



TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

Fakultät für Naturwissenschaften
Institut für Physik
Theorie ungeordneter Systeme
Prof. Dr. Michael Schreiber

BACHELORARBEIT

Quantendynamik in Rauzy-Tilings

Fabian Teichert

Chemnitz, den 6. September 2011

Abriss

Quasikristalle bilden eine erst in den 1980er Jahren entdeckte, noch unzureichend verstandene Art von Materialien. Eine mathematische Beschreibung quasikristalliner Strukturen bietet das Projektionsverfahren mit Hilfe dessen das verallgemeinerte Rauzy-Tiling beschrieben wird. Es wird die normierten Zustandsdichte und die Partizipationsrate als stationäre Eigenschaft untersucht. Weiterhin wird die Dynamik von Mikroteilchen, welche sich durch das Gitter bewegen, anhand der zeitlichen Autokorrelationsfunktion und des mittleren Abstandsquadrate dargestellt. Charakteristische Werte für die Leitfähigkeit des Quasikristalls werden berechnet.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	5
2 Quantenmechanische Grundlagen	7
2.1 Nützliche Eigenschaften	8
2.2 Diskretisierung	8
3 Die Struktur der Rauzy-Tilings	11
3.1 Die Fibonacci-Kette als eindimensionaler Fall	11
3.2 Verallgemeinerung auf höhere Dimensionen	14
3.2.1 Das zweidimensionale Rauzy-Tiling	16
3.2.2 Das dreidimensionale Rauzy-Tiling	16
3.3 Die Verbindungsmaatrix	17
3.4 Die Nächste-Nachbar-Umgebungen	19
4 Die stationäre Lösung	21
4.1 Die Zustandsdichte	21
4.2 Die Partizipationsrate	23
4.3 Der Skalenexponent	25
4.4 Die Eigenzustände	26
5 Die Dynamik von Wellenpaketen	29
5.1 Das Zeitverhalten	29
5.2 Die zeitliche Autokorrelationsfunktion	31
5.3 Das mittlere Abstandsquadrat	33
5.4 Der dreidimensionale Fall	35
6 Zusammenfassung und Ausblick	39

1 Einleitung

Kristalle sind in regelmäßigen und periodischen Strukturen aufgebaut. Bei Verschiebung des gesamten Kristalls um das Vielfache eines beliebigen Gittervektors geht das Gitter wieder in sich selbst über. Roger Penrose und Robert Ammann zeigten 1973, dass es ebenfalls möglich ist, eine Ebene lückenlos mit Figuren so zu bedecken, dass das entstehende Muster nicht periodisch, bei gegebenen Anfangsfiguren die Anordnung allerdings für die komplette Ebene vorherbestimmt ist [1]. Solche aperiodischen Parkettierungen zeigen oftmals noch eine Rotationssymmetrie. Eine Translationssymmetrie hingegen fehlt völlig. Deshalb bezeichnet man solche Strukturen auch als *quasiperiodisch*. In Abb. 1.1 sind einige Beispiele hierfür mit verschiedenen kristallographisch verbotenen Rotationssymmetrien (acht-, zehn- und zwölfzählig) dargestellt.

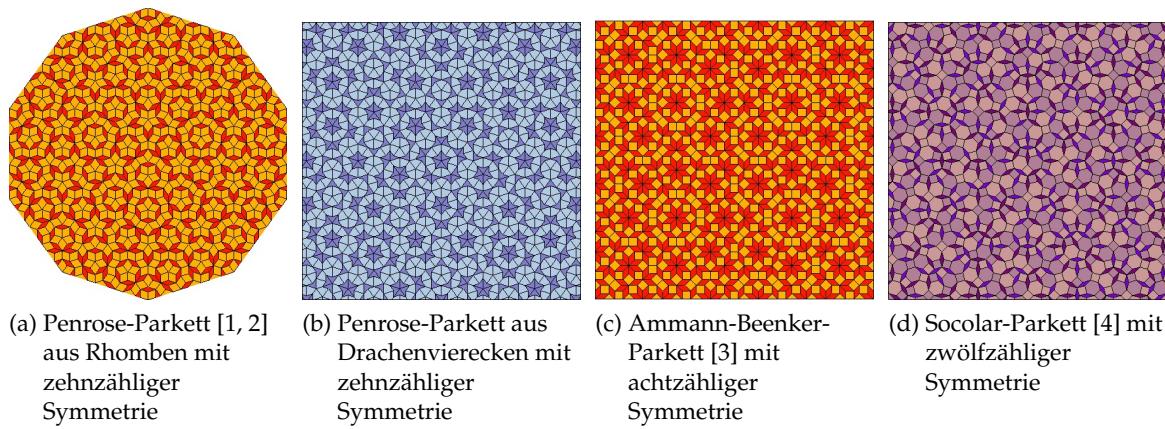


Abb. 1.1: Quasiperiodische Parkettierungen [5]

Dan Shechtman untersuchte 1982 schnell abgekühlte Aluminiummanganat-Kristalle mit 10% bis 14% Mangananteil, die unter bestimmten äußereren Bedingungen bei Beugungsexperimenten auf eine ikosaedrische und somit nicht translationssymmetrische Symmetrie hinwiesen [6]. Das Beugungsbild der fünfzähligen Achse ist in Abb. 1.2 und eine mikroskopische Aufnahme eines ähnlichen Materials in Abb. 1.3 dargestellt. Dies ist mit der herkömmlichen Kristallografie jedoch nicht erklärbar. Man hatte somit den ersten experimentellen Beweis für quasiperiodische Strukturen in vermeindlichen Kristallen geliefert und nannte diese daher *Quasikristalle*. Seitdem hat sich eine Vielzahl von Gruppen weltweit zum Ziel gesetzt, solche Strukturen gezielt herzustellen und sowohl die Bedingungen, unter denen Quasikristalle entstehen, als auch die mechanischen, elektronischen, magnetischen und thermodynamischen Eigenschaften weiter zu untersuchen. Abb. 1.4 zeigt hierzu einen im Durchmesser ca. 50 µm großen mittels doppelter Silizium-

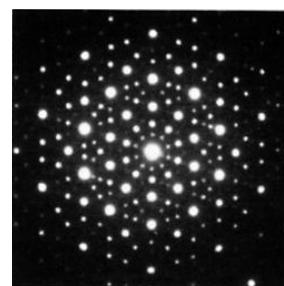


Abb. 1.2: AlMn-Beugungsbild [6]

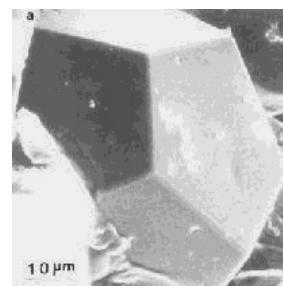


Abb. 1.3: Quasikristalline
AlCu-
Legierung [7]

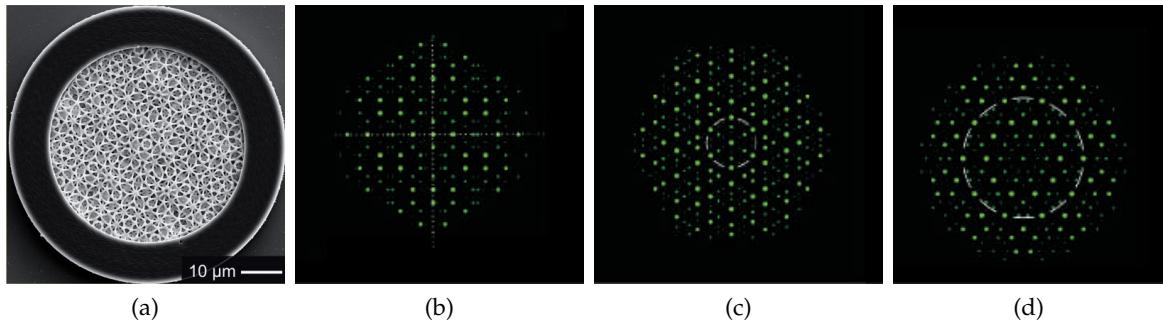


Abb. 1.4: Quasikristalline Probe mit ikosaedrischer Symmetrie (a) und Beugungsbilder entlang der zwei-, drei- und fünfzähligen Achse (b-d) [8]

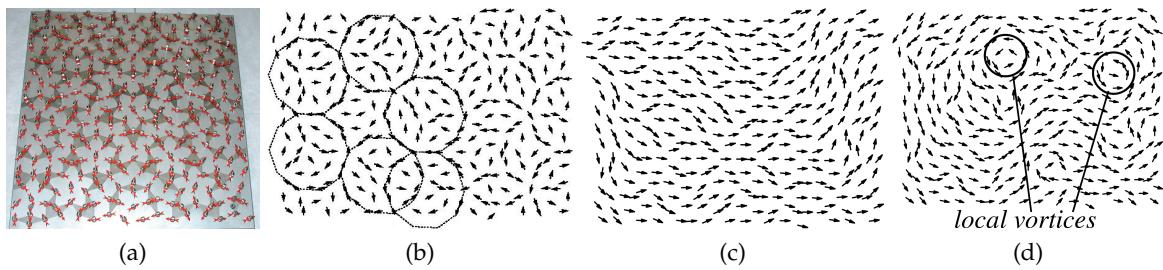


Abb. 1.5: Quasiferromagnetismus [9]: experimentelle Anordnung von Ferromagneten auf einem Penrose-Parkett (a) und Simulation der magnetischen Dipolwechselwirkung ohne Austauschwechselwirkung (b), mit starker Austauschwechselwirkung (c) und mit geringer Austauschwechselwirkung, bei der sich lokale Magnetwirbel ausbilden (d)

inversion hergestellten dreidimensionalen photonischen Quasikristall mit ikosaedrischer Symmetrie, welcher entlang der Symmetriearchsen die dargestellten Beugungsbilder im Bereich des sichtbaren Lichtes liefert [8]. Quasikristalle eröffnen neue Möglichkeiten sowohl für das Studium der Materie und deren Eigenschaften als auch für potentielle technische Anwendungen. Als Beispiel sei hier der Magnetismus erwähnt, über den es kontroverse Diskussionen gibt. So könnten auf Zink und Magnesium basierende Quasikristalle, welche Seltene Erden mit starken magnetischen Momenten beinhalten, aufgrund der häufigen Spin-Frustration ferromagnetisches Verhalten zeigen. In Abb. 1.5 sind ein einfacher experimenteller Aufbau mit Magneten auf dem Penrose-Tiling sowie verschiedene Simulationen der Magnetisierung auf diesem dargestellt [10, 9]. Gelingt es quasiferromagnetische Materialien stabil herzustellen, so könnten diese Anwendung im Bereich der Spintronik, wie zum Beispiel für Spinkanäle und Magnetleseköpfe, finden.

Im Rahmen dieser Arbeit wird eine spezielle quasiperiodische Struktur, das Rauzy-Tiling, vorgestellt. Hierzu folgt im Kapitel 2 eine kurze Zusammenfassung der quantenmechanischen Grundlagen, die für die Beschreibung mikroskopischer Systeme nötig sind. Im Kapitel 3 wird das Rauzy-Tiling mathematisch eingeführt und die Berechnung der Gitterpunktkoordinaten erläutert sowie die zwei- und dreidimensionale Struktur veranschaulicht. Die stationären Eigenschaften, wie zum Beispiel Darstellungen der Eigensysteme und die Berechnung der Zustandsdichte und der Partizipationsrate, sind im 4. Kapitel beschrieben. Im Kapitel 5 werden dynamische Prozesse anhand von sich zeitlich ausbreitenden Wellenpaketen dargestellt und charakteristische Größen aus der zeitlichen Autokorrelationsfunktion und dem mittleren Abstandsquadrat abgeleitet. Den Abschluss der Arbeit bildet eine Zusammenfassung der Ergebnisse in Kapitel 6.

2 Quantenmechanische Grundlagen

Ausgehend von der klassischen Mechanik gelangt man bei der Betrachtung mikroskopischer Teilchen zu tiefen Widersprüchen zwischen Theorie und Experiment. Einen Ausweg bietet die Quantentheorie, welche nicht mehr auf determinierten Teilchenbahnen, sondern auf Wellenverhalten und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten beruht. Hierbei wird jedes mikroskopische Teilchen oder System durch eine *Wellenfunktion* $\Psi(\vec{r}, t)$ beschrieben, wobei diese als Wahrscheinlichkeitsamplitude und $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte für das Antreffen des Teilchens am Ort \vec{r} zum Zeitpunkt t interpretiert wird.

Die Quantentheorie beruht auf folgenden drei fundamentalen Prinzipien:

1. *Superpositionsprinzip*: Ein System, welches sich in den Zuständen $\{\Psi_i\}$ befinden kann, kann sich auch in einer Linearkombination daraus befinden.
2. *Äquivalenzprinzip*: Klassische Variablen wie Ort, Impuls und Energie werden durch ihre entsprechenden Operatoren ersetzt.
3. *Unbestimmtheitsprinzip*: Jede Wirkung, wie das Produkt aus Ort und Impuls oder Energie und Zeit, ist stets mit einer Unschärfe in der Größenordnung von \hbar gegeben. Eine exakte gleichzeitige Messung beider Größen ist nicht möglich. Somit hat eine kleine Unschärfe des einen zwangsläufig eine große Unschärfe des anderen zur Folge.

Im Potential $V(\vec{r})$ genügt die Wellenfunktion eines Teilchens der *Schrödinger-Gleichung*

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}\Psi \quad (2.1)$$

mit dem *Hamilton-Operator*

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \quad . \quad (2.2)$$

Mit dem Ansatz $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot T(t)$ lassen sich die Abhängigkeiten separieren. Es folgt für die Zeitkomponente

$$T(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad (2.3)$$

und für die Ortskomponente die *stationäre Schrödinger-Gleichung*

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi \quad . \quad (2.4)$$

Bei letzterem handelt es sich, der mathematischen Struktur entsprechend, um ein Eigenwertproblem, dessen Lösungen die Energie-Eigenwerte E und die zugehörigen Eigenfunktionen bzw. Eigenzustände ψ liefern.

Für den Fall, dass $\hat{\mathcal{H}}$ endlichdimensional ist, lässt sich die Lösung der Schrödinger-Gleichung mit dem *Zeitentwicklungsoperator* $\hat{\mathcal{U}}(t)$ auch als

$$\Psi(t) = \hat{\mathcal{U}}(t)\psi = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}t}\psi \quad (2.5)$$

schreiben. Die Ψ und ψ sind hier Eigenvektoren.

2.1 Nützliche Eigenschaften

Bei tiefgehender Betrachtung des Hamilton-Operators und der Wellenfunktion zeigen sich einige wichtige Eigenschaften, welche im Kapitel 5 für die Beschreibung eines Wellenpakets benötigt werden.

Der Hamilton-Operator $\hat{\mathcal{H}}$ ist ein linearer Operator im Hilbertraum \mathcal{H} . Daher bilden die Eigenzustände $\{|\psi_n\rangle\}$ eine Basis in \mathcal{H} . Weiterhin bildet $\{|\psi_n\rangle\}$ ein Orthonormalsystem, d.h. es gilt

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn} . \quad (2.6)$$

Aufgrund der Tatsache, dass der Hilbertraum \mathcal{H} vollständig ist, kann jedes beliebige Wellenpaket $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$ nach Eigenfunktionen entwickelt werden, wobei das Betragsquadrat des Entwicklungskoeffizienten c_n die Wahrscheinlichkeit angibt, mit der sich das durch das Wellenpaket beschriebene Teilchen im Eigenzustand $|\psi_n\rangle$ befindet:

$$|\phi\rangle = \sum_{n=1}^{\dim \mathcal{H}} c_n |\psi_n\rangle \quad \text{mit} \quad c_n = \langle \psi_n | \phi \rangle . \quad (2.7)$$

Aus der Umkehrung folgt zwangsläufig, dass sich jede Funktion aus \mathcal{H} nach einem beliebigen Orthonormalsystem entwickeln lässt.

2.2 Diskretisierung

Ist anstatt eines kontinuierlichen Systems ein System aus Gitterpunkten gegeben oder will man kontinuierliche Systeme numerisch berechnen, so ist es vorteilhaft, $\hat{\mathcal{H}}$ zu diskretisieren und die Eigenwertgleichung in Matrixform zu lösen. Dies ist im Folgenden am Beispiel eines eindimensionalen äquidistanten Gitters erläutert.

Gegeben seien die Gitterpositionen $x = i \cdot a$ mit dem Gitterabstand a und $i \in \mathbb{Z}$. Der Anteil des Potentials lässt sich vereinfacht schreiben als $V(\vec{r}) = V_i$. Für die Behandlung des Laplace-Operators geht man vom Differential- zum Differenzenquotienten über und behandelt diesen symmetrisch [11, 12].

Für eine beliebige Funktion $f(x)$ gilt

$$\frac{df}{dx} \rightarrow \frac{\Delta f}{\Delta x} = \frac{1}{a} \left[f\left(x + \frac{a}{2}\right) - f\left(x - \frac{a}{2}\right) \right] , \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f}{dx^2} \rightarrow \frac{\Delta \frac{\Delta f}{\Delta x}}{\Delta x} &= \frac{1}{a} \left[\frac{\Delta f}{\Delta x} \left(x + \frac{a}{2}\right) - \frac{\Delta f}{\Delta x} \left(x - \frac{a}{2}\right) \right] \\ &= \frac{1}{a^2} [f(x-a) - 2f(x) + f(x+a)] . \end{aligned} \quad (2.9)$$

Dabei beträgt die Abweichung vom kontinuierlichen Laplace-Operator [13]

$$\Delta_{\text{kontinuierlich}} - \Delta_{\text{diskret}} = \mathcal{O}(a^2) \quad (\text{Konsistenzordnung 2}) . \quad (2.10)$$

Insbesondere ist die Beschreibung des Kontinuums als Grenzwert $a \rightarrow 0$ enthalten.

Mit $f(x) = \psi|_i$, $t = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ und $\epsilon_i = V_i + 2t$ lässt sich Gl. (2.4) schreiben als

$$\hat{\mathcal{H}}\psi|_i = -t(\psi|_{i-1} + \psi|_{i+1}) + \epsilon_i \psi|_i = E \psi|_i \quad (2.11)$$

bzw. in Bra-Ket-Schreibweise

$$\langle i | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle = -t (\langle i-1 | \psi \rangle + \langle i+1 | \psi \rangle) + \epsilon_i \langle i | \psi \rangle = E \langle i | \psi \rangle \quad (2.12)$$

mit einer beliebigen Basis $\{|i\rangle\}$. Die Entwicklung des Eigenzustandes $|\psi\rangle$ nach dieser Basis

$$\langle i | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle \stackrel{(2.7)}{=} \sum_j \langle i | \hat{\mathcal{H}} | j \rangle \langle j | \psi \rangle = \sum_j H_{ij} \langle j | \psi \rangle \quad (2.13)$$

liefert die Matrixelemente

$$H_{ij} = \begin{cases} \epsilon_i & \forall j = i \\ t & \forall j = i \pm 1 \end{cases} . \quad (2.14)$$

Für beliebige Gitter lässt sich der Hamilton-Operator allgemein wie folgt ausdrücken:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i |i\rangle \epsilon_i \langle i| + \sum_{i \neq j} |i\rangle t_{ij} \langle j| . \quad (2.15)$$

Hierbei ist $\{|i\rangle\}$ die Orthonormalbasis der *Wannier-Zustände* [14, 15]. Diese sind die Orts-Fouriertransformierten der Bloch-Zustände und beschreiben die an den Gitterpunkten i stark lokalisierten Orbitale. Die Übergangsmatrixelemente t_{ij} sind Energien, welche die Übergänge vom Zustand $|i\rangle$ zum Zustand $|j\rangle$ beschreiben. Die ϵ_i enthalten die Potentiale und charakterisieren somit die Wechselwirkung der Mikroteilchen mit dem Gitter.

