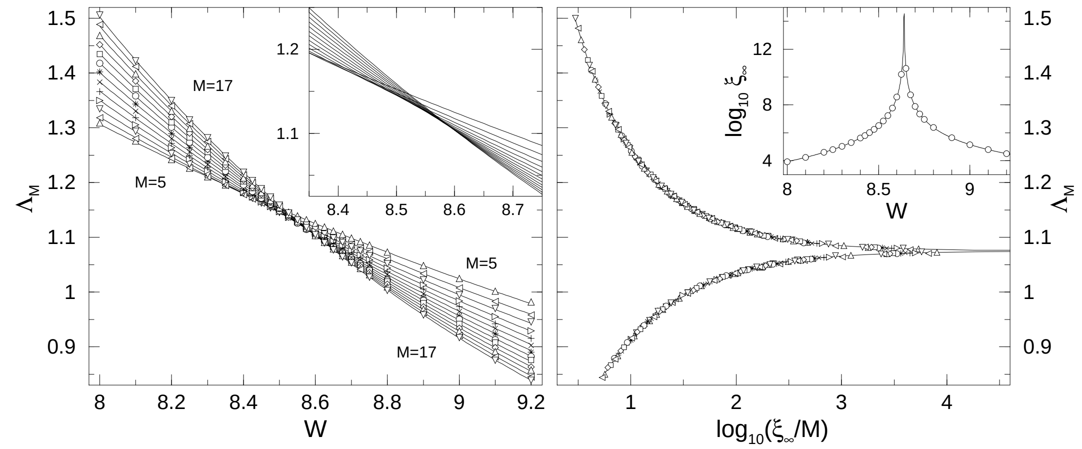


Abbildung 2.3: Skalenanalyse der reduzierten Lokalisierungslänge $\Lambda_M = \lambda/M$ für schwach gekoppelte Ebenen ($t_z = 0.1$). Links: TMM Ergebnisse für Systemgrößen $M = 5, \ldots, 17$. Linien kennzeichnen nichtlineare Fits an die Daten. In der vergrößerten Ansicht (Inset) ist eine systematische Verschiebung des Schnittpunktes erkennbar. Rechts: Skalenfunktion für die Daten aus dem linken Diagramm. Im Inset wird die entsprechende Divergenz des Skalenparameters gezeigt.

Anderson-Modell mit reiner Potentialunordung überein [BCRS00, C98, CRS99]. Das Anderson-Modell mit Hüpfunordnung gehört demnach auch der orthogonalen Universalitätsklasse an.

Im 2D Anderson-Modell mit zufälligem Hüpfen wurde der Einfluß der Bipartitheit des Gitters auf die Divergenz von λ for $M \to \infty$ in der Bandmitte $E = 0$ analysiert [BCRS00]. Wir konnten zeigen, daß sich die Werte der reduzierten Lokalisierungslänge λ/M für gerade und ungerade Systembreiten M voneinander unterscheiden. Der Wert von λ/M bei $E = 0$ bleibt allerdings in allen Fällen jeweils nahezu konstant und deutet damit auf einen kritischen Zustand. Desweiteren untersuchten wir die funktionale Form der Divergenz und konnten in ersten Resultaten neue kritische Exponenten finden [ERS01].

Außerdem analysierten wir mit Hilfe der ENS die elektronischen Zustände in quasiperiodischen 2D Modellen. Hier konnten wir zeigen, dass, obwohl das Gitter deterministisch, also nicht ungeordnet, ist, die ENS trotzdem identisch zur ENS im metallischen Bereich des Anderson-Modells ist [SGRZ99b, ZGRS98]. Auch Korrelationen im Energiespektrum [SGRZ99a], sowie Statistiken jenseits der Nächste-Nachbar-ENS [GRSZ00] zeigen dieses Verhalten. Ein ähnliches Verhalten wurde von uns auch in zufälligen Netzwerken gefunden [GRS98].

2.4.3 Teilaufgabe „Einfluß von Wechselwirkung auf lokalisierte Zustände"

Mitarbeiter: Römer, Schreiber, Vojta (C2), Eilmes (Kraków), Leadbeater (Durham), Schuster (Augsburg)
Stichworte: Wechselwirkung, Delokalisierung, Parallelisierung

Zusammen mit M. Leadbeater berechneten wir mit Hilfe der Dezimations-Methode [LRS99] die Greenfunktion für das Zwei-Teilchen-Problem in 1D und konnten dann durch Finite-Size-Scaling eine Lokalisierungslänge ξ_2 für den Limes $M \to \infty$ angeben. Unsere Daten zeigen [RLS99a, RLS99b, RSV99], dass

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

mit einem Exponenten $\alpha(U)$, der zwischen $\alpha(0) = 1$ und $\alpha(1) = 1.5$ variiert. Insbesondere ist wie erwartet $\xi_2(0) \approx \lambda_1/2$, was die numerische Stabilität der Dezimationsmethode zeigt [RLS99a]. Diese Rechnungen ergaben also eindeutig eine Delokalisierung, die nicht mehr durch zu kleine Systemgrößen vorgetäuscht wird [19], sondern durch Wechselwirkung verursacht wird. Unsere Resultate sind in guter Übereinstimmung mit Ergebnissen anderer Gruppen und Methoden [18, RSV01]. Als Erweiterung dieser Arbeiten betrachteten wir dann das Zwei-Teilchen-Problem in 2D [RLS99b]. Mit Hilfe der Dezimationsmethode erhielten wir eine so starke Delokalisierung, dass sich nach Finite-Size-Scaling sogar ein MIÜ für die relevanten Zwei-Teilchen-Zustände ergab. Dabei gelang es uns, das Unordnungs-Wechselwirkungs-Phasendiagramm und die zugehörigen kritischen Exponenten des Übergangs zu ermitteln.

Desweiteren wandten wir die TMM und die Dezimationsmethode auch auf das Zwei-Teilchen-Problem im Aubry-André-Modell an, das einen MIÜ in 1D aufweist [EGRS99]. Wir fanden, dass die kritischen Parameter des Übergangs auch für zwei Teilchen nicht gegenüber dem wechselwirkungsfreien Fall verändert werden. Diese Arbeit wurde dann mit Hilfe der Dichtematrixrenormierungsgruppe auf den Fall endlicher Teilchendichten ausgedehnt und wir stellten fest, dass die dann auftretenden Effekte die oben dargestellte Zwei-Teilchen-Delokalisierung stark überlagern, bzw. völlig verdrängen [ERSS01]. Das in Abb. 2.4 gezeigte Phasendiagramm hat z.B. lokalisierte Zustände für Wechselwirkungsstärken $V < -2$.

Als Erweiterung der Fragestellung zu zwei wechselwirkenden Teilchen haben wir in Zusammenarbeit mit Prof. M. E. Raikh (University of Utah) eine ähnliche Problemstellung auf einem 1D Ring anstelle eines 1D Drahtes untersucht [RR00a, RR00b]. Insbesondere studierten wir das Verhalten bei anziehender Wechselwirkung und einem endlichen Magnetfeld. Hier konnten wir zeigen, dass auch das *neutrale* Exziton — also der gebundene Zustand der zwei Teilchen — an den Aharonov-Bohm-Fluss ankoppelt, was zu charakteristischen Oszillationen der Spektrallinien und der Oszillatorstärken führt. Wichtig ist dabei, dass der Ringumfang nicht viel größer ist als der Bohrradius des Exzitons. Ringe in der dazu nötigen Nanometergröße sind in den letzten Jahren erfolgreich fabriziert worden und experimentelle Messungen zum vorhergesagten exzitonischen Aharonov-Bohm-Effekt werden zur Zeit vorgenommen. Zum Einfluss von Unordnung liegen erste Untersuchungen vor und zeigen, dass — wie auch schon für das Problem der Dauerströme in mesoskopischen Ringen — teilweise eine Verstärkung des Effektes durch die Wechselwirkung erreicht werden kann. Zur Zeit arbeiten wir an einer numerischen Modellierung des ungeordneten Systems mit Trionen und Biexzitonen.

Weitere Untersuchungen im Rahmen der Teilaufgabe wurden zu integrablen Störstellen durchgeführt. Hier konnten wir zeigen, dass auch bei einer Kopplung von rein rückwärtsstreuenden Rändern mit vorwärtsstreuenden Störstellen keine Loka-