Die Beschreibung der Rauzy-Tilings geschieht im weiteren Verlauf mit dem *Modell starker Bindung* [14, 15]. Man nimmt an, dass die Übergangsenergien zwischen zwei Gitterpunkten, welche nächste Nachbarn sind, viel größer sind als die aller anderen und letztere somit vernachlässigt werden können. Des Weiteren seien nur Teilchen betrachtet, die nicht mit dem Gitter wechselwirken. Es ergibt sich demnach für dieses Modell

$$\begin{aligned} \epsilon_i &= 0 \quad \forall i , \\ t_{ij} &= \begin{cases} t : & \text{nächste Nachbarn} \\ 0 : & \text{sonst} \end{cases} . \end{aligned} \quad (2.16)$$

3 Die Struktur der Rauzy-Tilings

In diesem Kapitel soll die Herleitung eines Projektionsverfahrens zur Berechnung der Gitterpunktkoordinaten der Rauzy-Tilings, einer speziellen aperiodischen Struktur, erfolgen. Dem liegt die in Abb. 3.1 dargestellte *Fibonacci-Projektion*, die im ersten Punkt erklärt ist und durch die spezielle Beschreibung anschließend auf höhere Dimensionen verallgemeinert werden kann, zugrunde. Die mathematischen Grundlagen wurden hierbei von Vidal und Mosseri übernommen [16].

3.1 Die Fibonacci-Kette als eindimensionaler Fall

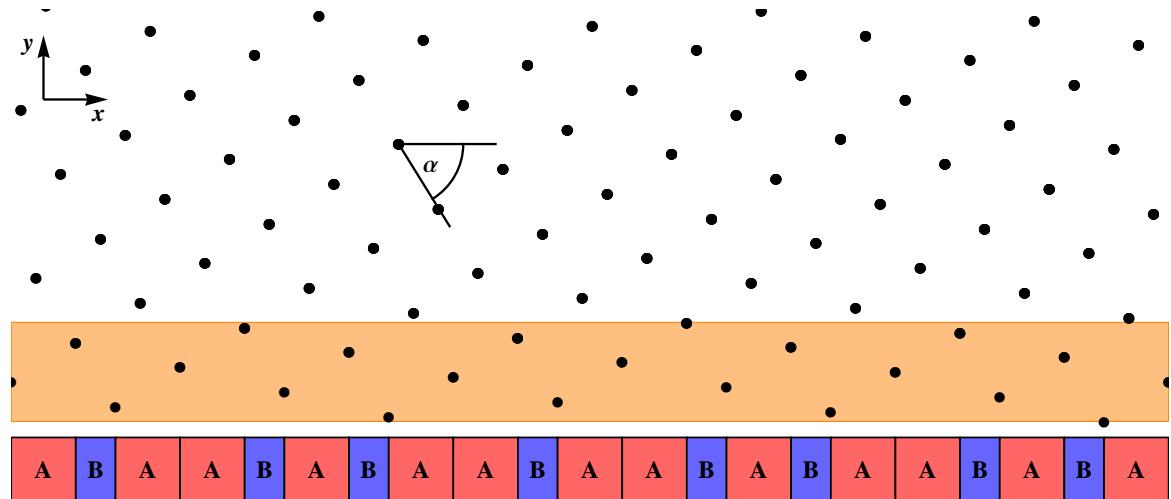


Abb. 3.1: Fibonacci-Projektion ($\tan \alpha = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$)

Bei der in Abb. 3.1 dargestellten Fibonacci-Projektion wird ein zweidimensionales quadratisches Gitter um den Winkel $\alpha = \arctan \tau$ gedreht und anschließend ein zur x -Achse parallel verlaufender Streifen (orangefarbener Ausschnitt¹) auf diese projiziert. Hierbei ist $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ der Grenzwert der Fibonacci-Folge, welche in Gl. (3.2) bei der exakten mathematischen Erläuterung angeführt ist. Im Gegensatz zu einem rationalen Verhältnis τ , bei dem die Projektion wieder periodisch ist, entsteht bei einem irrationalen τ ein quasiperiodisches Gitter. Die so entstandene Projektion ist unterhalb des Gitters dargestellt. Dabei existieren zwei Gitterabstände: Die größeren sind durch rote Rechtecke (A) und die kleineren durch blaue Rechtecke (B) symbolisiert. Diese sog. Fibonacci-Kette erhält man ebenfalls, wenn man (A) und (B) analog der Definition der Fibonacci-Folge aneinanderreihet: Im ersten Schritt sei (A) gegeben, im zweiten (B) und man erhält (AB). In jedem weiteren Schritt hängt man das Resultat des vorangegangenen Schrittes an. Der dritte Schritt liefert demnach (AB) + (A) = (ABA), der vierte (ABA) + (AB) = (ABAAB), der fünfte (ABAAB) + (ABA) = (ABAABABA) etc. In Abb. 3.1 ist der siebente Schritt dargestellt.

¹ Ein Ausschnitt ist notwendig, da man sonst eine dichte Menge an Punkten erhält. Für obigen Streifen wurde $|y| \leq 1$ gewählt.

Zur besseren mathematischen Beschreibung wird nach dem allgemeinen Projektions-Prinzip [17] vorgegangen: Gegeben sei ein kubisches Gitter im D -dimensionalen Raum, welcher durch zwei senkrecht aufeinander stehende Unterräume, dem parallelen oder physikalischen d -dimensionalen Raum \vec{E}^{\parallel} und dem senkrechten $(D - d)$ -dimensionalen Raum \vec{E}^{\perp} , aufgespannt wird. Ein Ausschnitt des Gitters wird dann parallel zum senkrechten Raum \vec{E}^{\perp} auf den physikalischen Raum \vec{E}^{\parallel} projiziert. Des Weiteren sind zwei (in den Einträgen monoton steigende) Folgen von Basen $\{\vec{A}_k^{\parallel i}\}$ und $\{\vec{A}_k^{\perp i}\}$ gegeben (i indiziert die Basisvektoren, k die Folgeglieder), welche die beiden Unterräume \vec{E}^{\parallel} und \vec{E}^{\perp} aufspannen. Dabei seien die Folgen so definiert, dass im Grenzfall $k \rightarrow \infty$ die Einheitszelle unendlich groß wird und die Anstiege der Basisvektoren des senkrechten Raumes gegen irrationale Zahlen streben, sodass bei der Projektion ein nichtperiodisches Gitter entsteht.

Bei der numerischen Berechnung ist man stets auf endliche k beschränkt. Die durch die Basis des physikalischen Raumes aufgespannte Einheitszelle ist somit endlich und der gesamte physikalische Raum wird durch Verschiebung dieser parallel zu \vec{E}^{\parallel} parkettiert. Mit wachsendem k wird die Einheitszelle jedoch immer größer, sodass der Grenzfall immer besser beschrieben wird. Man spricht von der Näherung k -ter Ordnung.

Bei den Rauzy-Tilings handelt es sich um Projektionen von Dimension D auf Dimension $d = (D - 1)$, d.h. der senkrechte Raum ist eindimensional. Abb. 3.2 zeigt dies am Beispiel des eindimensionalen physikalischen Raumes und ist im Folgenden genauer erläutert.

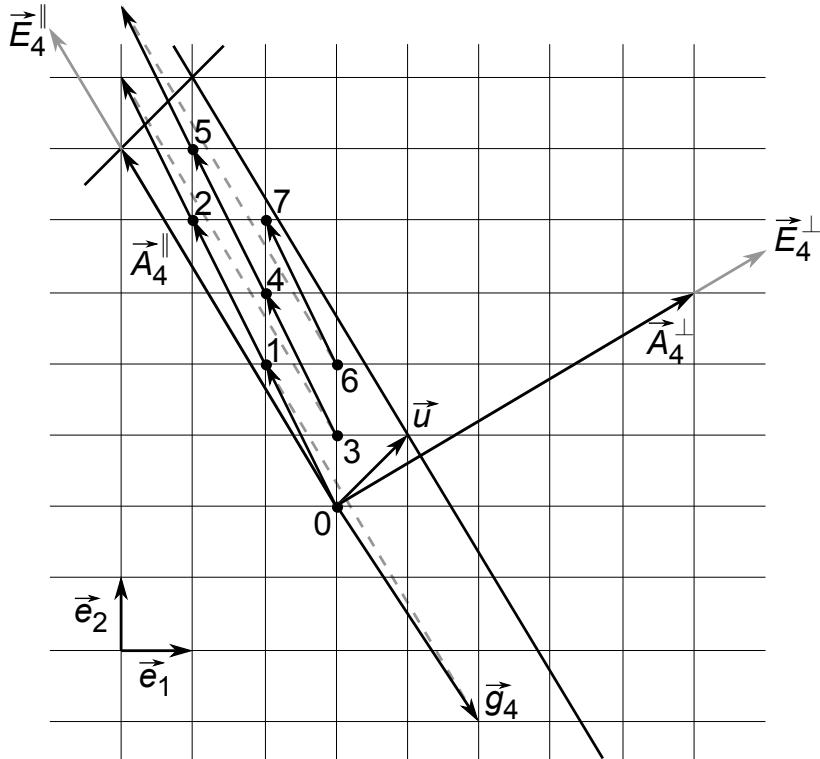


Abb. 3.2: Projektionsschema und Nummerierung bei 4. Ordnung

Mit der kanonischen Basis $\mathcal{B}_2 = \{\vec{e}_1, \vec{e}_2\}$ sei ein quadratisches Gitter gegeben. Der Vektor des senkrechten Raumes ist in der Basis \mathcal{B}_2 definiert als

$$\vec{A}_k^{\perp} = (F_k, F_{k-1}) \quad . \quad (3.1)$$

Die Einträge sind beschrieben durch die *Fibonacci-Folge*

$$F_{k+1} = F_k + F_{k-1} \quad \text{mit} \quad F_0 = F_1 = 1 \quad , \quad (3.2)$$

die auch mittels Transfermatrix M bestimmt ist:

$$\begin{pmatrix} F_{k+1} \\ F_k \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} F_k \\ F_{k-1} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \quad (3.3)$$

Die Eigenwertgleichung von M folgt sofort aus den Beziehungen

$$\begin{pmatrix} F_{k+1} \\ F_k \end{pmatrix} \stackrel{(3.3)}{=} M^2 \begin{pmatrix} F_{k-1} \\ F_{k-2} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

$$\begin{pmatrix} F_{k+1} \\ F_k \end{pmatrix} \stackrel{(3.2)}{=} \begin{pmatrix} F_k \\ F_{k-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F_{k-1} \\ F_{k-2} \end{pmatrix} \stackrel{(3.3)}{=} M \begin{pmatrix} F_{k-1} \\ F_{k-2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F_{k-1} \\ F_{k-2} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

und lautet

$$M^2 = M + \mathbb{1} . \quad (3.6)$$

Im Grenzfall $k \rightarrow \infty$ strebt das Verhältnis $\frac{F_{k+1}}{F_k}$ gegen deren positive Lösung, den goldenen Schnitt $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1,6180$, sodass man die zuvor beschriebene Projektion in Abb. 3.1 erhält.

Mit einem zu \vec{A}_k^\perp senkrechten Vektor \vec{A}_k^{\parallel} des physikalischen Raumes definiert man die Basis des *Spurgitters* $\mathcal{L}_k = \{\vec{A}_k^{\parallel}, \vec{A}_k^\perp\}$. Die Beschreibung der Gitterpunktkoordinaten ist in dieser Basis geeignet, da sich die Projektion damit einfach durch Weglassen der senkrechten Komponente ergibt. Weiterhin ist die Basis des *Bandgitters* definiert als $\mathcal{S}_k = \{\vec{A}_k^{\parallel}, \vec{u}\}$ mit einem Vektor $\vec{u} = (1, 1)$. Die Einheitszelle dieser Basis soll der zu projizierende Ausschnitt sein. Die Basistransformationen seien mit $L_k : \mathcal{B}_2 \rightarrow \mathcal{L}_k$ und $S_k : \mathcal{B}_2 \rightarrow \mathcal{S}_k$ bezeichnet.

Führt man die Matrixdarstellung der Fibonacci-Folge in Gl. (3.3) auf deren erste Glieder F_1, F_0 und F_{-1} zurück, d.h.

$$\begin{pmatrix} F_k \\ F_{k-1} \end{pmatrix} = M^k \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} F_{k+1} \\ F_k \end{pmatrix} = M^k \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} , \quad (3.7)$$

folgt aus der ersten Gleichung die erste Zeile von M^k und aus der zweiten anschließend die zweite Zeile:

$$M^k = \begin{pmatrix} F_k & F_{k+1} - F_k \\ F_{k-1} & F_k - F_{k-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_k & F_{k-1} \\ F_{k-1} & F_{k-2} \end{pmatrix} . \quad (3.8)$$

Hieraus kann \vec{A}_k^\perp mit der ersten Spalte von M^k identifiziert werden. Da \vec{A}_k^\perp und \vec{A}_k^{\parallel} senkrecht aufeinander stehen wählt man \vec{A}_k^{\parallel} als zweite Zeile von M^{-k} :

$$\vec{A}_k^{\parallel} = (F_{-k-1}, F_{-k-2}) . \quad (3.9)$$

Für die Basistransformationen gilt dann

$$L_k = \begin{pmatrix} \vec{A}_k^{\parallel} & \vec{A}_k^\perp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{-k-1} & F_k \\ F_{-k-2} & F_{k-1} \end{pmatrix} , \quad S_k = \begin{pmatrix} \vec{A}_k^{\parallel} & \vec{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{-k-1} & 1 \\ F_{-k-2} & 1 \end{pmatrix} . \quad (3.10)$$

Die Anzahl der Gitterpunkte der \mathcal{S}_k -Einheitszelle berechnet sich als

$$s_k = |\det S_k| . \quad (3.11)$$

Eine einfachere Möglichkeit bietet sich mit

$$s_k = \left| \vec{A}_k^{\parallel} \right| \left| \vec{u} \cdot \frac{\vec{A}_k^{\perp}}{\left| \vec{A}_k^{\perp} \right|} \right| = \vec{u} \cdot \vec{A}_k^{\perp} = F_{k+1} \quad , \quad (3.12)$$

wobei $\left| \vec{A}_k^{\perp} \right| = \left| \vec{A}_k^{\parallel} \right|$ gilt (Beweis B im Anhang).

Zur Berechnung der Gitterpunkte definiert man einen erzeugenden Vektor \vec{g}_k so, dass die Einheitszelle $\{\vec{A}_k^{\parallel}, \vec{g}_k\}$ genau einen Gitterpunkt beinhaltet, d.h. \vec{g}_k zeigt auf denjenigen Gitterpunkt, welcher dem physikalischen Raum \vec{E}^{\parallel} am nächsten liegt, aber nicht in ihm, und \vec{g}_k die kleinste Norm hat. Da $|\det M| = 1$, kann man \vec{g}_k mit der ersten Zeile von M^{-k} identifizieren²:

$$\vec{g}_k = (F_{-k}, F_{-k-1}) \quad . \quad (3.13)$$

Die Gitterpunktkoordinaten der S_k -Einheitszelle in der Basis \mathcal{B}_2 ergeben sich somit als Vielfache von \vec{g}_k , wobei ein Verlassen der Einheitszelle durch den Modulo-Operator korrigiert wird:

$$\vec{r}_k^j = (j \cdot \vec{g}_k) \bmod \vec{A}_k^{\parallel} \quad , \quad j \in [0, s_k - 1] \quad . \quad (3.14)$$

Stellt man dies in der Basis \mathcal{L}_k dar, so vereinfacht sich die Modulo-Operation derart, dass man nur den fraktionellen Anteil zu nehmen braucht³:

$$\vec{r}_k^j = \text{Frac} \left[j \cdot L_k^{-1} \vec{g}_k \right] \quad , \quad j \in [0, s_k - 1] \quad . \quad (3.15)$$

Die durch \vec{g}_k gegebene natürliche Nummerierung ist in Abb. 3.2 für die Näherung vierter Ordnung der Fibonacci-Folge gezeigt.

3.2 Verallgemeinerung auf höhere Dimensionen

Das Verfahren für die Fibonacci-Projektion lässt sich auf den d -dimensionalen physikalischen Raum verallgemeinern, indem man ein in der kanonischen Basis \mathcal{B}_{d+1} gegebenes $(d+1)$ -dimensionales hyperkubisches Gitter parallel zum Vektor \vec{A}_k^{\perp} des senkrechten Raumes projiziert. Der physikalische Raum wird aufgespannt durch die d Vektoren $\vec{A}_k^{\parallel 1} \dots \vec{A}_k^{\parallel d}$.

Zunächst führt man die verallgemeinerten Fibonaccizahlen

$$F_{k+1} = \sum_{l=0}^d F_{k-l} \quad , \quad F_0 = F_1 = 1, \quad F_{-1} = \dots = F_{-d} = 0 \quad (3.16)$$

$$\begin{pmatrix} F_{k+1} \\ \vdots \\ F_{k+1-d} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} F_k \\ \vdots \\ F_{k-d} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad M = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & & 0 & 0 \\ \ddots & & \ddots & \vdots \\ 0 & & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

² Es ist $\det M = -1$. Das zusätzliche Vorzeichen führt lediglich dazu, dass beim Übergang von einer Ordnung zur nächsten sowohl \vec{g}_k als auch \vec{A}_k^{\parallel} seine Richtung ändert. Die projizierte Einheitszelle bleibt dabei unverändert.

³ L_k ist Basistransformation und somit stets invertierbar.

ein und wählt in der kanonischen Basis \mathcal{B}_{d+1}

$$\vec{A}_k^\perp = (F_k, F_{k-1}, \dots, F_{k-d}) \quad . \quad (3.18)$$

Aus der Beziehung

$$\begin{pmatrix} F_{k+1} \\ \vdots \\ F_{k+1-d} \end{pmatrix} = \sum_{l=0}^d \begin{pmatrix} F_{k-l} \\ \vdots \\ F_{k-d-l} \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

folgt mit Gl. (3.17) die Eigenwertgleichung

$$M^{d+1} = \sum_{l=0}^d M^l \quad . \quad (3.20)$$

Der Grenzwert $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{F_{k+1}}{F_k} = \tau_d$ ist die einzige positive Lösung dieser Gleichung. Für $d = 2$ und $d = 3$ lauten diese

$$\tau_2 = \frac{1 + \sqrt[3]{19 - 3\sqrt{33}} + \sqrt[3]{19 + 3\sqrt{33}}}{3} \approx 1,8393 \quad , \quad (3.21)$$

$$\tau_3 \approx 1,9276 \quad . \quad (3.22)$$

Führt man analog zu Gl. (3.8) die Definition in Matrixschreibweise auf die ersten Glieder F_d bis F_{-d} zurück, folgen die $(d+1)$ Beziehungen

$$\begin{pmatrix} F_k \\ \vdots \\ F_{k-d} \end{pmatrix} = M^k \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad , \quad \begin{pmatrix} F_{k+1} \\ \vdots \\ F_{k+1-d} \end{pmatrix} = M^k \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad , \quad \dots \quad , \quad \begin{pmatrix} F_{k+d} \\ \vdots \\ F_k \end{pmatrix} = M^k \begin{pmatrix} 2^{d-1} \\ 2^{d-2} \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

und man erhält den Ausdruck für die Potenzen von M , wobei die erste Zeile aus der ersten Gleichung folgt und jede weitere Gleichung eine weitere Zeile liefert:

$$M^k = \begin{pmatrix} F_k & \sum_{l=0}^{d-1} F_{k-1-l} & \sum_{l=0}^{d-2} F_{k-1-l} & \cdots & F_{k-1} \\ F_{k-1} & \sum_{l=0}^{d-1} F_{k-2-l} & \sum_{l=0}^{d-2} F_{k-2-l} & \cdots & F_{k-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ F_{k-d} & \sum_{l=0}^{d-1} F_{k-(d+1)-l} & \sum_{l=0}^{d-2} F_{k-(d+1)-l} & \cdots & F_{k-(d+1)} \end{pmatrix} \quad . \quad (3.24)$$

Mit den gleichen Begründungen wie im eindimensionalen Fall wählt man nun \vec{A}_k^\perp als erste Spalte von M^k , $\vec{A}_k^{\parallel 1} \dots \vec{A}_k^{\parallel d}$ als zweite bis $(d+1)$ -te Zeile von M^{-k} und \vec{g}_k als erste Zeile von M^{-k} . Die Basis des Spurgitters definiert man als $\mathcal{L}_k = \{\vec{A}_k^{\parallel i}, \vec{A}_k^\perp\}$ und die des Bandgitters als $\mathcal{S}_k = \{\vec{A}_k^{\parallel i}, \vec{u}\}$ mit dem Vektor $\vec{u} = (1, \dots, 1)$.