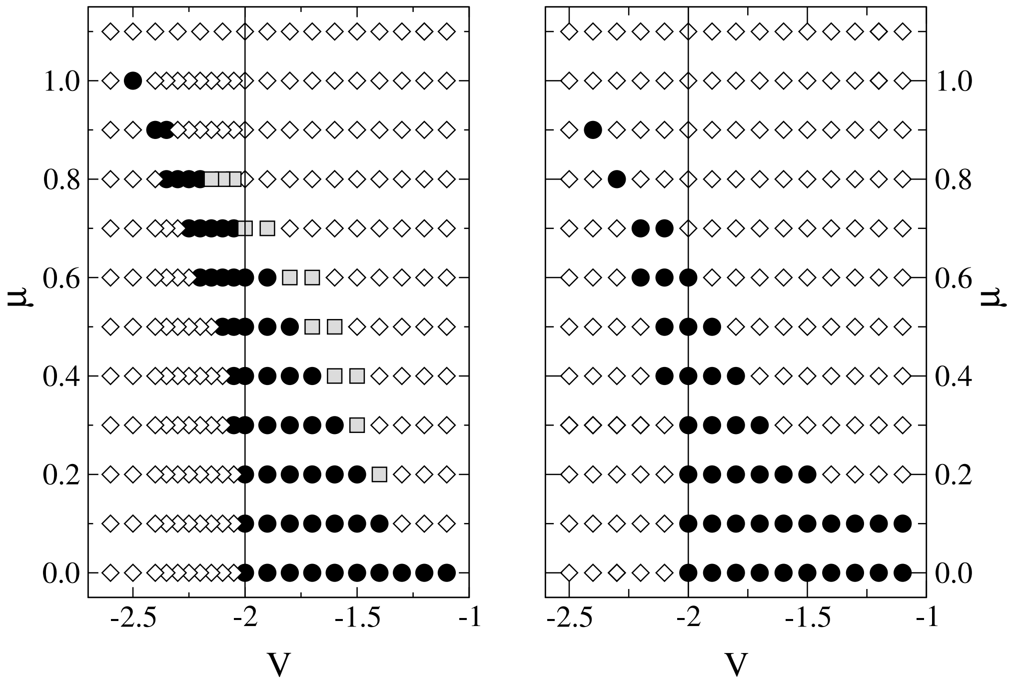


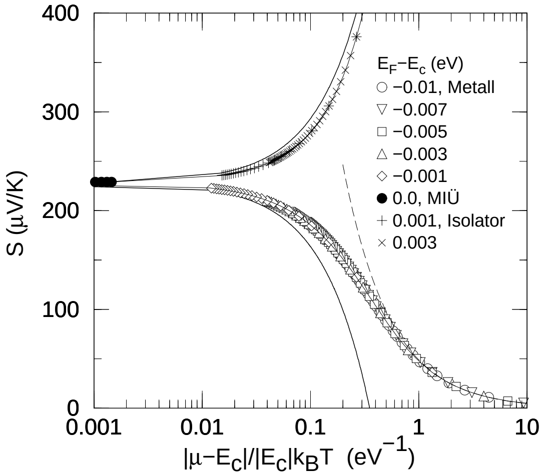
Abbildung 2.4: Phasendiagramm des wechselwirkenden Aubry-André-Modells [ERSS01] als Funktion der Potentialstärke μ und der Wechselwirkung V für Dichten 0.236 (links) und 0.146 (rechts). Eine ausgedehnte Grundzustandswellenfunktion wird durch • markiert, ein lokalisierter Zustand durch ⋄. Graue □ kennzeichnen die Übergangsregion, in der keine klare Systemgrößenabhängigkeit gesehen werden kann. Die durchgezogenen Linien zeigen den Phasenübergang erster Ordnung bei $V = -2$ und $\mu = 0$.

lisierung erreicht werden kann [GGR98, GGRS00]. Die Arbeiten sind z.B. relevant für Tunneleffekte in Quantendrähten. In weiteren Arbeiten zu integrablen Modellen haben wir einige Kriterien zur Definition von Korrelationsstärken entwickelt und getestet [RZ00, RZ01].

2.4.4 Teilaufgabe „Thermischer Transport in ungeordneten Systemen"

Mitarbeiter: Villagonzalo, Römer, Schreiber, MacKinnon (London)
Stichworte: Thermokraft, rekursive Green-Funktionsmethode

Unsere Resultate für das Anderson-Modell mit $\sigma \sim |E - E_c|^\nu$ ergeben (siehe Abb. 2.5), dass die Thermokraft S am MIÜ nicht divergiert [V99, B98vrs, E00vrs, M99vrs, Mu99vrs, VR98, VRS99a, VRS99b]. Im Gegenteil, S ist konstant und nur durch den Wert von ν bestimmt. Desweiteren berechneten wir das Temperaturverhalten und die Skalierungseigenschaften von K, L_0 und ZT, wie in Abb. 2.5 dargestellt. Gerade die Bestimmung von L_0 ist als Test unseres Ansatzes besonders wich-



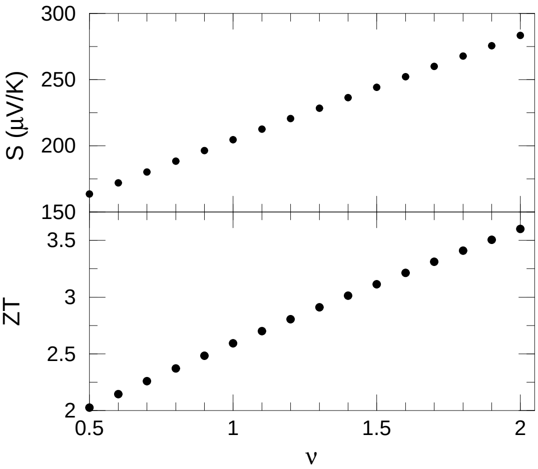


Abbildung 2.5: Links: Die Temperaturabhängigkeit von S skaliert als Funktion von $t = |\mu - E_c|/|E_c|$. Für $\nu = 1.3$ folgt daraus $z = 0.77$ und der Wert der Thermokraft am MIÜ ist $S = 224.8$ μV/K. Die breite durchgezogene Linie zeigt das Ergebnis einer Näherung für hohe Temperaturen, die gestrichelte Linie zeigt die Resultate der Sommerfeld-Näherung für niedrige Temperaturen. Rechts: Die Thermokraft und die dimensionslose Gütezahl am MIÜ als Funktion von ν.

tig, da hier das Verhalten im metallischen Bereich durch den Wiedemann-Franz-Wert $\pi^2/3$ [23, 48] gegeben ist. Unsere Daten zeigen die Existenz des MIÜ auch für S, K, und L_0 [E00vrs, M99vrs, Mu99vrs].

Die Leitfähigkeit $\sigma(t, T)$ sollte am MIÜ mit $t/T^{1/z\nu}$ skalieren. Hierbei ist t der dimensionslose Abstand zum MIÜ, z.B. $1 - E/E_c$, und z der sogenannte dynamische Exponent. Im Falle des Anderson-Modells erwartet man $z = 3$ [25, 47]. In den oben vorgestellten Theorien und auch in unseren Arbeiten [H99vrs, Mu99vrs, VRS99a, VRS99b] ist aber eine Skalierung mit $z = 0.77$ gefunden worden. Desweiteren zeigen unsere Arbeiten [VR98, VRS99a, VRS99b], dass auch die Größenordnung des Wertes von S am MIÜ nicht mit den experimentellen Resultaten [28, 29, 30, 46], z.B. in Si:P, übereinstimmt. Schließlich wird in den Experimenten noch ein Vorzeichenwechsel von S bei tiefen Temperaturen beobachtet, der auch nicht mit den vorliegenden Theorien verstanden werden kann.

Ein mögliche Erklärung dieser Abweichungen besteht in der vereinfachenden Annahme von nicht-wechselwirkenden Elektronen. Jedoch zeigen neueste experimentelle Messungen [25, 47] sehr gute Skalierungseigenschaften, die sich durch die Skalen-Hypothese nicht-wechselwirkender Teilchen mit $z = 2.94 \pm 0.3 \approx 3$ [46] erklären lassen.

Um diese Probleme zu untersuchen, haben wir die Chester-Thellung-Kubo-Greenwood-Formulierung im Rahmen eines phänomenologischen Modells benutzt. Anstelle von $\sigma \sim |E - E_c|^\nu$ verwenden wir dabei als Eingabedaten die experimentell erhaltenen Meßdaten [46] von $\sigma(t, T)$. Daraus haben wir die anderen Transportgrößen S, K, und L_0 berechnet. Schließlich konnten wir so den Einfluß variierender Zustandsdichten und chemischer Potentiale beschreiben. Ein sehr wichtiger Faktor war dabei die Erweiterung des Modells hin zu einer wirklichen Temperaturabhängigkeit von σ wie in den experimentellen Daten beobachtet. Da sich diese

Experimente [46] durch eine hohe Qualität insbesondere bezüglich der Skalierungseigenschaften der Daten auszeichnen, bot sich eine solche Vorgehensweise an.

Mit diesem phänomenologischen Modell erhielten wir am MIÜ Werte für S, die mit den Experimenten vergleichbar sind [O01crvm, VRSM01]. Das von uns berechnete Temperaturverhalten für S, K und L_0 ermöglicht auch eine gute Skalierung mit $z \approx 3.2$ und $\nu = 1$ [O01crvm, S01vrsm]. Für S, K und L_0 haben wir damit die erste Vorhersage von experimentell relevanter Skalierung vorgeschlagen. Desweiteren zeigen unsere Ergebnisse, dass der experimentell beobachtete Vorzeichenwechsel von S nur durch starke Eingriffe in die Theorie verstanden werden kann. Dies läßt darauf schliessen, dass der Vorzeichenwechsel durch physikalische Prozesse jenseits der verwendeten nicht-wechselwirkenden Theorie hervorgerufen wird [VRSM01].

In den vorgestellten Arbeiten zur Berechnung der thermischen Transportgrößen benutzten wir phänomenologische Annahmen z.B. über den funktionalen Verlauf von $\sigma(t, T)$. In einer Zusammenarbeit mit Prof. Angus MacKinnon am Imperial College in London haben wir ausgehend von einer mikroskopischen Beschreibung des Transports [45] eine neue Theorie zur Berechnung von S entwickelt. Die Theorie basiert auf einer rekursiven Green-Funktionsmethode und ist deshalb numerisch sehr effizient. Insbesondere sind keine der gewöhnlichen Größenbeschränkungen aufgrund von Speicherplatzproblemen zu erwarten. Unsere Voruntersuchungen in 1D zeigen, dass der Peltier-Koeffizient $= ST$ eine Lorentz-Verteilung hat. Im Gegensatz dazu ist σ Gauß-verteilt.

2.4.5 Teilaufgabe „Statistik von Wahrscheinlichkeitsamplituden in ungeordneten Systemen im Magnetfeld"

Mitarbeiter: Cain, Milde, Römer, Schreiber, Mehlig (C6), Uski (C6)
Stichworte: Wellenfunktionsstatistik, Quanten-Hall Effekt

In enger Zusammenarbeit mit dem Teilprojekt C6 haben wir die Verteilung von Wellenfunktionsamplituden in 1D, 2D, 3D und quasi-1D Anderson- und Zufallsbandmatrix-Modellen betrachtet [UMR98, UMRS99, UMRS00a, UMRS00b]. Unsere Resultate unterstützten die Vermutung, dass die Diskrepanz zwischen den analytischen Aussagen und den numerischen Ergebnissen für die Wellenfunktionsstatistik durch sogenannte ballistische Effekte verursacht wird. Eine detailierte Darstellung dieser Forschungsergebnisse wird im Teilprojekt C6 gegeben.

Neben der Wellenfunktionsstatistik untersuchten wir auch die Verteilung von Transmissionsamplituden in ungeordneten Systemen im Magnetfeld [E00crs, Ho01crrs, H01crrsb, R00crs, Ri00crrs]. Als Grundlage diente dabei nicht das Anderson-Modell der Lokalisierung sondern das Chalker-Coddington-Modell [42], das eine semiklassische 2D Quantenperkolation im starken Magnetfeld beschreibt [R01]. Mittels eines Ortsraum-Renormierungsgruppenansatzes bestimmten wir mit hoher Genauigkeit die kritische Leitwertverteilung und den kritischen Exponenten ν der Lokalisierungslänge am Quanten-Hall-Übergang. Weiterhin zeigten wir, dass eine langreichweitige Korrelation des Unordnungspotentials, die $\propto r^{-\alpha}$ mit dem Abstand r abfällt, zu einem größeren Wert von ν führt. Die Arbeit an diesem Thema wurde im SFB begonnen und nach erfolgreicher Antragstellung seit April 2000 im Rahmen des Schwerpunktprogrammes „Quanten-Hall-Systeme" der DFG fortgesetzt.