Die \mathcal{S}_k -Einheitszelle beinhaltet wieder

$$s_k = |\det S_k| = \frac{|\det L_k|}{|\vec{A}_k^\perp|} \left| \vec{u} \cdot \frac{\vec{A}_k^\perp}{|\vec{A}_k^\perp|} \right| = \frac{l_k}{|\vec{A}_k^\perp|^2} \vec{u} \cdot \vec{A}_k^\perp = \vec{u} \cdot \vec{A}_k^\perp = F_{k+1} \quad (3.25)$$

Gitterpunkte, wobei $l_k = |\vec{A}_k^\perp|^2$ gilt.

Die Gitterpunktkoordinaten der \mathcal{S}_k -Einheitszelle ergeben sich wie im eindimensionalen Fall als Vielfache von \vec{g}_k , wobei in der Basis \mathcal{L}_k das Nicht-Verlassen der Einheitszelle durch den fraktionellen Anteil beachtet wird:

$$\vec{r}_k^j = \text{Frac} \left[j \cdot L_k^{-1} \vec{g}_k \right] \quad , \quad j \in [0, s_k - 1] \quad . \quad (3.26)$$

3.2.1 Das zweidimensionale Rauzy-Tiling

In Abb. 3.3 sind drei verschiedene Ordnungen des zweidimensionalen Rauzy-Tilings in der Basis \mathcal{L} dargestellt, wobei die Gitterpunkte nach Gl. (3.26) berechnet wurden. Da diese durch Projektion eines dreidimensionalen kubischen Gitters entstehen, existieren 3 Richtungen, die die Nächste-Nachbar-Verknüpfungen angeben. Die Ebene wird aus zwei dieser Richtungen aufgespannt. Demnach gibt es $\binom{3}{2} = 3$ verschiedene Parallelogramme, welche die Ebene vollständig parkettieren.

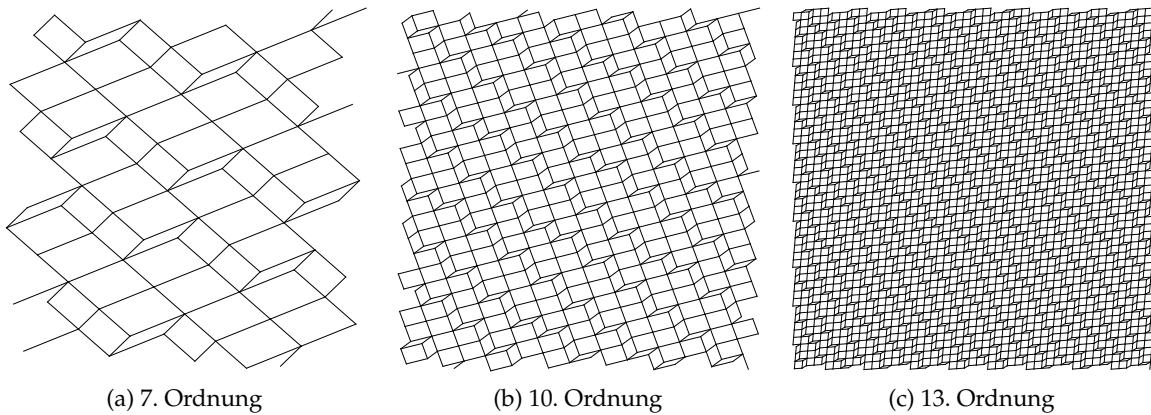


Abb. 3.3: Projektion der \mathcal{S} -Einheitszelle (Ordnung 7, 10 und 13) in zwei Dimensionen

3.2.2 Das dreidimensionale Rauzy-Tiling

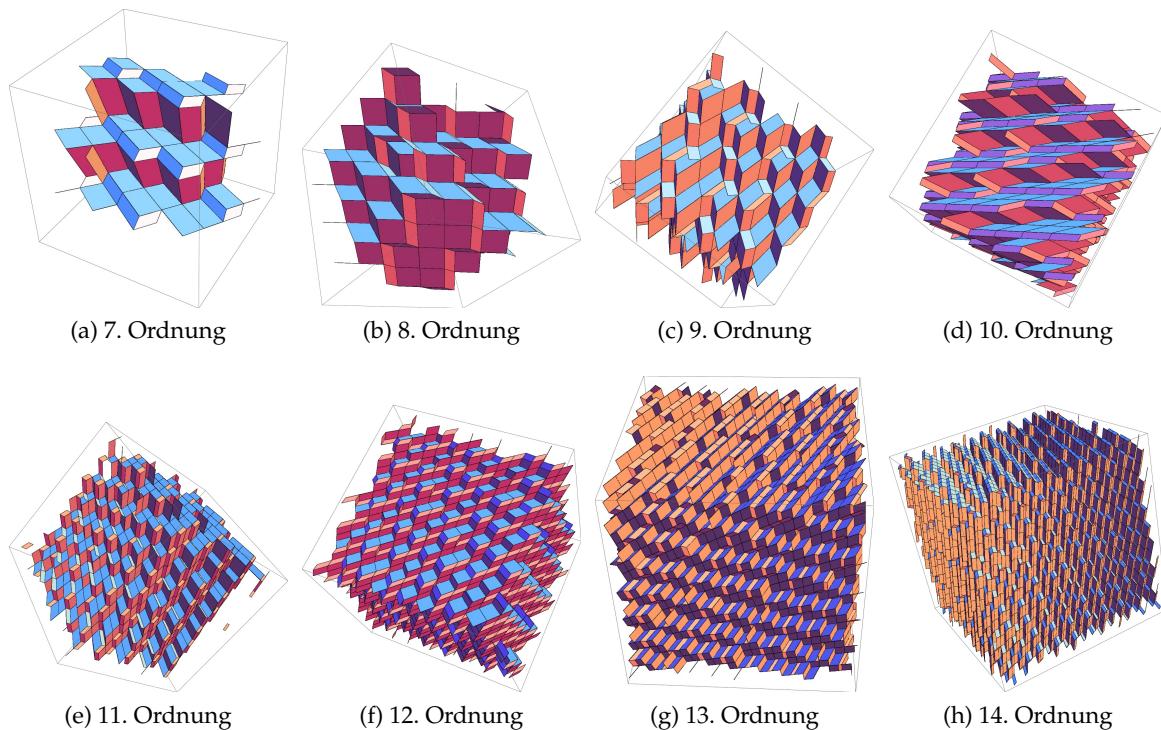


Abb. 3.4: Projektion der \mathcal{S} -Einheitszelle (Ordnung 7 bis 14) in drei Dimensionen

Das dreidimensionale Rauzy-Tiling ist in Abb. 3.4 zur besseren räumlichen Vorstellung für mehrere verschiedene Ordnungen und ein detaillierterer Ausschnitt der 11. Ordnung in Abb. 3.5 dargestellt. Bei letzterem erkennt man, verursacht durch die Projektion eines vierdimensionalen hyperkubischen Gitters, die 4 Richtungen der Nächste-Nachbar-Verknüpfungen. Das Tiling besteht aus $\binom{4}{2} = 6$ verschiedenen Parallelogrammen (in Abb. 3.5 mit a-f bezeichnet), welche die $\binom{4}{3} = 4$ Parallelipipete (gelbe Markierungen), die den dreidimensionalen Raum vollständig füllen, begrenzen.

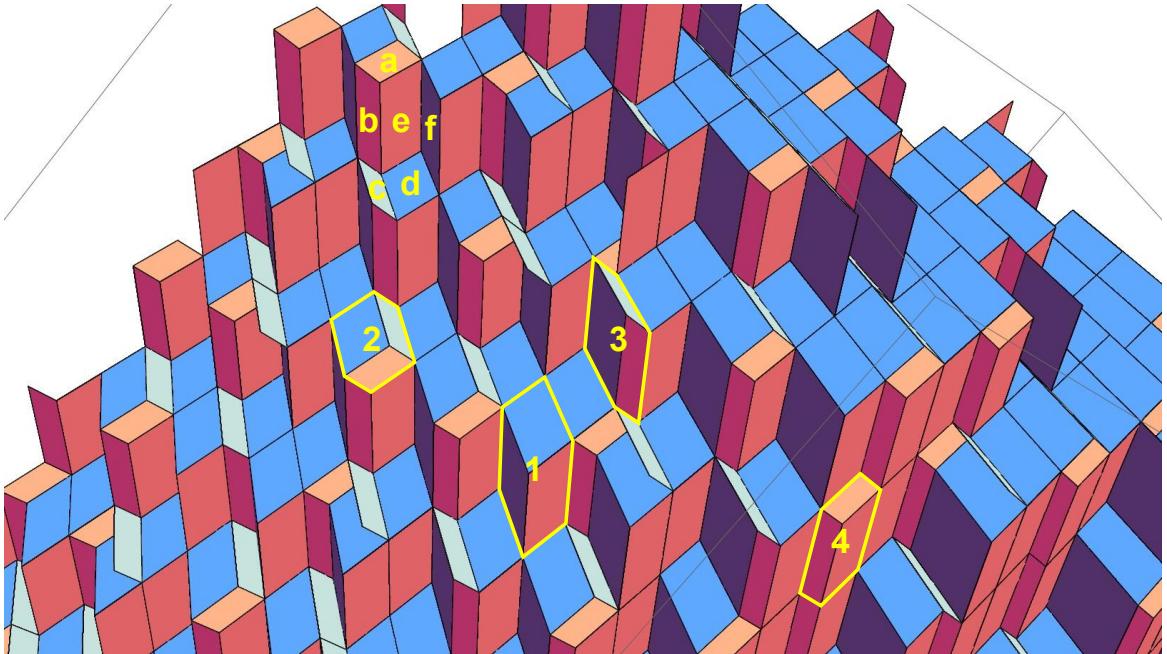


Abb. 3.5: Projektion der S_{11} -Einheitszelle in drei Dimensionen (Ausschnitt) mit den 6 verschiedenen Parallelogrammen (a-f) und den 4 verschiedenen Parallelipipeten (gelbe Markierungen)

3.3 Die Verbindungsma

Zur Beschreibung der Nächste-Nachbar-Verknüpfungen des Rauzy-Tilings k -ter Ordnung führt man die *Verbindungsma*

$$\mathcal{K}_k = \{K_{ij}\}_{i,j=0}^{F_{k+1}-1} \quad , \quad K_{ij} = \begin{cases} 1 & : \text{nächste Nachbarn} \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad (3.27)$$

ein.

Für die genaue Gestalt der Matrix helfen folgende Überlegungen: Die Projektion der kanonischen Einheitsvektoren auf den senkrechten Raum sind in der Basis \mathcal{B}_{d+1} durch die Einträge von \vec{A}_k^\perp gegeben:

$$\begin{pmatrix} \vec{e}_1 \cdot \vec{A}_k^\perp \\ \vdots \\ \vec{e}_{d+1} \cdot \vec{A}_k^\perp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_k \\ \vdots \\ F_{k-d} \end{pmatrix} \quad . \quad (3.28)$$

Die Projektion des erzeugenden Vektors \vec{g}_k auf \vec{A}_k^\perp ist mit $l_k = |\vec{A}_k^\perp|^2$ gegeben durch die Beziehung

$$|\det(\vec{A}_k^{\parallel 1} \dots \vec{A}_k^{\parallel d} \vec{g}_k)| = |\det M^{-k}| = 1 \quad (3.29)$$

$$= \frac{|\det L_k|}{|\vec{A}_k^\perp|} \left| \vec{g}_k \cdot \frac{\vec{A}_k^\perp}{|\vec{A}_k^\perp|} \right| = \frac{l_k}{|\vec{A}_k^\perp|^2} \vec{g}_k \cdot \vec{A}_k^\perp = \vec{g}_k \cdot \vec{A}_k^\perp \quad . \quad (3.30)$$

Somit zeigen $F_k \vec{g}_k \dots F_{k-d} \vec{g}_k$ auf die durch die kanonischen Basisvektoren gegebenen nächsten Nachbarn, d.h. zwei Gitterpunkte sind benachbart, wenn die Differenz ihrer Nummerierung gleich einem der Einträge von \vec{A}_k^\perp ist. Dies ist für $d = 2$ in Abb. 3.6 dargestellt.

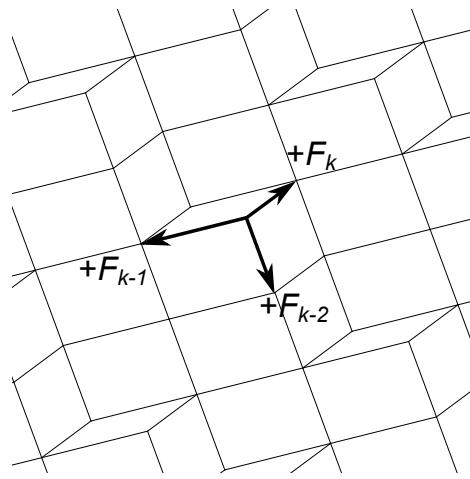


Abb. 3.6: Drei Richtungen im zweidimensionalen Gitter

\mathcal{K}_k ergibt sich demnach mit periodischen Randbedingungen als symmetrische Toeplitzmatrix:

$$K_{ij} = \sum_{l=0}^d \delta_{|i-j|, F_{k-l}} \quad . \quad (3.31)$$

Für das zweidimensionale Rauzy-Tiling lautet die Verbindungsmaatrix beispielsweise

$$\mathcal{K}_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad .$$

Ein Vergleich von Gl. (3.27) mit Gl. (2.15) und Gl. (2.16) zeigt, dass der Hamilton-Operator proportional zur Verbindungsmaßmatrix ist:

$$\hat{\mathcal{H}} = t \cdot \mathcal{K}_k . \quad (3.32)$$

Diese Gleichung verknüpft auf einfache Weise die quantenmechanischen Eigenschaften mit der Geometrie des Systems. Für die in den folgenden Kapiteln aufgeführten Rechnungen genügt es also, die Verbindungsmaßmatrix \mathcal{K}_k zu betrachten. Sowohl die Systemabmessungen und somit die Skalierung der Energieeigenwerte als auch die Einheiten stecken im Vorfaktor t . Des Weiteren setzt man vereinfacht $\hbar = 1$, um nicht mit allzu kleinen Werten rechnen zu müssen. Somit erhält man die Energien in Frequenzeinheiten.

3.4 Die Nächste-Nachbar-Umgebungen

Aus Gl. (3.31) und dem darunter angefügten Beispiel lassen sich sofort einige geometrische Eigenschaften der Rauzy-Tilings in d Dimensionen ableiten.

Es existieren $d + 1$ verschiedene Nächste-Nachbar-Verknüpfungen, welche durch die Gitterpunktdifferenzen F_{k-l} ($0 \leq l \leq d$) gegeben sind. Die Anzahl der Paare von nächsten Nachbarn, deren Verbindungsrichtung durch die Differenz F_l gegeben ist, beträgt $2(F_{k+1} - F_l)$. Die Anzahl und Position der Einträge einer Zeile gibt die Anzahl und Verknüpfungsrichtung der nächsten Nachbarn eines Gitterpunktes und somit deren lokale Umgebung an. Mit $\mathcal{P}_{a_0 a_1 \dots a_d}$ sei ein Gitterpunkt bezeichnet, welcher a_l ($0 \leq l \leq d$) Nächste-Nachbar-Verknüpfungen mit der Gitterpunktdifferenz F_{k-l} aufweist. Es ist unbedingt $0 \leq a_l \leq 2$, da jede Richtung höchstens zweimal (vorzeichenbehaftet) auftreten kann. Demzufolge gibt es maximal 2^{d+1} lokale Umgebungen. Für $d \geq 2$ ist $F_{k-1} < F_{k+1} - F_k < F_k$, damit läuft bei zeilenweiser Betrachtung die obere Diagonale $\delta_{|i-j|, F_k}$ aus der Verbindungsmaßmatrix, nachdem der erste Eintrag der unteren Diagonale $\delta_{|i-j|, F_{k-1}}$ und bevor der erste Eintrag der unteren Diagonale $\delta_{|i-j|, F_k}$ begonnen hat. Durch die schwachbesetzte Toeplitzstruktur der Verbindungsmaßmatrix, lässt sich diese zeilenweise in Blöcke gleicher lokaler Umgebung einteilen und es ergeben sich $2(d+1) + 1 = 2d + 3$ Abschnitte:

- 1: Gitterpunkte der Art $\mathcal{P}_{1\dots 1}$, da in den ersten Zeilen von \mathcal{K}_k alle $d + 1$ oberen Diagonalen und keine untere Diagonale vorhanden ist.
- 2: Gitterpunkte der Art $\mathcal{P}_{1\dots 12}$ durch das Einsetzen der unteren Diagonale $\delta_{|i-j|, F_{k-d}}$
- 3: Gitterpunkte der Art $\mathcal{P}_{1\dots 122}$ durch das Einsetzen der unteren Diagonale $\delta_{|i-j|, F_{k-d+1}}$
- ⋮
- $d + 1$: Gitterpunkte der Art $\mathcal{P}_{12\dots 2}$ durch das Einsetzen der unteren Diagonale $\delta_{|i-j|, F_{k-1}}$
- $d + 2$: Gitterpunkte der Art $\mathcal{P}_{02\dots 2}$ durch das Ende der oberen Diagonale $\delta_{|i-j|, F_k}$
- $d + 3$: Gitterpunkte der Art $\mathcal{P}_{12\dots 2}$ durch das Einsetzen der unteren Diagonale $\delta_{|i-j|, F_k}$
- ⋮
- $2d + 1$: Gitterpunkte der Art $\mathcal{P}_{1\dots 122}$ durch das Ende der oberen Diagonale $\delta_{|i-j|, F_{k-d+2}}$
- $2d + 2$: Gitterpunkte der Art $\mathcal{P}_{1\dots 12}$ durch das Ende der oberen Diagonale $\delta_{|i-j|, F_{k-d+1}}$
- $2d + 3$: Gitterpunkte der Art $\mathcal{P}_{1\dots 1}$ durch das Ende der oberen Diagonale $\delta_{|i-j|, F_{k-d}}$

Die letzten $d + 1$ Blöcke sind aufgrund der Symmetrie $\mathcal{K}_k^T = \mathcal{K}_k$ in Anzahl und Art der Gitterpunkte identisch mit den ersten $d + 1$ Blöcken. Somit existieren im d -dimensionalen Rauzy-Tiling ($d \geq 2$) insgesamt genau $d + 2$ verschiedene durch die Nächste-Nachbar-Verknüpfungen charakterisierte lokale Umgebungen, welche für zwei und drei Dimensionen in Abb. 3.7 und 3.8 dargestellt sind. Die Anzahl der Gitterpunkte $\#\mathcal{P}$ je Art beträgt hierbei

$$\begin{aligned}\#\mathcal{P}_{1\dots 1} &= 2F_{k-d} \quad , \\ \#\mathcal{P}_{1\dots 12} &= 2(F_{k-d+1} - F_{k-d}) \quad , \\ \#\mathcal{P}_{1\dots 122} &= 2(F_{k-d+2} - F_{k-d+1}) \quad , \\ &\vdots \\ \#\mathcal{P}_{12\dots 2} &= 2(F_{k+1} - F_k - F_{k-1}) \quad , \\ \#\mathcal{P}_{02\dots 2} &= F_k - (F_{k+1} - F_k) = F_{n-d-1} \quad .\end{aligned}$$

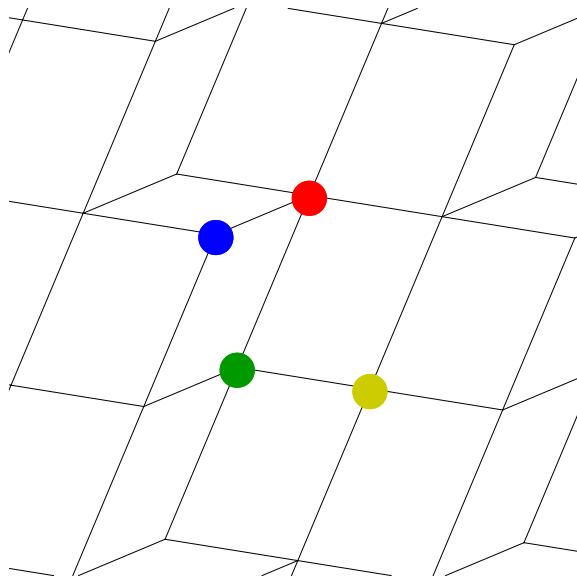


Abb. 3.7: Die vier verschiedenen lokalen Umgebungen des 2D-Systems: \mathcal{P}_{111} blau, \mathcal{P}_{112} grün, \mathcal{P}_{122} rot, \mathcal{P}_{022} gelb

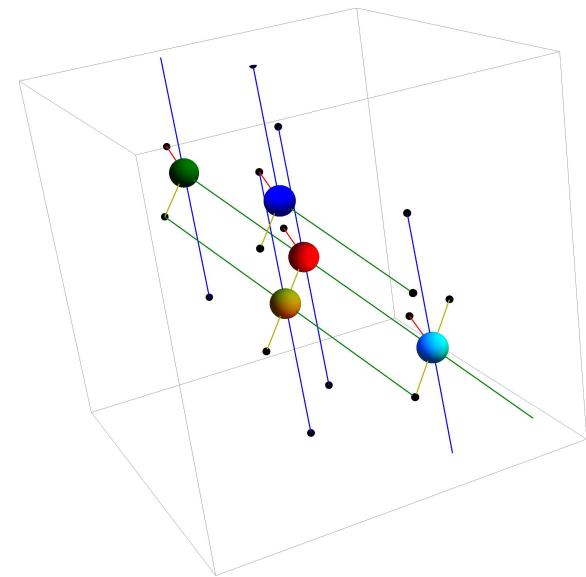


Abb. 3.8: Die fünf verschiedenen lokalen Umgebungen des 3D-Systems: \mathcal{P}_{1111} blau, \mathcal{P}_{1112} grün, \mathcal{P}_{1122} rot, \mathcal{P}_{1222} cyan, \mathcal{P}_{0222} gelb

4 Die stationäre Lösung

Im Vordergrund dieses Kapitels steht die Diskussion der Eigenwerte und Eigenvektoren als Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung.