Literaturverzeichnis

Referierte Publikationen

[BCRS00] *Off-diagonal disorder in the Anderson model of localization*, P. Biswas, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, phys. stat. sol. (b) **218**, 205–209 (2000)

[CRS99] *Phase diagram of the three-dimensional Anderson model of localization with random hopping*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, SI-33–36 (1999)

[EGRS99] *Two interacting particles at the metal-insulator transition*, A. Eilmes, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, Eur. Phys. J. B **8**, 547–554 (1999)

[EMMRS99] *The Anderson model of localization: a challenge for modern eigenvalue methods*, U. Elsner, V. Mehrmann, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, SIAM, J. Sci. Comp. **20**, 2089–2102 (1999)

[ERS01] *Exponents of the localization lengths in the bipartite Anderson model with off-diagonal disorder*, A. Eilmes, R. A. Römer, M. Schreiber, im Druck bei Physica B (2001)

[GGR98] *Lax pair formulation for a small-polaron chain with integrable boundaries*, X.-W. Guan, U. Grimm, R. A. Römer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 518–522 (1998)

[GGRS00] *Integrable impurities for an open fermion chain*, X.-W. Guan, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, J. Phys. A: Math. Gen. **33**, 3863–3879 (2000)

[GRS98] *Electronic states in topologically disordered systems*, U. Grimm, R. A. Römer, G. Schliecker, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 389–393 (1998)

[GRSZ00] *Universal level-spacing statistics in quasiperiodic tight-binding models*, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, J.-X. Zhong, Materials Science & Engineering A **294–296**, 564–567 (2000)

[LRS99] *Interaction-dependent enhancement of the localisation length for two interacting particles in a one-dimensional random potential*, M. Leadbeater, R. A. Römer, M. Schreiber, Eur. Phys. J. B **8**, 643–652 (1999)

[MR98] *Energy level statistics at the metal-insulator transition in the Anderson model of localization with anisotropic hopping*, F. Milde, R. A. Römer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 452–456 (1998)

[MRS00] *Energy level statistics at the metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, Phys. Rev. B **61**, 6028–6035 (2000)

[MRSU00] *Critical properties of the metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, V. Uski, Eur. Phys. J. B **15**, 685–690 (2000)

[R01] *Percolation, Renormalization and the Quantum-Hall Transition*, R. A. Römer, in *Computational Statistical Physics*, K. H. Hoffmann, M. Schreiber, Hrsg., im Druck bei Springer, Berlin (2001)

[RLS99a] *Scaling the localisation lengths for two interacting particles in one-dimensional random potentials*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Physica A **266**, 481–485 (1999)

[RLS99b] *Numerical results for two interacting particles in a random environment*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 675–684 (1999)

[RR00a] *Aharonov-Bohm oscillations in the exciton luminescence from a semiconductor nanoring*, R. A. Römer, M. E. Raikh, phys. stat. sol. (b) **221**, 535–539 (2000)

[RR00b] *The Aharonov-Bohm effect for an exciton*, R. A. Römer, M. E. Raikh, Phys. Rev. B **62**, 7045–7049 (2000)

[RSV01] *Disorder and Two-Particle Interaction in Low-Dimensional Quantum Systems*, R. A. Römer, M. Schreiber, T. Vojta, Physica E **9**, 397–404 (2001)

[RSV99] *Two-interacting particles in a random potential: Numerical calculations of the interaction matrix elements*, R. A. Römer, M. Schreiber, T. Vojta, phys. stat. sol. (b) **211**, 681–691 (1999)

[RZ00] *Fluctuation-correlation analysis of the Calogero-Sutherland model*, R. A. Römer, P. Ziesche, Phys. Rev. B **62**, 15279–15282 (2000)

[RZ01] *Hellmann-Feynman Theorem and Correlation-Fluctuation Analysis of the Calogero-Sutherland Model*, R. A. Römer, P. Ziesche, J. Phys. A: Math. Gen. **34**, 1485–1506 (2001)

[SGRZ99a] *Application of random matrix theory to quasiperiodic systems*, M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, J. X. Zhong, Physica A **266**, 477–480 (1999)

[SGRZ99b] *Energy Levels of Quasiperiodic Hamiltonians, Spectral Unfolding, and Random Matrix Theory*, M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, J. X. Zhong, Comp. Phys. Comm. **121–122**, 499–501 (1999)

[SMREM99] *Electronic states in the Anderson model of localization: benchmarking eigenvalue algorithms*, M. Schreiber, F. Milde, R. A. Römer, U. Elsner, V. Mehrmann, Comp. Phys. Comm. **121–122**, 517–523 (1999)

[UMR98] *A numerical study of wave-function and matrix-element statistics in the Anderson model of localization*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 437–441 (1998)

[UMRS00a] *An exact-diagonalization study of rare events in disordered conductors*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber, Phys. Rev. B **62**, R7699–R7702 (2000)

[UMRS00b] *Incipient localization in the Anderson model*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber, Physica B **284–288**, 1934–1935 (2000)

[UMRS99] *Smoothed universal correlations in the two-dimensional Anderson model*, V. Uski, B. Mehlig, R. A. Römer, M. Schreiber, Phys. Rev. B **59**, 4080–4090 (1999)

[VR98] *Low temperature behavior of the thermopower in disordered systems near the Anderson transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 394–399 (1998)

[VRS99a] *Transport properties near the Anderson transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, SI-269–272 (1999)

[VRS99b] *Thermoelectric transport properties in disordered systems near the Anderson transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Eur. Phys. J. B **12**, 179–189 (1999)

[VRSM01] *Behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber A. MacKinnon, Phys. Rev. B **62**, 16446–16452 (2000)

[ZGRS98] *Level Spacings Distributions of Planar Quasiperiodic Tight-Binding Models*, J. X. Zhong, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **80**, 3996–3999 (1998)

Eingereichte Manuskripte

[ERSS01] *Two and more interacting particles at a metal-insulator transition*, A. Eilmes, R. A. Römer, C. Schuster, M. Schreiber, eingereicht bei Phys. Rev. B, (2001)

Diplom-, Doktor- und Habilitationsarbeiten

[C98] *Das Anderson-Modell der Lokalisierung mit nicht diagonaler Unordnung*, P. Cain, Diplomarbeit, TU Chemnitz (12/1998)

[M00] *Disorder-induced metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, Doktorarbeit, TU Chemnitz (07/2000)

[R99] *From Localization to Delocalization in Disordered Systems: Numerical studies of the influence of disorder and many-body interactions on the electronic transport properties of solids*, R. A. Römer, Habilitationsschrift, TU Chemnitz, (08/1999)

[V99] *Thermal transport in the Anderson model of localization*, C. Villagonzalo, Doktorarbeit, TU Chemnitz (vorraussichtlich 05/2000)

Konferenzbeiträge

[B98crs] *The three-dimensional Anderson model of localization with random hopping* , P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, 210. WE-Heraeus Seminar PILS'98, Berlin (10/1998)

[B98memrs] *The Anderson model of localization: A challenge for modern eigenvalue methods*, F. Milde, U. Elsner, V. Mehrmann, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[B98rls] *Using decimation to study the localization properties of two interacting particles in random potentials*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[B98srg] *Level statistics in topologically disordered systems*, G. Schliecker, R. A. Römer, U. Grimm, Poster, *ibid.*

[B98vrs] *Low Temperature Behavior of the Thermoelectric Power in Disordered Systems near the Anderson Transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[Bo98slr] *Formation of Electron Hole Pairs in a One-Dimensional Random Environment*, M. Schreiber, M. Leadbeater, R.A. Römer, Vortrag, 3rd International Conference Excitonic Processes in Condensed Matter (EXCON'98), Boston (11/1998)

[C00crs] *Makroskopische Inhomogenitäten am Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, WE-Heraeus-Ferienkurs für Physik: Vom Billardtisch bis Monte Carlo — Spielfelder der Statistischen Physik, Chemnitz (09/2000)

[C00r] *Perkolation und Renormierung am Quanten-Hall-Übergang*, R. A. Römer, eingeladener Vortrag, *ibid.*

[C00rr] *Aharonov-Bohm oscillations in the exciton luminescence from a semiconductor nanoring*, R. A. Römer, M.E. Raikh, Poster, *ibid.*

[C00s] *Fraktale Elektronen im Anderson-Modell der Lokalisierung*, M. Schreiber, eingeladener Vortrag, *ibid.*

[D00ygrs] *Energy spectra, wavefunctions, and quantum diffusion for quasiperiodic tight-binding models*, H.Q. Yuan, U. Grimm, P. Repetowicz, M. Schreiber, DPG-Frühjahrstagung Fachverband Theoretische und Mathematische Grundlagen der Physik, Dresden (03/2000)

[D98r] *Wave function statistics in the Anderson model of localization close to the metal-insulator transition*, R. A. Römer, Poster, From mesoscopic to microscopic quantum transport: new trends in theory and experiment (TRANSP), MPI-PKS Dresden (11/1998)

[D99crs] *Off-diagonal disorder in the three-dimensional Anderson-model of localization*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *Dynamics of Complex Systems*, MPI-PKS Dresden (05/1999)

[D99mrs] *Anisotropic hopping in the Anderson model of localization*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[D99rs] *Two interacting particles in two dimensional random potentials*, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[D99vrs] *Nondivergent Thermopower at the Anderson Transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[Dr99s] *Localisation of Electronic States in Disordered Materials*, M. Schreiber, eingeladener Vortrag, Int. Seminar *Beyond Quasiperiodicity: Complex Structures and Dynamics*, Dresden (01/1999)

[E00crs] *Renormierungsgruppenstudie zu makroskopischen Inhomogenitäten am Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Vortrag, *1. Symposium Schwerpunktprogramm "Quanten-Hall-Systeme"*, Bad Elster (04/2000)

[E00s] *Anderson Localisation — An Overview*, M. Schreiber, Vortrag, *ibid*

[E00vrs] *Thermoelectric transport properties in disordered systems near the Anderson transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Vortrag, *ibid*

[E98r] *Elektronen in ungeordneten Materialien*, R. A. Römer, eingeladener Vortrag, Symposium *Elektronen in Quasikristallen* des DFG-Schwerpunktes *Quasikristalle*, Bad Elster (11/1998)

[G98mrs] *Energy Level Statistics at the Metal-Insulator Transition in the Anderson Model of Localization with Anisotropic Hopping*, F. Milde, R.A. Römer M. Schreiber, Poster, Conf. Computational Physics, CCP-1998, Granada (09/1998)

[G98s] *Multifractal analysis of electronic states at the metal-insulator transition in disordered materials*, M. Schreiber, eingeladener Vortrag, *ibid.*

[G98semmr] *The Anderson Model of Localization: A Challenge for Modern Eigenvalue Methods*, M. Schreiber, U. Elsner, V. Mehrmann, F. Milde, R. A. Römer, Poster, *ibid.*