Hierzu wurden die folgenden bereits vorhandenen Fortran-Routinen verwendet:

1. dsyev aus dem Algebra-Paket Lapack [18] zur Berechnung des gesamten Spektrums:
Die Berechnungen waren im zweidimensionalen Rauzy-Tiling für das gesamte Eigensystem bis zur 16. Ordnung, für die Eigenwerte bis zur 17. Ordnung und im dreidimensionalen Rauzy-Tiling für das gesamte Eigensystem bis zur 15. Ordnung und für die Eigenwerte bis zur 16. Ordnung möglich, da es die Systemressourcen des PCs nicht zuließen, größere Datenmengen zu verarbeiten.
2. Jadamilu [19] zur näherungsweisen Berechnung der Eigenwerte großer Matrizen in Umgebung eines gewählten Startwertes:
Zunächst wurden die Berechnungen der größten bereits vorhandenen Systeme wiederholt und mit den Ergebnissen von dsyev verglichen. Da sich eine große Übereinstimmung zeigte, ist davon auszugehen, dass die Routine auch bei größeren Systemen korrekte Resultate liefert.

Die Programme liefern die F_{k+1} Energien E_n und zugehörigen Eigenzustände $|\psi_n\rangle$ der Verbindungsmaatrix \mathcal{H}_k . Im Weiteren ist die Anzahl der Gitterpunkte (= Anzahl der Eigenzustände) als Systemgröße N ($= F_{k+1}$) bezeichnet.

Als Vorlage für die Berechnung von Zustandsdichte, Partizipationszahl und Skalenexponent und als Vergleichsmaterial dienten Resultate von Triozon et al [20].

4.1 Die Zustandsdichte

Um die Vielzahl der Eigenenergien in eine übersichtliche Form zu bringen, definiert man wie bei Einführung des freien Elektronengases in der Festkörperphysik die *normierte Zustandsdichte*

$$n(E) = \frac{1}{N} \frac{\Delta N}{\Delta E} \quad (4.1)$$

und interpretiert die von Null verschiedenen Gebiete als *quasikontinuierliche Energiebänder*, welche bis zur Fermienergie aufgefüllt sind. Die Zustandsdichte gibt die Anzahl der Zustände ΔN pro Energieintervall ΔE an. Die Normierung auf die Gesamtzahl N der Zustände sorgt für eine Vergleichbarkeit zwischen verschiedenen Ordnungen, da mit größerer Einheitszelle mehr Gitterpunkte und somit Zustände hinzukommen, diese aber aufgrund der Tatsache, dass stets das gleiche System beschrieben wird und sowohl die Bandkanten als auch der qualitative Verlauf erhalten bleiben sollten, immer dichter liegen. Dies ist in Abb. 4.1 für das zweidimensionale Rauzy-Tiling in der 17. Ordnung mit 35 890 Gitterpunkten und in Abb. 4.2 für das dreidimensionale Rauzy-Tiling in der 16. Ordnung mit 39 648 Gitterpunkten dargestellt.

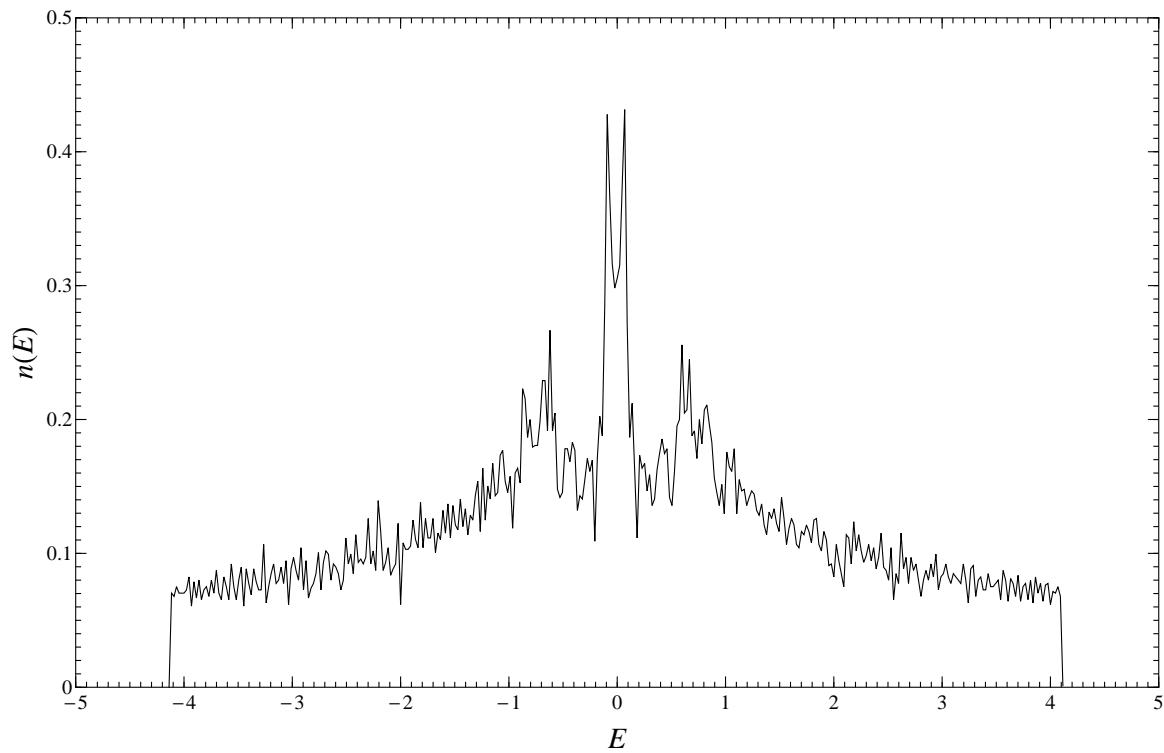


Abb. 4.1: Normierte Zustandsdichte des 2D-Systems (17. Ordnung: 35 890 Gitterpunkte)

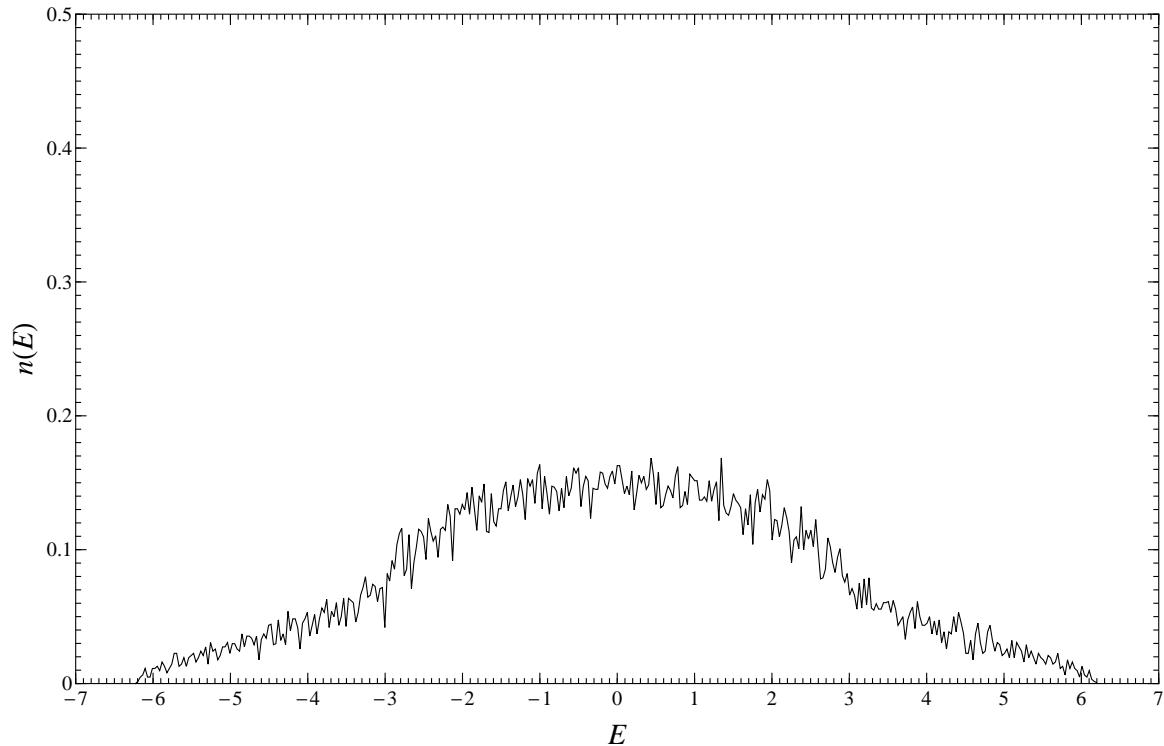


Abb. 4.2: Normierte Zustandsdichte des 3D-Systems (16. Ordnung: 39 648 Gitterpunkte)

Es zeigt sich, dass sich sowohl beim zweidimensionalen als auch beim dreidimensionalen System ein annähernd um die Bandmitte $E = 0$ symmetrisches Energieband ausbildet, wobei die Bandkante E_B beim dreidimensionalen System größer ist:

$$E_{B,2D} = 4,12 \quad , \quad E_{B,3D} = 6,20 \quad . \quad (4.2)$$

Beim 2D-System erkennt man im Intervall $[-1, 1]$ zahlreiche größere Peaks und im Abstand $E \approx \pm 0,08$ zur Bandmitte zwei sehr starke Peaks, bei denen die Zustandsdichte auf den fast dreifachen Wert ansteigt und welche ein Tal einschließen, bei dem $n(E)$ immer noch doppelt so groß ist. Zur Bandkante hin sinkt $n(E)$ leicht ab und fällt bei E_B abrupt auf Null. Die Zustandsdichte des 3D-Systems weist keinerlei größere Peaks auf. Auch bricht diese an der Bandkante nicht ab, sondern sinkt beginnend bei einem Knick bei $|E| = 3$ über einen größeren Bereich bis auf Null. Vergleicht man diese Resultate mit denen des periodischen Gitters, so zeigen sich gewisse Gemeinsamkeiten: Die Bandkanten sind im Vergleich zu $E_{B,2D,periodisch} = 4$ und $E_{B,3D,periodisch} = 6$ nur leicht erhöht. Der grobe Verlauf der Zustandsdichte des dreidimensionalen Rauzy-Tilings ist dem eines periodischen Gitters ähnlich. So sind sowohl der wurzelförmige Anstieg an den Bandkanten als auch das konstante Plateau in der Bandmitte annähernd vorhanden. Im zweidimensionalen Rauzy-Tiling hingegen weicht der Kurvenverlauf vor allem in der Bandmitte signifikant von der konstanten Zustandsdichte des periodischen Gitters ab.

Als weitere auffällige Eigenschaft weisen beide Kurven einen sehr zackigen Verlauf auf. Zwar lässt sich aufgrund der begrenzten Anzahl berechneter Eigenwerte und der im Vergleich dazu recht kleinen Intervalle nicht ausschließen, dass dieser Effekt aus der Berechnung resultieren könnte und sich im unendlich großen System die Kurven glätten, jedoch legen tiefgehendere Untersuchungen nahe, dass es sich hierbei um eine inhärente Eigenschaft quasiperiodischer Gitter handelt [21]. Simulationen von komplexen Aluminummanganat-Phasen zeigten ebenfalls, dass es sich bei solchen zackigen Zustandsdichten nicht um Artefakte handelt [22].

4.2 Die Partizipationsrate

Die Eigenzustände $|\psi_n\rangle$, welche im Kapitel 4.4 dargestellt und ausführlicher diskutiert sind, können sehr unterschiedlich über der Einheitszelle ausgedehnt sein. Zur Charakterisierung der Ausgedehntheit bzw. Lokalisiertheit der Zustände definiert man die *Partizipationszahl* [23]

$$P(E_n) = \frac{1}{\sum_{i=1}^N |\langle i | \psi_n \rangle|^4} \quad . \quad (4.3)$$

Zur Verdeutlichung betrachtet man zwei anschauliche Extremfälle:

- Ist der zur Energie E_n gehörende Zustand $|\psi_n\rangle$ auf einen festen Gitterpunkt j lokalisiert, so ist die Projektion von $|\psi_n\rangle$ auf einen beliebigen Gitterpunkt i Null für alle i ungleich j und Eins für i gleich j . Von der Summe bleibt also nur der Summand $|\langle j | \psi_n \rangle|^4 = 1$ übrig und es ergibt sich $P(E_n) = 1$.
- Für einen über dem gesamten System gleichmäßig verteilten Zustand $|\psi_{n'}\rangle$ hingegen ist die Projektion auf einen beliebigen Gitterpunkt konstant und ergibt sich aufgrund der Normierung von $|\psi|^2$ zu $\langle i | \psi_{n'} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}$ für alle i . Die Summation liefert nun $\sum_{i=1}^N \frac{1}{N^2} = \frac{1}{N}$ und es ist somit $P(E_{n'}) = N$.

Die Partizipationszahl gibt folglich an, auf wie viele Gitterpunkte der jeweilige Zustand effektiv lokalisiert ist.

Zur Vergleichbarkeit verschiedener Ordnungen normiert man wieder auf die Anzahl der Zustände N . Die somit definierte *Partizipationsrate*

$$p(E_n) = \frac{P(E_n)}{N} \quad (4.4)$$

gibt dann den Anteil am Gesamtsystem an, auf den der entsprechende Zustand ausgedehnt ist. Für das zweidimensionale Rauzy-Tiling 16. Ordnung mit 19 513 Gitterpunkten ist die Partizipationsrate in Abb. 4.3 dargestellt und für das dreidimensionale Rauzy-Tiling 15. Ordnung mit 20 569 Gitterpunkten in Abb. 4.4.

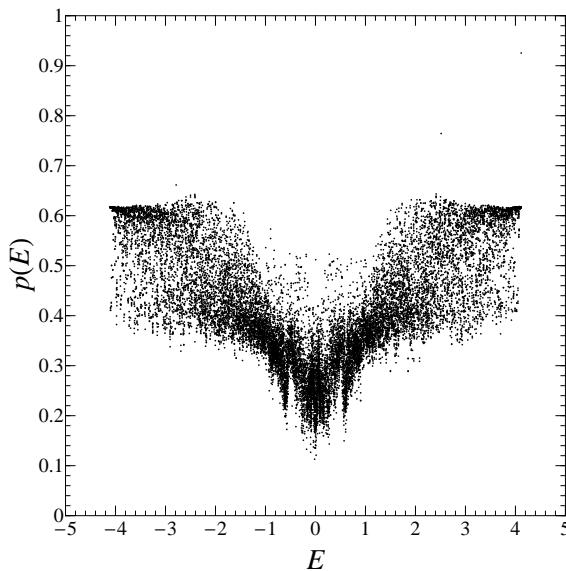


Abb. 4.3: Partizipationsrate des 2D-Systems
(16. Ordnung: 19 513 Gitterpunkte)

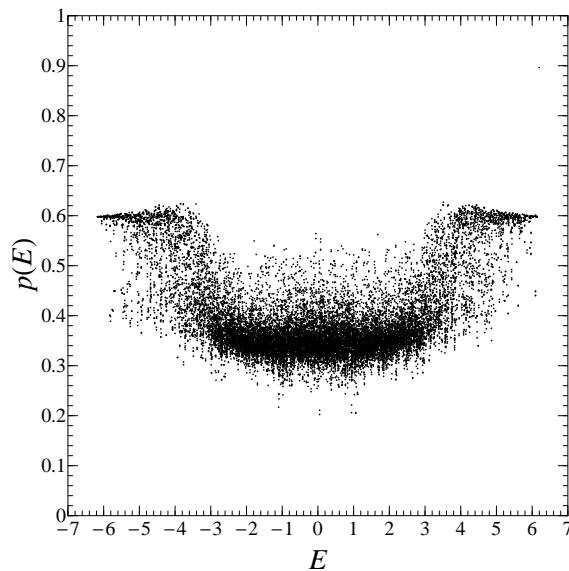


Abb. 4.4: Partizipationsrate des 3D-Systems
(15. Ordnung: 20 569 Gitterpunkte)

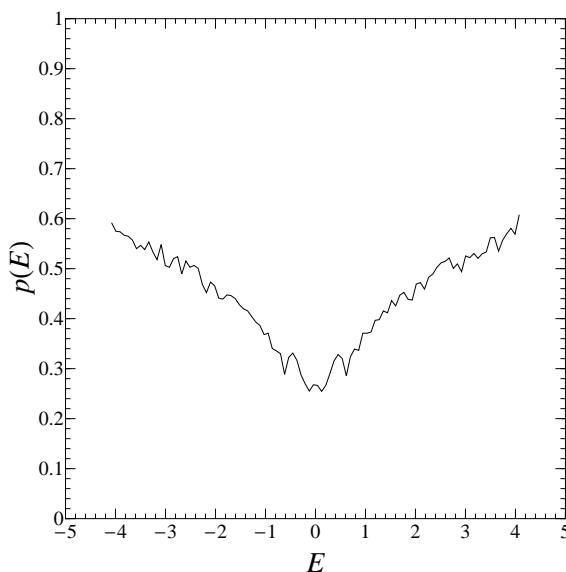


Abb. 4.5: Mittlere Partizipationsrate des 2D-Systems
(16. Ordnung: 19 513 Gitterpunkte)

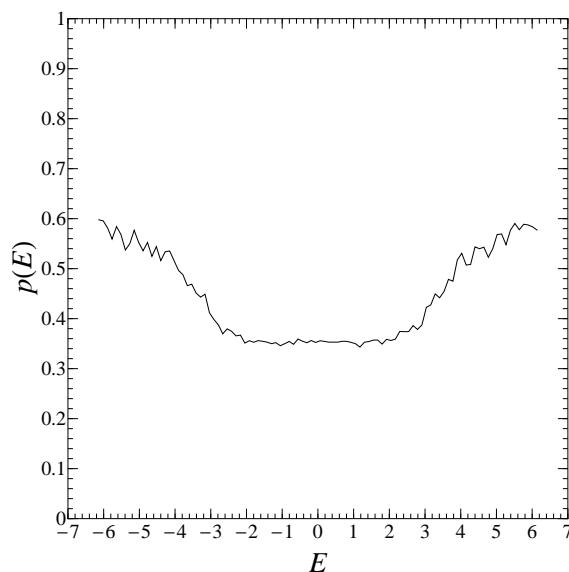


Abb. 4.6: Mittlere Partizipationsrate des 3D-Systems
(15. Ordnung: 20 569 Gitterpunkte)

Es ist aus beiden Diagrammen ersichtlich, dass die Partizipationsrate einer starken Streuung von etwa 0,2 bis 0,3 unterliegt. Sowohl im zwei- als auch im dreidimensionalen System sind die Zustände in der Bandmitte, in 2D im Intervall $[-1, 1]$ und in 3D im Intervall $[-3, 3]$, stärker lokalisiert, d.h. auf weniger Gitterplätzen ausgedehnt, als in der Nähe der Bandkanten, zu deren Richtung hin immer mehr Zustände mit höherer Partizipationsrate zu finden sind. Des Weiteren zeigt sich bei betragsmäßig großen Energien ein Plateau bei $p \approx 0,62$, über dem nur vereinzelt Zustände liegen. In der Nähe der Bandmitte zeigen sich Unterschiede zwischen beiden Systemen. So existiert im 3D-System ebenfalls ein unteres Plateau bei $p \approx 0,27$, unterhalb dessen kaum Zustände zu finden sind. Die Partizipationsrate ist allerdings in keinem Bereich klein genug, um von stark lokalisierten Zuständen sprechen zu können. Das 2D-System weist hingegen eine ausgeprägtere Struktur auf. In direkter Umgebung der Bandmitte und in zwei schmalen Energiebereichen bei $E \approx 0,6$ existieren wesentlich stärker lokalisierte Zustände mit Partizipationsraten bis zu $p \approx 0,15$.

Der Großteil der Zustände in der Bandmitte und bei der Bandkante häuft sich bei annähernd gleichen Partizipationsraten, sodass es sich anbietet, p über kleinere Energiebereiche zu mitteln und somit den groben Verlauf zu verdeutlichen. Dies ist für die gleichen Systeme in Abb. 4.5 und Abb. 4.6 abgebildet. Die größeren Partizipationsraten an den Bandkanten, das Plateau in der Bandmitte beim 3D-System und die ausgeprägtere Struktur des 2D-Systems sind hier ebenfalls deutlich. Weiterhin ist auffällig, dass die Bereiche kleiner Partizipationsraten des 2D-Systems und die Ränder des unteren Plateaus des 3D-Systems gerade mit den Peaks (2D) bzw. den Knicken (3D) in der Zustandsdichte zusammenfallen (vgl. Abb. 4.1 und 4.2).

4.3 Der Skalenexponent

Schaut man sich die Partizipationsraten verschiedener Systemgrößen an, so zeigt sich, dass diese mit wachsendem N leicht abnehmen. Man betrachtet daher das Skalierungsverhalten genauer.

Fällt ein Zustand von seinem Maximum aus, abgesehen von stets auftretenden nahezu beliebigen Fluktuationen, exponentiell schnell ab, so spricht man von *exponentiell lokalisierten Zuständen*. Bei diesen wird die Partizipationszahl mit steigendem N gegen eine Konstante konvergieren. Für ausgedehnte Zustände hingegen wird P ebenfalls anwachsen. Der Zusammenhang zur makroskopischen elektrischen Leitfähigkeit ist allerdings nicht mit Bestimmtheit feststellbar. Vielmehr sind ausgedehnte bzw. exponentiell lokalisierte Zustände nur ein Indiz dafür, ob der Quasikristall als solcher elektrisch leitend bzw. nichtleitend ist.

Für ausgedehnte Zustände lässt sich der asymptotische Verlauf meist durch ein Potenzgesetz

$$P \sim N^\gamma \quad (4.5)$$

mit dem charakteristischen *Skalenexponent* γ beschreiben [23]. Hierbei entspräche $\gamma = 0$ exponentiell lokalisierten und $\gamma = 1$ ausgedehnten Zuständen, welche bei variierter Systemgröße stets auf den gleichen Systemanteil ausgebreitet sind. Für $0 < \gamma < 1$ nimmt die Partizipationsrate p mit wachsendem N ab und strebt gegen Null. Da allerdings P weiter wächst, ist der entsprechende Zustand nicht exponentiell lokalisiert. γ ist somit ein geeigneteres Maß als die Partizipationszahl P für die Lokalisiertheit der Zustände.

Abb. 4.7 zeigt die Abhängigkeit der mittleren Partizipationszahl (gemittelt über dem ge-

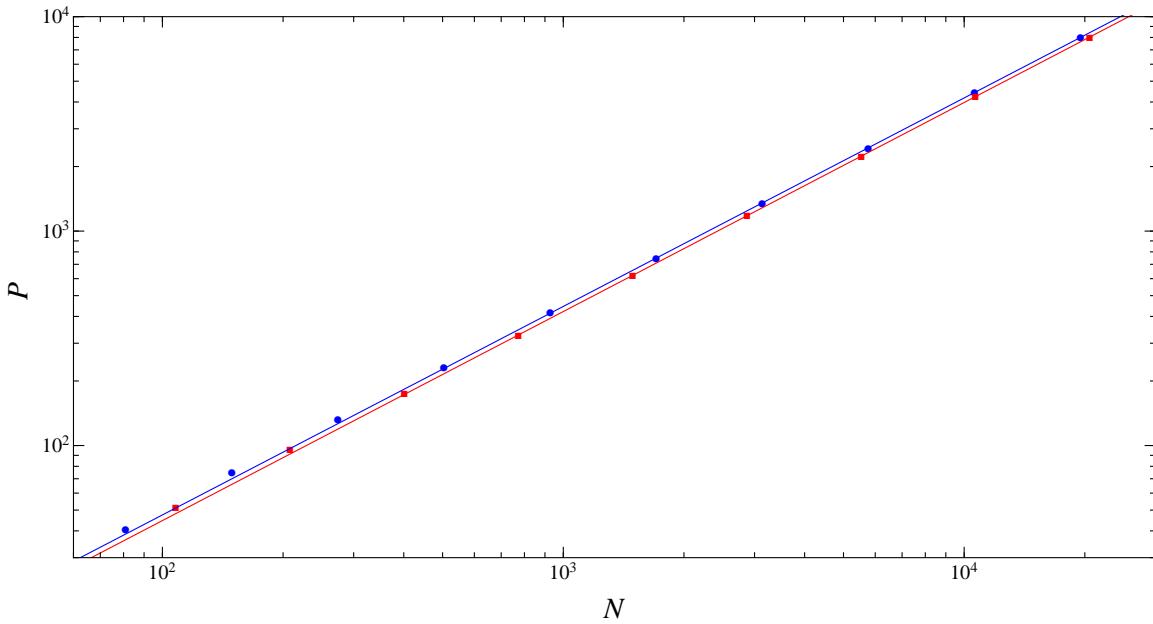


Abb. 4.7: Mittlere Partizipationszahl des 2D-Systems (blaue Punkte) und des 3D-Systems (rote Quadrate) in Abhängigkeit der Systemgröße, durchgezogene Linie: nichtlinearer Fit

samten Spektrum) von der Systemgröße in doppeltlogarithmischer Darstellung. Ein nicht-linearer Fit nach Gl. (4.5) liefert die Werte

$$\gamma_{2D} = 0,972 \quad , \\ \gamma_{3D} = 0,975 \quad .$$

Beide Ergebnisse liegen sehr nahe bei Eins, sodass alle Zustände im Mittel stark ausgedehnt sind. Dies bestätigt die Erwartungen, da selbst für den Zustand mit der geringsten Partizipationsrate bei 16. Ordnung (Abb. 4.8d) kein exponentieller Abfall vorhanden ist. Da γ im dreidimensionalen etwas größer ist, sind die Zustände bei abnehmender Dimension stärker lokalisiert [24]. Des Weiteren ist zu beachten, dass hier nur der Mittelwert über allen Energien betrachtet wurde, aber möglicherweise in unterschiedlichen Energiebereichen verschiedene γ auftreten können. Eine energieabhängige Betrachtung durch Mittelung der Partizipationszahl über Teilbereiche des Spektrums ließ allerdings keine eindeutigen Tendenzen erkennen. Dies könnte auf eine Energieunabhängigkeit des Skalenexponenten γ hindeuten, muss aber nicht zwangsläufig der Fall sein, da eine nicht ausreichende Systemgröße die gleichen Resultate liefern würde.

4.4 Die Eigenzustände

Wie bereits in Kapitel 4.2 beschrieben, sind die Eigenzustände sehr unterschiedlicher Natur. Für das zweidimensionale Rauzy-Tiling 16. Ordnung mit 19 513 Gitterpunkten sind vier sehr unterschiedliche Zustände mit verschiedenen Partizipationsraten in Abb. 4.8 dargestellt. Die Diagramme in der oberen Hälfte zeigen in einer dreidimensionalen Darstellung die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi|^2$ über den Gitterpunkten, welche mittels Gl. (3.26) schon in Kapitel 3.2.1 berechnet wurden. Hierbei ist zu beachten, dass die Skalierung der z-Achsen nicht identisch ist, sondern für optimale Darstellung jeweils angepasst wurde. Die Diagramme darunter zeigen den selben Sachverhalt in einem zweidimensionalen Diagramm, wobei hier $|\psi|^2$ den Radius der Kreise an den Gitterpunkten bestimmt. Da sich

aufgrund ausgedehnter Zustände die Streuung nicht über mehrere Größenordnungen erstreckt, wurde eine lineare Abhängigkeit gewählt⁴.

Die Untersuchung verschiedener Ordnungen zeigte, dass derjenige Zustand mit der höchsten Energie (Bandkante) eine bedeutend höhere Partizipationsrate und somit die regelmäßige Struktur aufweist, welche mit einer „Eierpappe“ vergleichbar ist (Abb. 4.8a). Weiterhin existieren viele Zustände mit $0,2 \leq p \leq 0,6$, von denen zwei charakteristische ausgewählt wurden. Einige haben eine deutliche periodische Struktur, bei der sich Streifen oder Inseln mit größerer Aufenthaltswahrscheinlichkeit ausbilden (Abb. 4.8b). Andere sind unregelmäßig in der Anordnung der Peaks (Abb. 4.8c). Hierbei ist jedoch die Partizipationsrate kein ausschlaggebendes Kriterium, ob der entsprechende Zustand periodisch ist oder nicht. Vielmehr sind die periodischen Zustände in Umgebung der Bandkante zu finden, während die nicht-periodischen in der Bandmitte auftreten. Bei dem ausgewählten Zustand mit sehr kleiner Partizipationsrate sieht man, dass dort die Wellenfunktion auf kleinere Gebiete lokalisiert ist und in der restlichen Struktur kaum nennenswerte Aufenthaltswahrscheinlichkeiten vorhanden sind (Abb. 4.8d).

Anhand der kreiskodierten Abbildungen erkennt man eine weitere Eigenschaft quasiperiodischer Gitter: Die Struktur weist zwar keine Periodizität auf, allerdings lassen sich beliebige Ausschnitte andernorts (im unendlichen Grenzfall sogar beliebig oft) wiederfinden, sodass sich auch in der Wellenfunktion ähnliche Strukturen in verschiedenen Gebieten wiederfinden. Dies ist auch in Abb. 4.8c und 4.8d erkennbar. Quasiperiodische Gitter besitzen in der Regel auch eine fraktale (selbstähnliche) Struktur [25], d.h. dass ein Ausschnitt die gleiche Struktur aufweist wie das gesamte Gitter. Die hier abgebildeten Gitter sind allerdings noch zu klein, um dies zu erkennen.

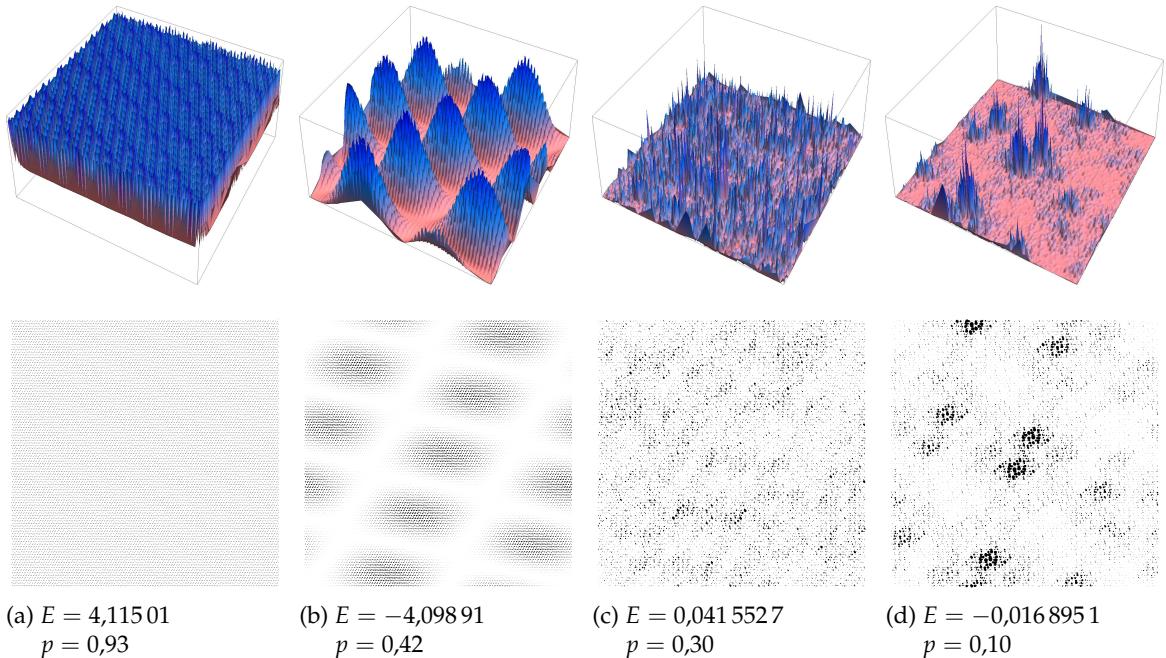


Abb. 4.8: Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi|^2$ der Eigenzustände zu verschiedenen Energien E des 2D-Systems (16. Ordnung: 19 513 Gitterpunkte)

⁴ $r = 0$ für $N |\psi|^2 < 10^{-2}$, $r = 0,01 \sqrt{\frac{N |\psi|^2}{10^2}}$ für $10^{-2} \leq N |\psi|^2 \leq 10^2$, $r = 1$ für $10^2 < N |\psi|^2$

Auch im dreidimensionalen Rauzy-Tiling sind die eben beschriebenen Eigenschaften zu finden. Da bei gleicher Systemgröße allerdings weniger Gitterpunkte pro Raumrichtung vorhanden sind, sind diese weniger deutlich ausgeprägt. Zwei Beispiele sind in Abb. 4.9 dargestellt. Abb. 4.9a zeigt ein ausgeprägtes Streifenmuster, während Abb. 4.9b keine erkennbare Periodizität ausweist. Die Grafiken sind hier analog der kreiskodierten Abbildungen im zweidimensionalen zu verstehen. An jedem Gitterpunkt befindet sich ein Würfel, dessen Kantenlänge ein Maß für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist (lineare Skalierung⁵). Die Farbe der Würfel soll lediglich zur Orientierung dienen. Das Koordinatensystem bildet einen Farbwürfel, bei dem x , y und z die Anteile der Farben rot, grün und blau angeben. Ein an der Position (x, y, z) befindlicher Würfel wird dann in der zugehörigen RGB-Farbe dargestellt.

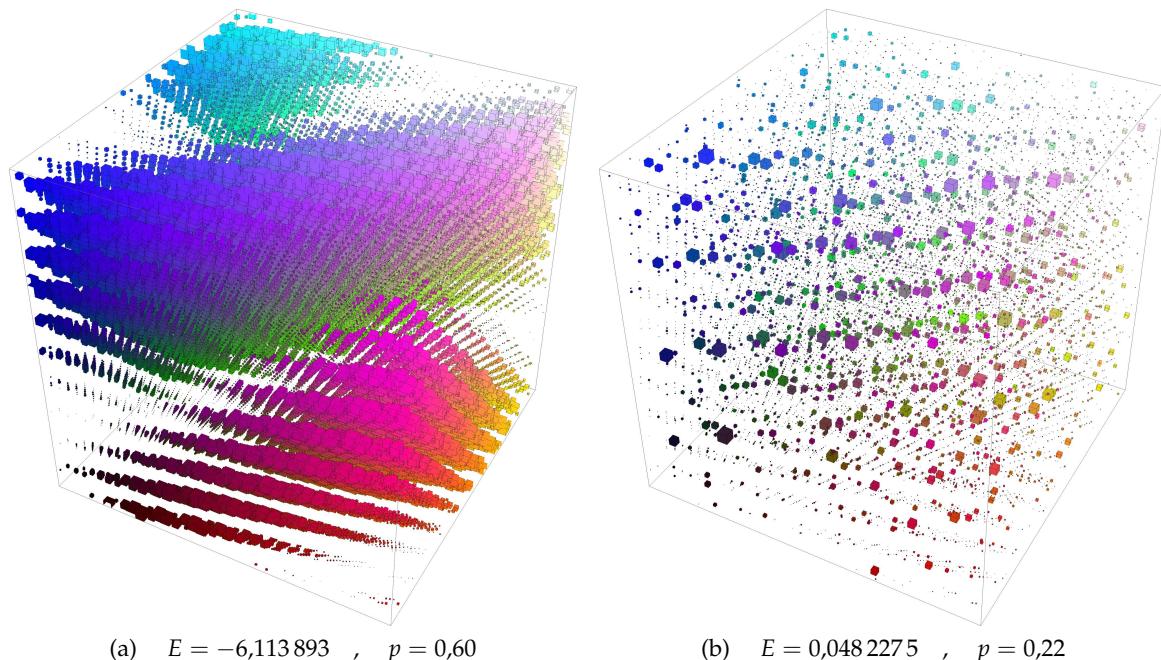


Abb. 4.9: Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi|^2$ der Eigenzustände zu verschiedenen Energien E des 3D-Systems (15. Ordnung; 20569 Gitterpunkte)

⁵ $k = 0$ für $|\psi|^2 < 10^{-2} \max\{|\psi|^2\}$, $k = 0,03 \frac{|\psi|^2}{\max\{|\psi|^2\}}$ für $10^{-2} \max\{|\psi|^2\} \leq |\psi|^2$

5 Die Dynamik von Wellenpaketen

Dynamische Effekte, wie zum Beispiel das Diffusionsverhalten von Mikroteilchen und den dadurch resultierenden elektronischen Transport, werden quantenmechanisch durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung beschrieben. Dazu betrachtet man das Zerfließen eines *deltaförmigen Wellenpaketes* $|\Phi(t)\rangle$, welches ein zum Zeitpunkt Null am Gitterpunkt j befindliches Teilchen beschreibt:

$$|\Phi(0)\rangle = |j\rangle \quad . \quad (5.1)$$

Dieses entwickelt man nach Eigenzuständen (vgl. Kapitel 2)

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |\Psi_n\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |\psi_n\rangle \cdot e^{-iE_n t} \quad (5.2)$$

und mit

$$\langle \psi_m | \Phi(0) \rangle = \langle \psi_m | j \rangle = \sum_{n=1}^N c_n \delta_{mn} = c_m \quad (5.3)$$

erhält man den Ausdruck

$$|\Phi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N \langle \psi_n | j \rangle |\psi_n\rangle \cdot e^{-iE_n t} \quad . \quad (5.4)$$

Das Verhalten dieses Wellenpaketes im zweidimensionalen Rauzy-Tiling (16. Ordnung mit 19 513 Gitterpunkten) ist in den folgenden Abschnitten zunächst qualitativ und anschließend anhand der zeitlichen Autokorrelationsfunktion und des mittleren Abstandsquadrates quantitativ näher untersucht.