[G98sgrz] *Level-Spacing Distributions of Planar Quasiperiodic Tight-Binding Models*, M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, J.X. Zhong, Poster, *ibid.*

[Gr98mrs] *The Anderson Model of Localization with Anisotropic Hopping*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, Vortrag, Conf. Condensed Matter Division EPS, Grenoble (08/1998)

[Gro98s] *Theorie des elektronischen Transports in Mikrostrukturen*, M. Schreiber, Vortrag, Klausurtagung Innovationskolleg *Methoden und Materialsysteme für den Nanometerbereich*, Großbothen (10/1998)

[H01crrsb] *Makroskopische Inhomogenitäten am Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, M. Raikh, R. A. Römer, M. Schreiber, Vortrag, HL 15.1, 65. Frühjahrstagung der DPG, Hamburg (03/2001)

[H01erss] *Two and more interacting particles at a metal-insulator transition*, A. Eilmes, R. A. Römer, C. Schuster, M. Schreiber, Poster, TT, *ibid.*

[H01nrs] *Finite-Size Scaling of the Level Compressibility at the Anderson Transition*, M. Ndawana, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, TT 25.64, *ibid.*

[H01rr] *Trion luminescence from a semiconductor nanoring*, R. A. Römer, M. Raikh, Vortrag, HL 16.4, *ibid.*

[Ho01crrs] *Makroskopische Inhomogenitäten am Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, M. E. Raikh, R. A. Römer, M. Schreiber, Vortrag, Kolloquium des DFG Schwerpunktprogramm "Quanten-Hall-Systeme", Bad Honnef (01/2001)

[H00semr] *New Results on Anderson Localization*, M. Schreiber, A. Eilmes, F. Milde, R. A. Römer, Int. Conf. Wave Propagation and Electronic Structure in Disordered Systems, Heraklion, Griechenland (06/2000)

[H99crs] *The three-dimensional Anderson model with random hopping*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, Localization 1999: International Conference on Disorder and Interaction in Transport Phenomena, Hamburg (08/1999)

[H99r] *Numerical results for two interacting particles in a random environment*, R. A. Römer, eingeladener Vortrag,*ibid.*

[H99vrs] *Transport near the Anderson transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[I01sgr] *Lokalisierung elektronischer Zustände in quasiperiodischen Gittern*, M. Schreiber, U. Grimm, P. Repetowicz, Poster, SPP-Kolloquium Quasikristalle: Struktur und physikalische Eigenschaften, Irsee (03/2001)

[M00rls] *Numerical results for two interacting particles in a 2D random environment*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Poster, 11th International Winterschool on New Developments in Solid State Physics, Mauterndorf (02/2000)

[M00rr] *The Aharonov-Bohm effect for an exciton*, R. A. Römer, M. E. Raikh, Poster, *ibid.*

[M98s] *Interaction-dependent enhancement of the localization length for two interacting particles in a one-dimensional random potential*, M. Schreiber, eingeladener Vortrag, SFB 383, Miniworkshop *Two (or more) interacting particles in a disordered environment*, Marburg (07/1998)

[M99crs] *Das dreidimensionale Anderson-Modell der Lokalisierung mit nichtdiagonaler Unordnung*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, HL 12.73, 63. Frühjahrstagung der DPG, Münster (03/1999)

[M99ggrs] *Integrable impurities for a small-polaron model with general open boundary conditions*, X. Guan, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, TT 21.64, *ibid.*

[M99grss] *Elektronenspektren in topologisch ungeordneten Systemen*, U. Grimm, R. A. Römer, G. Schliecker, M. Schreiber, Poster, DY 20.31, *ibid.*

[M99kgs] *Quantum transport and momentum conserving dephasing*, I. Knittel, F. Gagel, M. Schreiber, Poster, *ibid*

[M99mrs] *Metall-Isolator-Übergang im Anderson-Modell der Lokalisierung mit anisotropen Hüpfelementen*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, HL 12.74, *ibid.*

[M99rls] *Two interacting particles in a two dimensional random environment*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Vortrag, HL 38.2, *ibid.*

[M99vrs] *The Thermoelectric Power of Disordered Systems near the Anderson Transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, TT 21.78, *ibid.*

[Ma00rr] *The Aharonov-Bohm Effect for an Exciton*, R. A. Römer, M. E. Raikh, Poster, Sixth International Workshop on Nonlinear Optics and Excitation Kinetics in Semiconductors, Marburg (04/2000)

[Mo00crrs] *Macroscopic Inhomogenities at the quantum Hall transition*, P. Cain, R. A. Römer, M. E. Raikh, M. Schreiber, Poster, 18th General Conf. Condensed Matter Division EPS, Montreux (03/2000)

[Mo00rls] *Numerical results for two interacting particles in a 2D random environment*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[Mu99crs] *Off-diagonal disorder in the three-dimensional Anderson model of localization with random hopping*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, VIII International Conference on Hopping and Related Phenomena, Murcia, Spanien (09/1999)

[Mu99vrs] *Thermoelectric transport near the Anderson transition*, C.Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, *ibid.*

[O00s] *Aharonov-Bohm oscillations in the exciton luminescence from a semiconductor nanoring*, M. Schreiber, Vortrag, 25th International Conference on the Physics of Semiconductors, Osaka, Japan (09/2000)

[O01crvm] *Critical Behavior of the Thermoelectric Transport Properties in Amorphous Systems near the Metal-Insulator Transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, A. MacKinnon, Proceedingsbeitrag, im Druck bei Springer für die Proceedings der 25th International Conference on the Physics of Semiconductors, Osaka, Japan (2001)