5.1 Das Zeitverhalten

In Abb. 5.1 ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Phi(t)|^2$ des deltaförmigen Wellenpaketes im 2D-Rauzy-Tiling zu verschiedenen Zeiten t dargestellt. Dabei wurden die Berechnungen für denjenigen Startpunkt j , welcher dem Zentrum am nächsten liegt, durchgeführt. Weiterhin wurden exponentiell ansteigende Zeitschritte gewählt, um die verschiedenen Stadien des Zerfließens deutlich zu machen. Es ist zu erkennen, dass der Delta-Peak (Abb. 5.1a) zunächst schnell abklingt und anschließend in direkter Umgebung des Startpunktes stets einige größere Peaks entstehen, während auch in größerem Abstand die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ansteigt und zahlreiche kleinere Peaks annähernd ringförmig auftreten (Abb. 5.1b bis 5.1g). In den Grafiken sind alle $|\Phi|^2 < 10^{-6}$ nicht dargestellt, da diese keinen wesentlichen Beitrag liefern. Das rosafarbene Gebiet kann demnach als Ausdehnungsgebiet betrachtet werden. Dieses wächst soweit an, bis es bei $t_{\text{Rand}} \approx 28$ schließlich den Rand der Einheitszelle erreicht hat. Aufgrund der periodischen Randbedingungen strömt das Wellenpaket beim Überschreiten des Randes auf der gegenüberliegenden Seite wieder in das Gitter ein (Abb. 5.1g). Betrachtet man der Verlauf weiter, so kommt es anschließend zu Interferenzerscheinungen durch die Überlagerung der sich immer stärker überlappenden

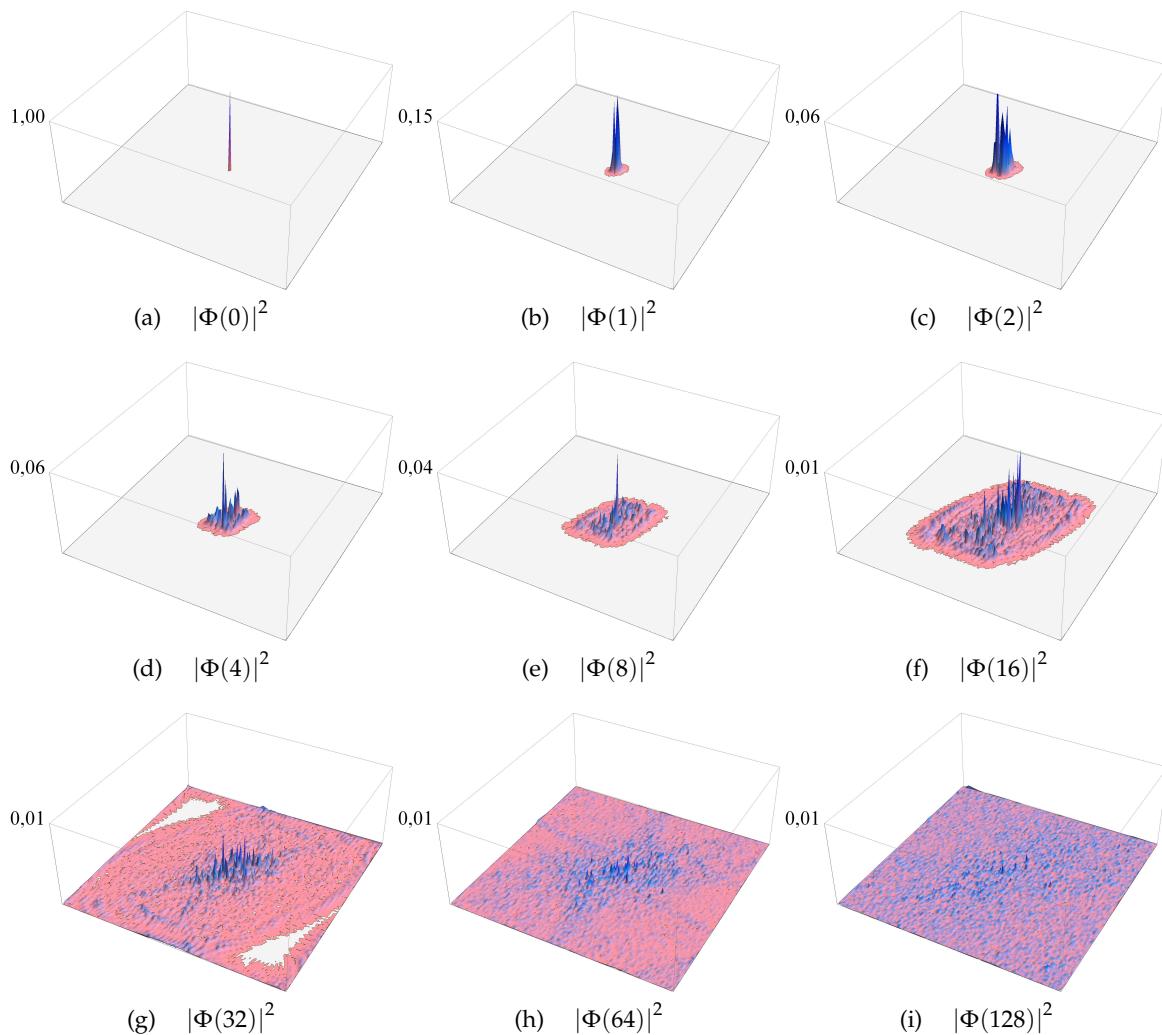


Abb. 5.1: Zeitliche Entwicklung eines deltaförmigen Wellenpaketes $|\Phi(t)|^2$ im 2D-System
(16. Ordnung: 19 513 Gitterpunkte)

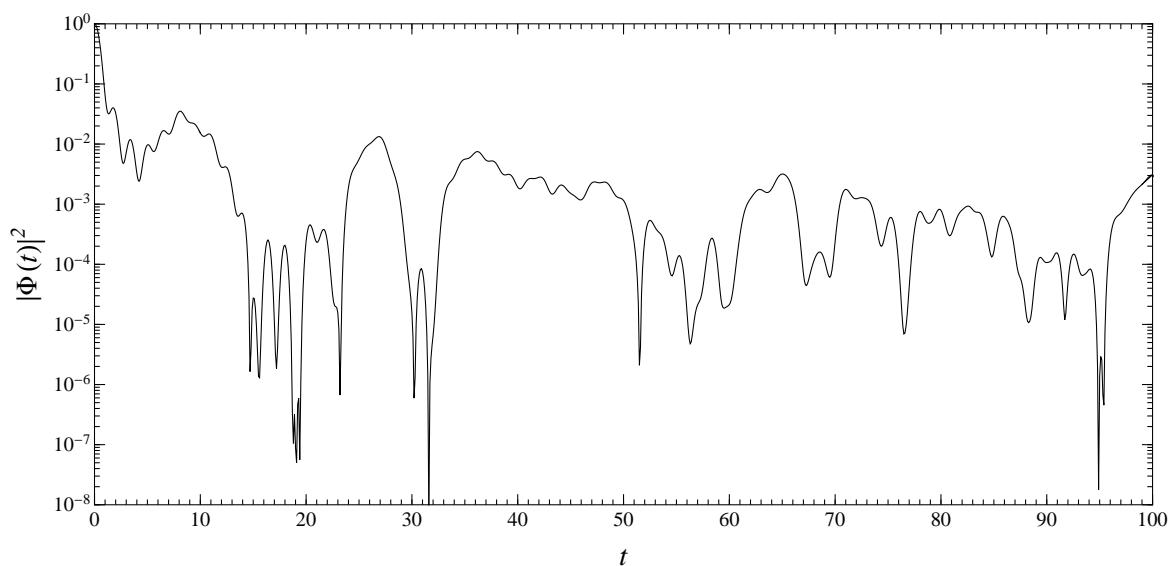


Abb. 5.2: Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Phi(t)|^2$ am Initialisierungspunkt j

Wellenfunktion. Am deutlichsten ist dies in Abb. 5.1g an den bereits überschrittenen Rändern zu erkennen. Für größere Zeiten nehmen die Peaks im Zentrum weiter ab, bis sich schließlich im gesamten Gebiet eine bis auf die stets vorkommenden Fluktuationen annähernd gleiche Aufenthaltswahrscheinlichkeit einstellt (Abb. 5.1h und 5.1i). Weiterhin fällt bei Abb. 5.1e, 5.1f und 5.1g auf, dass sich $|\Phi(t)|^2$ nicht homogen über das Gitter ausbreitet, sondern dass es eine Vorzugsrichtung gibt. Ein Vergleich mit Abb. 3.3 und 3.6 zeigt, dass es sich hierbei um diejenige Richtung handelt, welche durch die Gitterpunktdifferenz F_{k-2} beschrieben wird. Diese Nächste-Nachbar-Verknüpfung tritt im Gitter am häufigsten auf und folglich besitzt das Rauzy-Tiling in dieser Richtung die regelmäßigste Struktur und somit auch die besten Ausbreitungsmöglichkeiten.

Der zeitliche Verlauf der Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Initialisierungspunkt j (d.h. $|\langle j | \Phi(t) \rangle|^2$) ist in Abb. 5.2 dargestellt, wobei j so gewählt wurde, dass es dem blau markierten Gitterpunkt aus Abb. 5.3 entspricht. Es ist ersichtlich, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit insgesamt über acht Größenordnungen, zu manchen Zeiten stärker und zu anderen weniger stark schwankt und somit kaum physikalisch relevante Aussagen ableitbar sind. Daher glättet man die Kurve durch Integration. Dies ist im nächsten Abschnitt näher erläutert.

5.2 Die zeitliche Autokorrelationsfunktion

Durch das Zerfließen des Wellenpaketes werden von den umgebenden Gitterpunkten auch stets Teile zurückgestreut. Für quantitative Aussagen darüber definiert man die *zeitliche Autokorrelationsfunktion* [23, 26]

$$C(t) = \frac{1}{t} \int_0^t |\langle \Phi(0) | \Phi(t') \rangle|^2 dt' , \quad (5.5)$$

welche sich für das hier untersuchte deltaförmige Wellenpaket $|\Phi(0)\rangle = |j\rangle$ zu

$$C(t) = \frac{1}{t} \int_0^t |\langle j | \Phi(t') \rangle|^2 dt' \quad (5.6)$$

vereinfacht. $C(t)$ wird auch als Wiederkehrswahrscheinlichkeit bezeichnet und gibt den zeitlichen Verlauf des Mittelwertes der Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Initialisierungspunkt j an.

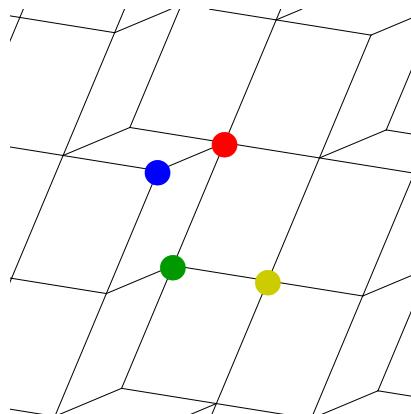


Abb. 5.3: Die vier verschiedenen lokalen Umgebungen des 2D-Systems:
 \mathcal{P}_{111} blau, \mathcal{P}_{112} grün, \mathcal{P}_{122} rot, \mathcal{P}_{022} gelb

In Abb. 5.4 ist die Autokorrelationsfunktion für vier Initialisierungspunkte j mit den vier verschiedenen lokalen Umgebungen des 2D-Rauzy-Tilings, welche nochmals in Abb. 5.3 aufgeführt sind, dargestellt. Alle vier Kurven weisen den selben qualitativen Verlauf auf: Aus der Definition folgt $C(t \rightarrow 0) \rightarrow 1$. Für $t < 1$ schwächt sich zunächst nur die Wahrscheinlichkeit am Gitterpunkt j ab und verteilt sich auf die nächsten Nachbarn. Dies ist nicht von der Beschaffenheit des Gitters abhängig und somit stets gleich. Anschließend kommt es zur Ausbreitung über dem Gitter und zur Rückstreuung, welche durch dieses verursacht wird. Das Ende dieses physikalisch relevanten Bereiches wird durch den Zeitpunkt $2 \cdot t_{\text{Rand}}$ markiert. Ab t_{Rand} werden, verursacht durch die periodischen Randbedingungen, entfernte Aufenthaltswahrscheinlichkeiten wieder zum Ausgangspunkt zurücklaufen und letztlich bei $2 \cdot t_{\text{Rand}}$ den Gitterpunkt j erreichen. Der Trend setzt sich jedoch weiter fort, da diese Anteile sehr gering sind und sich erst für Zeiten $t \gtrsim 1000$ eine sichtbare Veränderung im Kurvenverlauf zeigt. Wenn nach hinreichend langer Zeit die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Zentrum stark abgeklungen ist und sich die Fluktuationen in der gesamten Struktur angleichen, so stellt sich in der zeitlichen Autokorrelationsfunktion ein konstanter Sättigungswert ein.

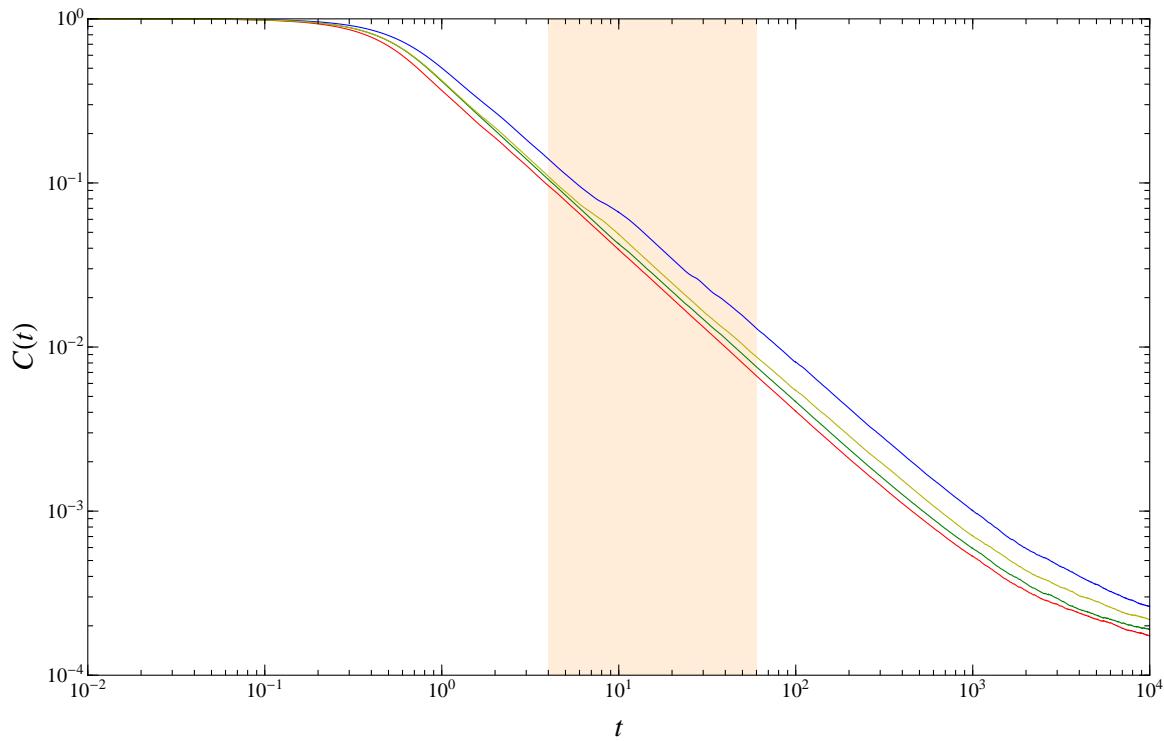


Abb. 5.4: Autokorrelationsfunktion des 2D-Systems (16. Ordnung: 19 513 Gitterpunkte) für die vier verschiedenen lokalen Umgebungen und physikalisch relevanter Bereich (orange)

Betrachtet man den physikalisch relevanten Bereich genauer, so zeigt sich wie bei der Skalierung der Partizipationszahl (vgl. Kapitel 4.3) ein Potenzgesetz, welches das asymptotische Verhalten eines unendlichen quasiperiodischen Gitters beschreibt [23, 26]:

$$C(t) \sim t^{-\delta} . \quad (5.7)$$

Ist $\delta = 0$, so ist $C(t)$ konstant, d.h. die Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Gitterpunkt j muss ebenfalls konstant Eins sein, da diese nicht größere Werte annehmen kann. Das Mikroteilchen bleibt demnach an seinem Ort, es gibt keine Diffusion. Bei $0 < \delta \leq 1$ handelt es

sich um *anomale Diffusion*, auf welche in Kapitel 5.3 etwas näher eingegangen wird. $\delta = 1$ ist ein weiterer Spezialfall, welcher bei der eindimensionalen Fibonacci-Kette den *ballistischen Teilchentransport* beschreibt, d.h. dass das Wellenpaket sich ohne durch Streuung behindert zu werden (ohne makroskopischen elektrischen Widerstand) ausbreitet. In höheren Dimensionen muss dies allerdings nicht zwingend der Fall sein. So liefert der ballistische Transport zwar $\delta = 1$, die Umkehrung ist aber nicht zwangsläufig ebenfalls gültig. Daher ist bei $\delta = 1$ dennoch anomaler Transport möglich.

Weiterhin gibt δ Auskunft über die Beschaffenheit des Energiespektrums. So ist bei diskreten Spektren $\delta = 0$, bei absolut kontinuierlichen Spektren $\delta = 1$ und bei singulär kontinuierlichen Spektren $0 < \delta < 1$ analog zu einer Cantormenge mit Lebesgue-Maß Null.

Ein nichtlinearer Fit im Bereich $4 \leq t \leq 60$ (in Abb. 5.4 orange markiert) liefert für die vier lokalen Umgebungen folgende Ergebnisse:

$$\begin{aligned}\delta_{111} &= 0,852 \quad (\text{blau}) \quad , \\ \delta_{112} &= 0,968 \quad (\text{grün}) \quad , \\ \delta_{122} &= 0,985 \quad (\text{rot}) \quad , \\ \delta_{022} &= 0,924 \quad (\text{gelb}) \quad .\end{aligned}$$

Hierbei gibt der Index die Anzahl der jeweiligen Nächste-Nachbar-Verknüpfungen mit den Gitterpunktdifferenzen F_k , F_{k-1} und F_{k-2} an (vgl. Abb. 5.3 und 3.6). Die rot, grün und gelb markierten Ausgangspunkte weisen mit wenigen Prozent Abweichung einen Exponenten nahe Eins auf. Dies deutet darauf hin, dass die Ausbreitung dort demnach nahezu ballistisch vollzogen wird. Der blau markierte Gitterpunkt mit nur drei nächsten Nachbarn hat hingegen einen Exponenten, der deutlich darunter liegt, d.h. hier tritt anomale Diffusion auf. Dies ist auf die unregelmäßige Nächste-Nachbar-Umgebung und den damit verbundenen größeren Rückstreuungen zurückzuführen. Die Werte legen nahe, dass das Energiespektrum absolut kontinuierlich ist. Ein Vergleich mit Abb. 4.1 bestätigt dies, da (zumindest im Rahmen der Genauigkeit) keine Lücken im Spektrum sichtbar sind.

5.3 Das mittlere Abstandsquadrat

Ein Maß für das Zerfließen des Wellenpaketes bietet das *mittlere Abstandsquadrat* [23]

$$w(t) = \sqrt{\sum_{i=1}^N |\vec{r}_i - \vec{r}_j|^2 \cdot |\langle i | \Phi(t) \rangle|^2} \quad , \quad (5.8)$$

wobei \vec{r}_j der Ortsvektor des j -ten Gitterpunktes ist. Das asymptotische Verhalten unendlich ausgedehnter Systeme ist wieder durch ein Potenzgesetz

$$w(t) \sim t^\beta \quad (5.9)$$

beschreibbar [23]. Dabei entspricht wiederum $\beta = 0$ einem statischen Delta-Peak und somit liegt keine Diffusion vor. Wie schon aus der Standard-Quantenmechanik-Vorlesung bekannt, ist das mittlere Abstandsquadrat eines zerfließenden freien Gauß-Paketes asymptotisch proportional zu t , d.h. dass $\beta = 1$ den ballistischen Transport beschreibt. Für $0 < \beta < 1$ liegt anomale Diffusion vor. Als weiterer Spezialfall ergibt sich hieraus für $\beta = \frac{1}{2}$ ebenfalls die *klassische Diffusion* [27] der Brownschen Molekularbewegung (Wiener-Prozess [28]) mit $w^2(t) \sim t$. In den Fällen $\beta < \frac{1}{2}$ bzw. $\beta > \frac{1}{2}$ breiten sich die Mikroteilchen demzufolge langsamer bzw. schneller aus als im klassischen Fall. Man spricht daher von *Sub-*

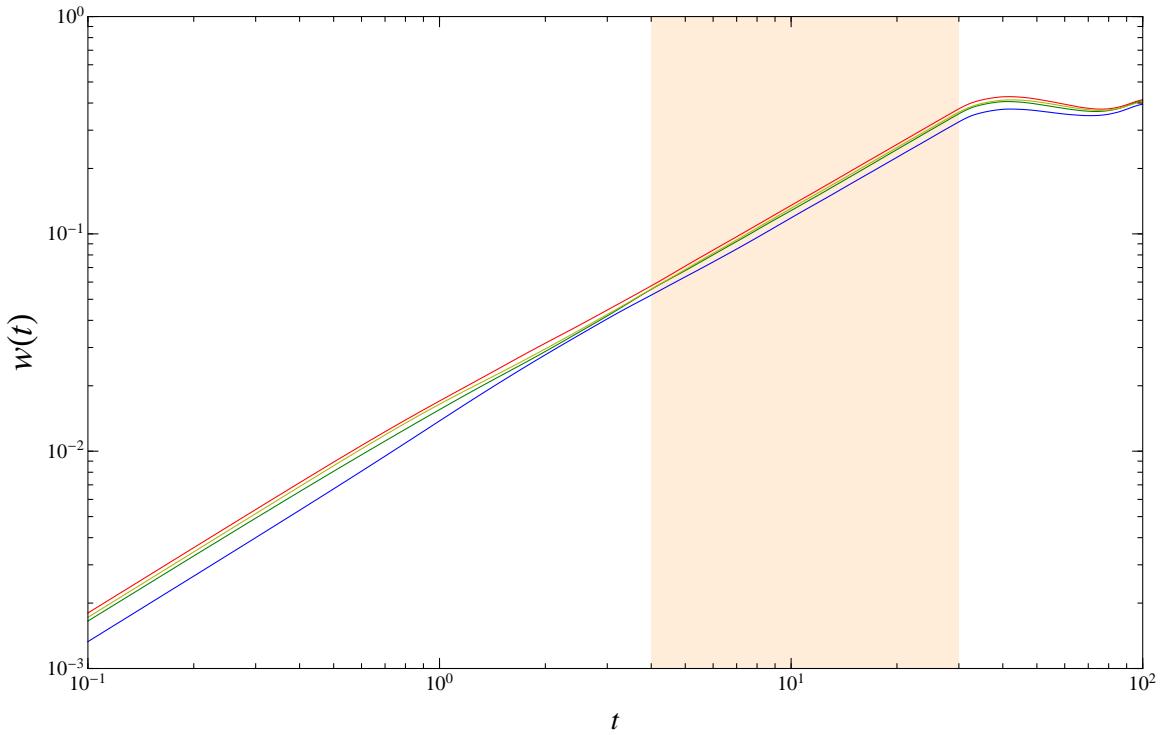


Abb. 5.5: Mittleres Abstandsquadrat des 2D-Systems (16. Ordnung; 19 513 Gitterpunkte) für die vier verschiedenen lokalen Umgebungen und physikalisch relevanter Bereich (orange)

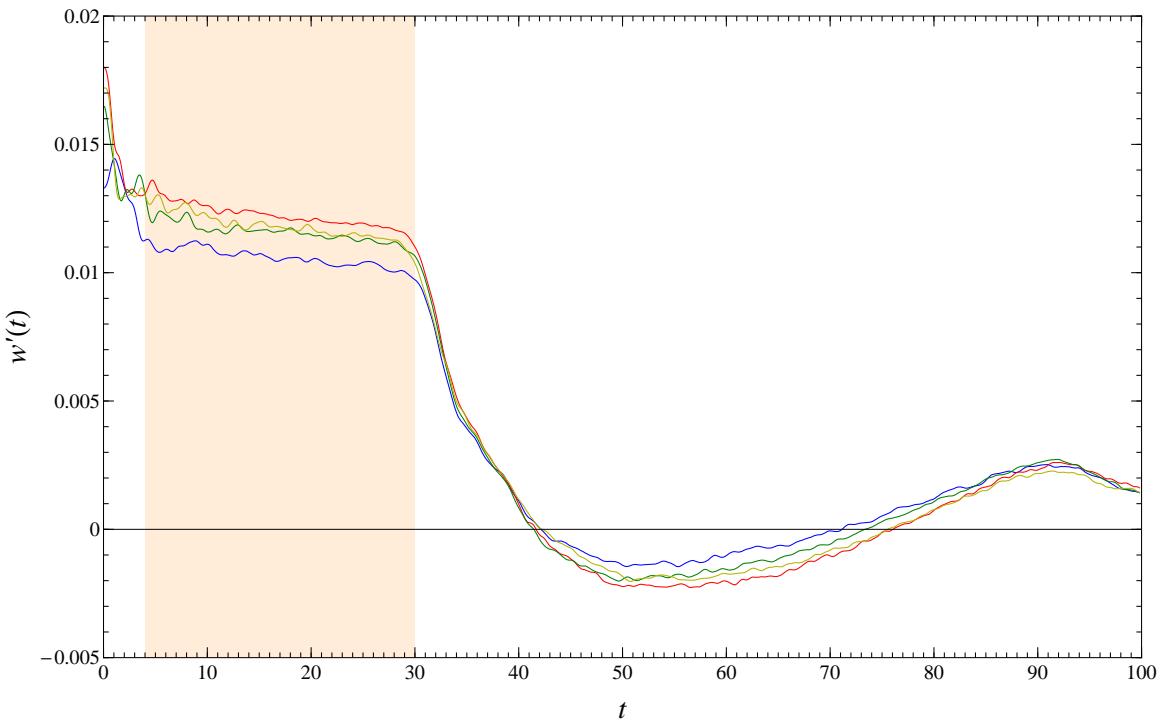


Abb. 5.6: Ableitung des mittleren Abstandsquadrates des 2D-Systems (16. Ordnung; 19 513 Gitterpunkte) für die vier verschiedenen lokalen Umgebungen und physikalisch relevanter Bereich (orange)

bzw. *Superdiffusion*.

Ein Vorteil bei der Betrachtung von $w(t)$ liegt darin, dass ein direkter Zusammenhang zur Leitfähigkeit σ besteht. Es gilt die Einstein-Formel

$$\sigma = 2e^2 D n(E_F) \quad (5.10)$$

mit der Zustandsdichte $n(E_F)$ an der Fermi-Energie und dem Diffusionskoeffizienten $D = \frac{w^2(\tau)}{\tau}$ mit der charakteristischen Stoßzeit τ . Somit gilt [29]

$$\sigma \propto 2e^2 n(E_F) \tau^{2\beta-1} . \quad (5.11)$$

Für die gleichen Startpunkte j des vorherigen Abschnittes ist das Verhalten des mittleren Abstandsquares in Abb. 5.5 dargestellt. Wie bei der zeitlichen Autokorrelationsfunktion sind wieder drei Abschnitte erkennbar: Für das deltaförmige Wellenpaket $|\Phi(0)|^2$ ist typischerweise $w(0) = 0$. Anschließend steigt die Kurve annähernd linear an bis zum Zeitpunkt, bei dem die Grenzen des Systems erreicht werden und $w(t)$ daher nicht weiter anwachsen kann. Des Weiteren sind bei $t = 2 \dots 3$ leichte Knicke in den Kurven zu erkennen, die offensichtlich nach Abklingen des Initialisierungsspeaks den Beginn des physikalisch relevanten Bereiches markieren. Da man diesen Zeitpunkt allerdings in dieser Darstellung nicht eindeutig bestimmen kann und aufgrund der Tatsache, dass die Kurve in etwa linear verläuft, bietet es sich an zunächst die Ableitung $w'(t)$, siehe Abb. 5.6, zu betrachten. Hier ist sehr deutlich ein näherungsweise konstantes Plateau (orangefarbener Bereich) zu erkennen, dessen Grenzen den interessanten Bereich markieren. Für größere t fällt $w'(t)$ von der ersten Berührung des Randes bis zur völligen Ausfüllung des Gitters bis auf Null ab und osziliert anschließend wie auch $w(t)$ selbst.

Ein nichtlinearer Fit im Bereich $4 \leq t \leq 30$ (in Abb. 5.5 orange markiert) liefert für die vier lokalen Umgebungen folgende Ergebnisse:

$$\begin{aligned} \beta_{111} &= 0,925 \quad (\text{blau}) , \\ \beta_{112} &= 0,933 \quad (\text{grün}) , \\ \beta_{122} &= 0,932 \quad (\text{rot}) , \\ \beta_{022} &= 0,930 \quad (\text{gelb}) . \end{aligned}$$

Auch hier zeigen sich wieder Werte nahe Eins, d.h. die Diffusion vollzieht sich nahezu ballistisch. Ebenfalls weist der Gitterpunkt mit nur drei nächsten Nachbarn einen leicht darunter liegenden Exponenten β , verursacht durch die etwas unregelmäßige Nächste-Nachbar-Umgebung, auf.

5.4 Der dreidimensionale Fall

Analog zum zweidimensionalen Rauzy-Tiling sind hier die Ergebnisse für die zeitliche Autokorrelationsfunktion (Abb. 5.10) und das mittlere Abstandsquadat (Abb. 5.8) des dreidimensionalen Rauzy-Tilings in 15. Ordnung mit 20569 Gitterpunkten dargelegt. Hierbei wurde wieder zwischen den lokalen Umgebungen, welche nochmals in Abb. 5.7 dargestellt sind, unterschieden. Die Ergebnisse sind allerdings mit geringerer Genauigkeit zu betrachten, da nur zirka 27 Gitterpunkte pro Raumrichtung vorhanden sind, während es in zwei Dimensionen etwa 139 Gitterpunkte sind. Bei der in Abb. 5.10 dargestellten zeitlichen Autokorrelationsfunktion fällt dies nicht so stark ins Gewicht, da der Einfluss der periodischen Randbedingungen durch die geringen Amplituden der vom Initialisierungspunkt

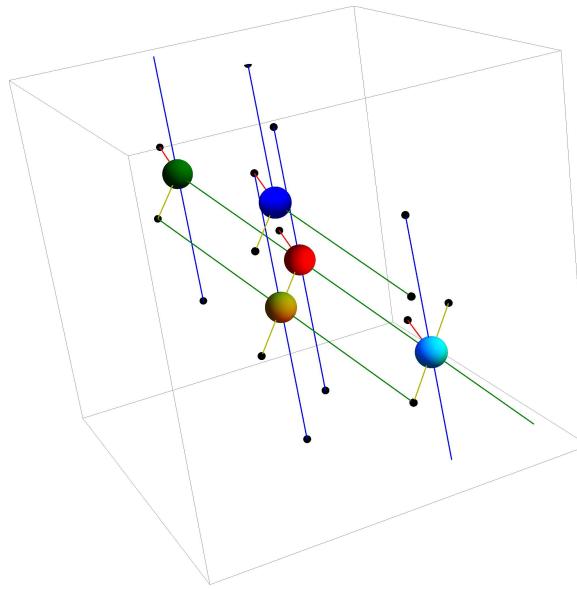


Abb. 5.7: Die fünf verschiedenen lokalen Umgebungen des 3D-Systems: \mathcal{P}_{1111} blau, \mathcal{P}_{1112} grün, \mathcal{P}_{1122} rot, \mathcal{P}_{1222} cyan, \mathcal{P}_{0222} gelb

weit entfernten Gebiete nur sehr schwach ist. Die Ableitung des mittleren Abstandsquadrates in Abb. 5.9 hingegen zeigt, dass das Plateau, welches den physikalisch relevanten Bereich angibt, nur schwach ausgebildet ist und man keine klaren Grenzen erkennen kann. Das Gebiet, über dem der nichtlineare Fit nach Gl. (5.7) und Gl. (5.9) durchgeführt wurde, ist mit $1 \leq t \leq 2$ entsprechend klein. Für die Exponenten ergibt sich

$$\begin{array}{ll} \delta_{1111} = 0,991 & \beta_{1111} = 1,031 \text{ (blau)} , \\ \delta_{1112} = 0,997 & \beta_{1112} = 0,946 \text{ (grün)} , \\ \delta_{1122} = 0,996 & \beta_{1122} = 0,913 \text{ (rot)} , \\ \delta_{1222} = 0,999 & \beta_{1222} = 0,959 \text{ (cyan)} , \\ \delta_{0222} = 0,993 & \beta_{0222} = 0,928 \text{ (gelb)} . \end{array}$$

Da $\beta_{1111} > 1$ berechnet wurde, ist für die Exponenten des mittleren Abstandsquadrates ein Fehler von mindestens 0,04 anzunehmen. Die Werte weisen auf ballistischen Transport hin, sind jedoch nicht eindeutig. Die besseren Ergebnisse liefert hier die Autokorrelationsfunktion. Sämtliche Werte liegen bei weniger als 1% Abweichung von Eins, sodass daher ein ballistischer Transport wahrscheinlich ist. Wie auch im zweidimensionalen Rauzy-Tiling wird ebenfalls ein absolut kontinuierliches Spektrum (vgl. Abb. 4.2) bestätigt. Der Wert des blau markierten Gitterpunktes mit nur vier nächsten Nachbarn liegt wieder etwas darunter, allerdings ist die Abweichung hier wesentlich geringer. Somit bestätigt sich die auch in Kapitel 4.3 angedeutete Tatsache, dass der Skalenexponent mit größer werdender Dimension größer und das Diffusionsverhalten zunehmend ballistisch wird [24].

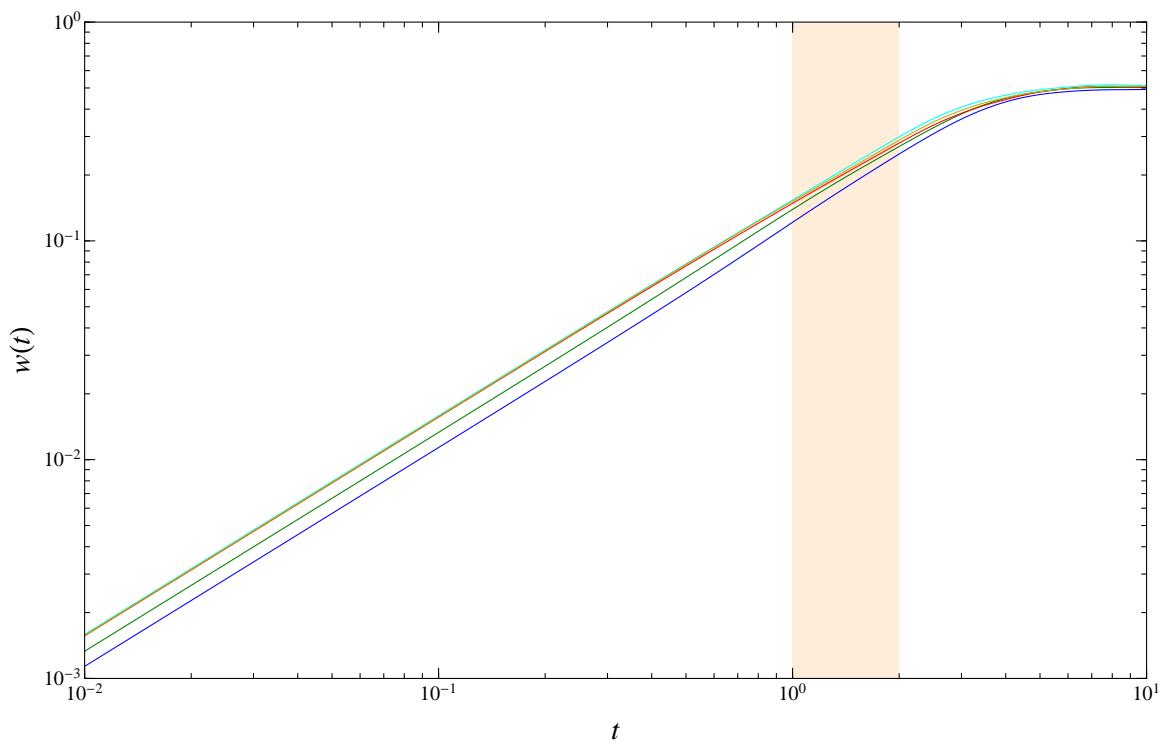


Abb. 5.8: Mittleres Abstandsquadrat des 3D-Systems (15. Ordnung; 20 569 Gitterpunkte) für die fünf verschiedenen lokalen Umgebungen und physikalisch relevanter Bereich (orange)

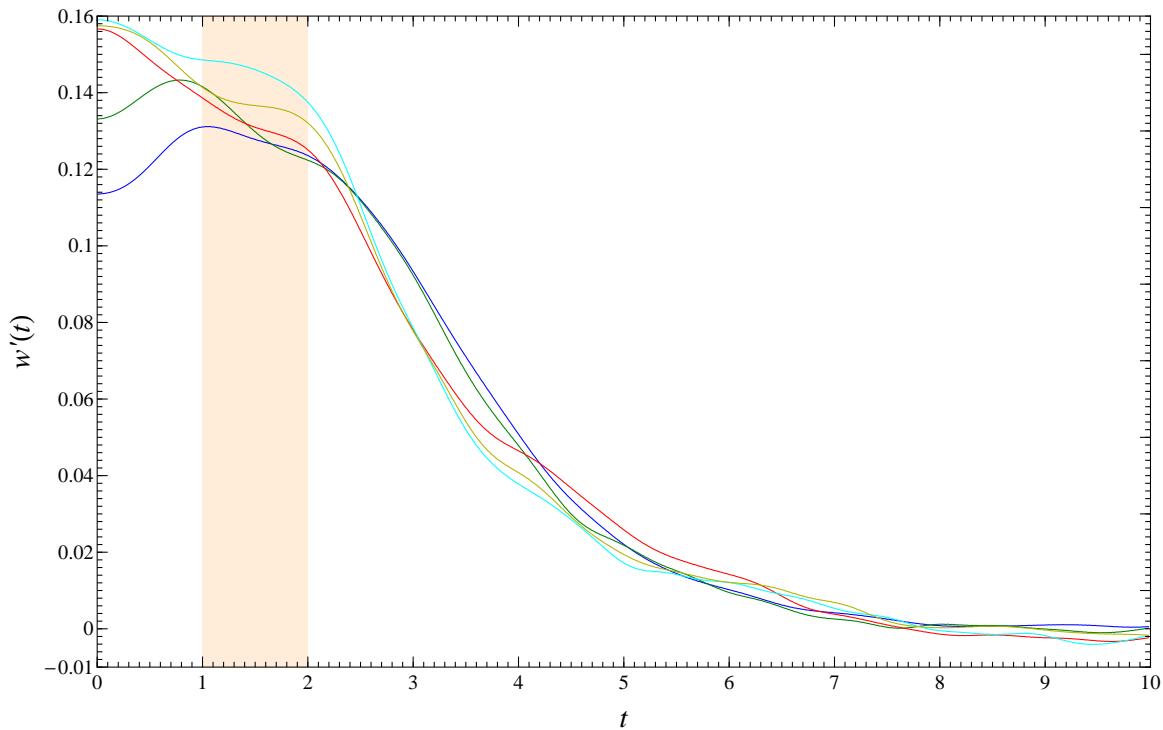


Abb. 5.9: Ableitung des mittleren Abstandsquadrates des 3D-Systems (15. Ordnung; 20 569 Gitterpunkte) für die fünf verschiedenen lokalen Umgebungen und physikalisch relevanter Bereich (orange)