[O01mrs] *Metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, *ibid.*

[O01rr] *Trion in a semiconductor nanoring: Sensitivity to a magnetic flux*, R. A. Römer, M. E. Raikh, *ibid.*

[P98vrs] *Two interacting particles in a random potential: The random matrix model revisited*, T. Vojta, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, Statphys20: 20th International Conference on Statistical Physics, Paris (07/1998)

[P98zgrs] *Level-spacing distributions of planar quasiperiodic tight-binding models*, J.-X. Zhong, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, *ibid*

[R00crs] *Einfluss makroskopischer Inhomogenitäten auf den Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, HL 12.7, 64. Frühjahrstagung der DPG, Regensburg (03/2000)

[R00mrs] *Critical properties of the metal-insulator transition in anisotropic systems*, F. Milde, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, HL 12.74, *ibid.*

[R00rls] *Numerical results for two interacting-particles in a 2D random environment*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Poster, TT 22.60, *ibid.*

[R00rr] *The Aharonov-Bohm effect for an exciton*, R. A. Römer, M. E. Raikh, Vortrag, HL 14.8, *ibid.*

[R00vrs] *The behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, TT 22.61, *ibid.*

[R98rls] *Interaction-dependent enhancement of the localization length for two-interacting particles in a one-dimensional random potential*, R. A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, Poster, Percolation98: International Conference on Percolation and Disordered Systems, Rauischholzhausen (07/1998)

[R98sgrz] *Application of random matrix theory to quasiperiodic systems*, M. Schreiber, U. Grimm, R. A. Römer, J.-X. Zhong, Poster, *ibid.*

[Ri00crrs] *Einfluss makroskopischer Inhomogenitäten auf den Integer-Quanten-Hall-Übergang*, P. Cain, M. Raikh, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, Symposium des Schwerpunktprogramms „Quanten-Hall-Systeme“, Schloß Ringberg (07/2000)

[S01rr] *Trion luminescence from a semiconductor nanoring*, R. A. Römer, M. Raikh, Vortrag, Q33.010, APS March meeting, Seattle, USA (03/2001)

[S01vrsm] *Behavior of the thermopower in amorphous materials at the metal-insulator transition*, C. Villagonzalo, R. A. Römer, M. Schreiber, A. MacKinnon, Vortrag, V30.009, *ibid.*

[S99grsz] *Universal level-spacing statistics in quasiperiodic tight-binding models*, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, J. X. Zhong, Poster, Int. Conf. Quasicrystals ICQ7, Stuttgart (09/1999)

[Sc99s] *Electronic transport*, M. Schreiber, Vortrag, Symposium *Methods and materials for the nanometer regime*, Schöneck (10/1999)

[T00sv] *Solid State Physics on the Computer — Example: Anderson Localization*, M. Schreiber, T. Vojta, eingeladener Vortrag, Summerschool Teaching Computational Physics, Trest, Tschechien (09/2000)

[T98zgrs] *Level-spacing distributions of planar quasiperiodic tight-binding models* , J.-X. Zhong, U. Grimm, R. A. Römer, M. Schreiber, Poster, Classical Chaos and its Quantum Manifestations, Toulouse, (07/1998)

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Das Anderson Modell der Lokalisierung wird seit vielen Jahren intensiv numerisch untersucht. Es kann deshalb als große Überraschung gewertet werden, dass sich in den letzten drei Jahren der Wert des kritischen Exponenten ν am MIÜ von 1.35 auf $1.57 - 1.62$ verschoben hat. Diese Untersuchungen basieren auf höchst präzisen Messungen mit Hilfe der TMM z.B. wie in 2.4.2. Ähnliche Rechnungen mit ENS geben aber bei der derzeitig verfügbaren Messgenauigkeit Werte von $\nu \approx 1.45$. Es ist deshalb eine offenen Frage, ob die ENS wirklich den universellen Bereich des MIÜ erreicht, und weitere systematische Untersuchungen sind erforderlich. Da die ENS eine der meistgenutzten Methoden im Bereich der ungeordneten, aber auch vieler anderer physikalischer Systeme darstellt, sind diese Untersuchungen von großem prinzipiellen Interesse.

Im Rahmen der Untersuchungen zu Effekten im Magnetfeld konnten wir zeigen, dass lang-reichweitige Korrelationen zu charakteristischen Änderungen am MIÜ in Quanten-Hall-Systemen führen sollten. Entsprechende Untersuchungen zum Übergang des 3D Anderson-Modells sind nicht bekannt und verlangen aufgrund ihrer Komplexität zwingend den Einsatz moderner paralleler Rechenmethoden. Insbesondere wollen wir testen, ob das im Falle der klassichen Perkolation bekannte erweiterte Harris-Kriterium angewandt werden kann.

Von großem Interesse ist die von uns im Berichtszeitraum entwickelte mikroskopische Greenfunktionsmethode zur Berechnung von Thermokraft und Peltierkoeffizient. Erste Rechnungen liegen, wie in 2.4.5 vorgestellt, für den 1D Fall vor und sollen auf die physikalisch interessanteren 2D und 3D Fälle ausgedehnt werden. Da hier in Erweiterung der bisherigen Methoden auch neue Parallelisierungsstrategien entwickelt werden müssen, sind neue algorithmische Fragestellungen z.B. bzgl. Matrizeninvertierung zu formulieren und zu bearbeiten.