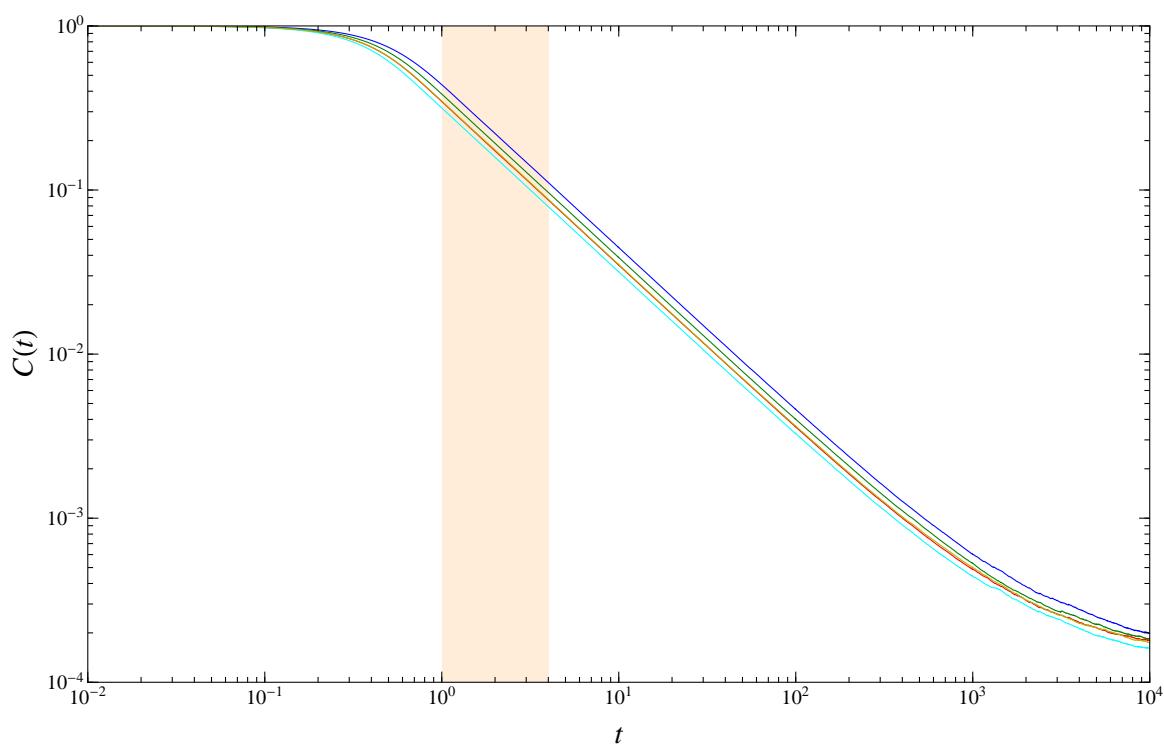


Abb. 5.10: Autokorrelationsfunktion des 3D-Systems (15. Ordnung; 20 569 Gitterpunkte) für die fünf verschiedenen lokalen Umgebungen und physikalisch relevanter Bereich (orange)

6 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden das zwei- und dreidimensionale Rauzy-Tiling, bei denen es sich um quasiperiodische Gitter handelt, untersucht. Die quantenmechanische Beschreibung mikroskopischer Teilchen geschah mit dem Modell starker Bindung ohne Wechselwirkung mit dem Gitter. Die Übergangsmatrixelemente wurden für nächste Nachbarn als konstant angenommen und Null gesetzt für nicht benachbarte Gitterpunkte.

Als erstes wurde die Berechnung der Gitterpunktkoordinaten durch das Projektionsverfahren erläutert, indem der eindimensionale Fall, die Fibonacci-Projektion, mathematisiert und anschließend auf beliebige Dimensionen verallgemeinert wurde. Durch die natürliche Nummerierung mittels eines erzeugenden Vektors erhielt man eine einfache Vorschrift für das Aufstellen der Verbindungsmaatrix, welche die Nächste-Nachbar-Verknüpfungen beschreibt und bedingt durch die Definition des Hamilton-Operators mit dem Modell starker Bindung die System-Geometrie mit den quantenmechanischen Eigenschaften verknüpft. Die Darstellungen des zwei- und dreidimensionalen Gitters veranschaulichten die Parkettierung mit den verschiedenen Nächste-Nachbar-Verknüpfungen und den lokalen Umgebungen.

Als nächstes wurde die stationäre Lösung des Schrödinger-Gleichung, welche durch bereits vorhandene Fortran-Routinen berechnet wurde, dargestellt. Die Zustandsdichte wies eine zackige Struktur auf, die auf die Quasiperiodizität zurückzuführen ist. Das zweidimensionale Rauzy-Tiling zeigte hierbei in Umgebung der Bandmitte große Peaks und einen abrupten Abbruch an der Bandkante. Das dreidimensionale Rauzy-Tiling zeigte einen ähnlichen Verlauf wie das eines periodischen Gitters. Die Partizipationsrate lieferte eine einfache Möglichkeit, die Ausgedehntheit der Eigenzustände, welche von näherungsweise periodischen bis zu auf kleinere Gebiete lokalisierte Funktionen variieren, zu charakterisieren. Als weiteres Maß für die Ausgedehntheit wurde der Skalenexponent berechnet, welcher für das 2D-System einen kleineren Wert lieferte als für das 3D-System und somit bestätigt wurde, dass mit abnehmender Dimension die Zustände stärker lokalisiert sind.

Im letzten Teil wurden dynamische Eigenschaften anhand des Zeitverhaltens eines deltaförmigen Wellenpaketes untersucht. Es wurden die zeitliche Autokorrelationsfunktion und das mittlere Abstandsquadrat berechnet und analog zur Partizipationszahl mit einem Potenzgesetz beschrieben. Die Skalenexponenten zeigten hierbei, dass das Energiespektrum nah am absolut kontinuierlichen Fall liegt und die Ausbreitung von Mikroteilchen nahezu ballistisch vollzogen wird. Hierbei wurde zwischen den lokalen Umgebungen als Initialisierungspunkt des Wellenpaketes unterschieden und es war erkennbar, dass derjenige Gitterpunkt, welcher die wenigen Verknüpfungen aufweist, eine verzögerte Ausbreitung des Wellenpaketes zeigt.

Viele der Resultate, wie die Ähnlichkeit der Zustandsdichte mit der des periodischen Gitters, das nahezu absolut kontinuierliche Energiespektrum und der annähernd ballistische Transport zeigen, dass es sich bei den Rauzy-Tilings, vor allem in drei Dimensionen, um schwach quasiperiodische Gitter handelt, d.h. das diese, beispielsweise im Gegensatz zum Penrose-Tiling, nah am periodischen Fall liegen.

Ein weiterer Ansatz besteht zum Beispiel in der energieabhängigen Berechnung der Skalenexponenten. Es ist zu vermuten, dass diese in der Bandmitte geringer sind als an den Bandkanten. Die hier durchgeführten Berechnungen konnten dazu allerdings keine Ergebnisse liefern. Die Beschränkung der Systemgröße liefert bei den Berechnungen stets eine Limitierung der Genauigkeit. Auch bei der Dynamik im dreidimensionalen Rauzy-Tiling war der interessante Bereich sehr klein. Die Berechnung größerer Systeme ist daher wünschenswert. Die Routine Jadamilu wurde hierbei nicht ausgereizt und bietet somit noch Potential nach oben.

Anhang

Beweis A

Behauptung: $F_{-k} = (-1)^k F_{k-2}$ für die Fibonacci-Folge aus Gl. (3.2).

Induktionsanfang: Die Behauptung ist erfüllt für $k = 2$ und $k = 3$:

$$\begin{aligned}F_1 &= 1 \\F_0 &= 1 \\F_{-1} &= F_1 - F_0 = 1 - 1 = 0 \\F_{-2} &= F_0 - F_{-1} = 1 - 0 = 1 = F_0 \\F_{-3} &= F_{-1} - F_{-2} = 0 - 1 = -1 = -F_1\end{aligned}$$

Induktionsbeweis: Es gelte $F_{-(k-1)} = (-1)^{k-1} F_{(k-1)-2}$ und $F_{-k} = (-1)^k F_{k-2}$.

$$\begin{aligned}F_{-(k+1)} &= F_{-k-1} = F_{-k+1} - F_{-k} = F_{-(k-1)} - F_{-k} \stackrel{!}{=} (-1)^{k-1} F_{(k-1)-2} - (-1)^k F_{k-2} \\&= (-1)^{k+1} (F_{k-3} + F_{k-2}) = (-1)^{k+1} F_{(k+1)-2}\end{aligned}$$

$$\Rightarrow F_{-k} = (-1)^k F_{k-2} \quad \forall k \quad \square$$

Beweis B

Behauptung: $\left| \vec{A}_k^\perp \right| = \left| \vec{A}_k^{\parallel} \right|$ für die Fibonacci-Folge Gl. (3.2).

Beweis:

$$\begin{aligned}\left| \vec{A}_k^\perp \right|^2 &= F_k^2 + F_{k-1}^2 \\ \left| \vec{A}_k^{\parallel} \right|^2 &= F_{-k-1}^2 + F_{-k-2}^2 \stackrel{A}{=} \left((-1)^{k+1} F_{k-1} \right)^2 + \left((-1)^{k+2} F_k \right)^2 = F_k^2 + F_{k-1}^2 \\ \Rightarrow \left| \vec{A}_k^\perp \right| &= \left| \vec{A}_k^{\parallel} \right| \quad \forall k \quad \square\end{aligned}$$

Abbildungsverzeichnis

Abb. 1.1 Quasiperiodische Parkettierungen	5
Abb. 1.2 Beugungsbild von AlMn-Quasikristallen	5
Abb. 1.3 Quasikristalline Aluminium-Kupfer-Legierung	5
Abb. 1.4 Quasikristalline Probe und Beugungsbilder	6
Abb. 1.5 Quasiferromagnetismus	6
Abb. 3.1 Fibonacci-Projektion	11
Abb. 3.2 Projektionsschema und Nummerierung bei 4. Ordnung	12
Abb. 3.3 Projektion der \mathcal{S} -Einheitszelle in zwei Dimensionen	16
Abb. 3.4 Projektion der \mathcal{S} -Einheitszelle in drei Dimensionen	16
Abb. 3.5 Projektion der \mathcal{S}_{11} -Einheitszelle in drei Dimensionen (Ausschnitt)	17
Abb. 3.6 Drei Richtungen im zweidimensionalen Gitter	18
Abb. 3.7 Die vier verschiedenen lokalen Umgebungen des 2D-Systems	20
Abb. 3.8 Die fünf verschiedenen lokalen Umgebungen des 3D-Systems	20
Abb. 4.1 Normierte Zustandsdichte des 2D-Systems	22
Abb. 4.2 Normierte Zustandsdichte des 3D-Systems	22
Abb. 4.3 Partizipationsrate des 2D-Systems	24
Abb. 4.4 Partizipationsrate des 3D-Systems	24
Abb. 4.5 Mittlere Partizipationsrate des 2D-Systems	24
Abb. 4.6 Mittlere Partizipationsrate des 3D-Systems	24
Abb. 4.7 Mittlere Partizipationszahl des 2D- und 3D-Systems in Abhangigkeit der Systemgroe	26
Abb. 4.8 Aufenthaltswahrscheinlichkeit $ \psi ^2$ der Eigenzustande zu verschiede- nen Energien E des 2D-Systems	27
Abb. 4.9 Aufenthaltswahrscheinlichkeit $ \psi ^2$ der Eigenzustande zu verschiede- nen Energien E des 3D-Systems	28
Abb. 5.1 Zeitliche Entwicklung eines deltaformigen Wellenpaketes $ \Phi(t) ^2$ im 2D- System	30
Abb. 5.2 Aufenthaltswahrscheinlichkeit $ \Phi(t) ^2$ am Initialisierungspunkt j	30
Abb. 5.3 Die vier verschiedenen lokalen Umgebungen des 2D-Systems	31
Abb. 5.4 Autokorrelationsfunktion des 2D-Systems	32
Abb. 5.5 Mittleres Abstandsquadrat des 2D-Systems	34
Abb. 5.6 Ableitung des mittleren Abstandsquadrates des 2D-Systems	34
Abb. 5.7 Die funf verschiedenen lokalen Umgebungen des 3D-Systems	36
Abb. 5.8 Mittleres Abstandsquadrat des 3D-Systems	37
Abb. 5.9 Ableitung des mittleren Abstandsquadrates des 3D-Systems	37
Abb. 5.10 Autokorrelationsfunktion des 3D-Systems	38

Literaturverzeichnis

- [1] R. PENROSE: *The role of aesthetics in pure and applied mathematical research*, Bulletin of the Institute of Mathematics and its Applications 10, Nr. 718, S. 266 (1974).
- [2] P. REPETOWICZ, U. GRIMM und M. SCHREIBER: *Exact eigenstates of tight-binding Hamiltonians on the Penrose tiling*, Physical Review B 58, Nr. 20, S. 13482 (1998),
http://prb.aps.org/pdf/PRB/v58/i20/p13482_1.
- [3] B. PASSARO, C. SIRE und V. G. BENZA: *Anomalous diffusion and conductivity in octagonal tiling models*, Physical Review B 46, Nr. 21, S. 13751 (1992),
http://prb.aps.org/pdf/PRB/v46/i21/p13751_1.
- [4] J. E. S. SOCOLAR: *Simple octagonal and dodecagonal quasicrystals*, Physical Review B 39, Nr. 15, S. 10519 (1989),
http://prb.aps.org/pdf/PRB/v39/i15/p10519_1.
- [5] Bilder quasiperiodischer Parkettierungen,
<http://www.itap.physik.uni-stuttgart.de/~gaehler/tilings/>.
- [6] D. SHECHTMAN, I. BLECH, D. GRATIAS und J. W. CAHN: *Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry*, Physical Review Letters 53, Nr. 20, S. 1951 (1984),
http://prl.aps.org/pdf/PRL/v53/i20/p1951_1.
- [7] Mikroskopische Aufnahme einer Aluminium-Kupfer-Legierung,
<http://www.egoproject.nl/star/Nbr%203341.gif>.
- [8] A. LEDERMANN, L. CADEMARTIRI, M. HERMATSCHWEILER, C. TONINELLI, G. A. OZIN, D. S. WIERSMA, M. WEGENER und G. VON FREYMANN: *Three-dimensional silicon inverse photonic quasicrystals for infrared wavelengths*, Nature Materials 5, Nr. 12, S. 942 (2006),
<http://www.nature.com/nmat/journal/v5/n12/pdf/nmat1786.pdf>.
- [9] E. Y. VEDMEDENKO, H. P. OEPEN und J. KIRSCHNER: *Decagonal quasiferromagnetic microstructure on the Penrose tiling*, Physical Review Letters 90, Nr. 13, S. 137203 (2003),
<http://prl.aps.org/pdf/PRL/v90/i13/e137203>.
- [10] R. MCGRATH, U. GRIMM und R. DIEHL: *The forbidden beauty of quasicrystals*, Physics World, Dezember 2004, S. 23.
<http://www.physicsworldarchive.iop.org/pdf?site=pwa&bkdir=17/12&pdf=phwv17i12a29&pdfhash=028B786A47E8FDEA1EDE1FD6662E5814&doctime=Thu%2C%2001%20Sep%202011%2009%3A21%3A18%20GMT>.
- [11] W. VOGT: *Grundlagen zur Numerik partieller Differenzialgleichungen* (2006),
<http://wcms1.rz.tu-ilmenau.de/fakmn/fileadmin/template/ifm/user/Vogt/Preprints/preprint.pdf>.
- [12] S. DATTA: *Fundamentals of nanoelectronics - lecture 10 & 11: finite difference method* (2004),
<http://nanohub.org/resources/644/download/2004.09.17-110-ece453.pdf>,
<http://nanohub.org/resources/646/download/2004.09.20-111-ece453.pdf>.

- [13] K. STREHMEL und R. WEINER: *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*, S. 26-36, Teubner Studienbücher, 1995.
- [14] WIKIPEDIA: *Tight binding* (24.07.2011, 13:51),
http://en.wikipedia.org/wiki/Tight_binding.
- [15] D. L. MASLOV: *Intro to solid state physics - tight-binding model*,
http://www.phys.ufl.edu/~maslov/phy4905/tbm_notes.pdf.
- [16] J. VIDAL und R. MOSSERI: *Generalized quasiperiodic Rauzy tilings*, Journal of Physics A: Mathematical and General 34, Nr. 18, S. 3927 (2001),
<http://stacks.iop.org/0305-4470/34/i=18/a=317>.
- [17] M. DUNEAU und A. KATZ: *Quasiperiodic patterns*, Physical Review Letters 54, Nr. 25, S. 2688 (1985),
http://prl.aps.org/pdf/PRL/v54/i25/p2688_1.
- [18] UNIVERSITY OF TENNESSEE, UNIVERSITY OF CALIFORNIA BERKELEY, UNIVERSITY OF COLORADO DENVER, NUMERICAL ALGORITHMS GROUP (NAG): *LAPACK - linear algebra package*,
<http://www.netlib.org/lapack/>.
- [19] M. BOLLHÖFER und Y. NOTAY: *User's guide to JADAMILU - FORTRAN routines to solve symmetric/hermitian (generalized) eigenvalue problems*, 2008.
- [20] F. M. C. TRIOZON, J. VIDAL, R. MOSSERI und D. MAYOU: *Quantum dynamics in two- and three-dimensional quasiperiodic tilings*, Physical Review B 65, Nr. 22, S. 220202 (2002),
<http://prb.aps.org/pdf/PRB/v65/i22/e220202>.
- [21] A. JAGANNATHAN und F. PIÉCHON: *Energy levels and their correlations in quasicrystals*, Philosophical Magazine 87, Nr. 16, S. 2389 (2007),
<http://www.tandfonline.com/doi/pdf/10.1080/14786430701196990>.
- [22] G. T. DE LAISSARDIÈRE: *Spiky density of states in large complex Al-Mn phases*, Zeitschrift für Kristallographie 224, Nr. 1, S. 123 (2008),
<http://www.oldenbourg-link.com/doi/pdf/10.1524/zkri.2009.1092>.
- [23] H.-R. TREBIN (Editor): *Quasicrystals - structure and physical properties*, S. 209-235, WILEY-VCH, 2003.
- [24] A. JAGANNATHAN: *Less singular quasicrystals: the case of low codimensions*, Physical Review B 64, Nr. 14, S. 140201 (2001),
<http://prb.aps.org/pdf/PRB/v64/i14/e140201>.
- [25] P. ARNOUX und S. ITO: *Pisot substitutions and Rauzy fractals*, Bulletin of the Belgian Mathematical Society 8, S. 181 (2001),
http://projecteuclid.org/DPubS/Repository/1.0/Disseminate?view=body&id=pdf_1&handle=euclid.bbms/1102714169.
- [26] R. KETZMERICK, G. PETSCHEL und T. GEISEL: *Slow decay of temporal correlations in quantum systems with Cantor spectra*, Physical Review Letters 69, Nr. 5, S. 695 (1992),
http://prl.aps.org/pdf/PRL/v69/i5/p695_1.
- [27] WIKIPEDIA: *Diffusion* (18.08.2011, 16:17),
<http://de.wikipedia.org/wiki/Diffusion>.

- [28] J. KOLLER, C. THÄLE und F. YERLY, *Der Wiener-Prozess* (2008),
<http://homeweb4.unifr.ch/thaelec/pub/wp.pdf>.
- [29] H. SCHULZ-BALDES und J. BELLISSARD: *Anomalous transport: a mathematical framework*, Reviews in Mathematical Physics 10, Nr. 1, S. 1 (1998),
http://arxiv.org/PS_cache/cond-mat/pdf/9706/9706239v1.pdf.

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt, nicht anderweitig zu Prüfungszwecken vorgelegt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe. Sämtliche wissentlich verwendeten Textausschnitte, Zitate oder Inhalte anderer Verfasser wurden ausdrücklich als solche gekennzeichnet.

Chemnitz, den 6. September 2011

Fabian Teichert