

Numerische Simulation des Transports in ungeordneten Vielelektronensystemen

von der Fakultät für Naturwissenschaften

der Technischen Universität Chemnitz
genehmigte
Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
„Doktor der Naturwissenschaften“
Dr. rer. nat.

vorgelegt

von Diplomphysiker Frank Epperlein,
geboren am 05.10.1966 in Annaberg-Buchholz
eingereicht am 31.03.1999

Gutachter: Prof. Dr. rer .nat. habil. Michael Schreiber
Prof. Dr. rer .nat. habil. Heinrich Solbrig
Privatdozent Dr. rer .nat. habil. Walter Schirmacher

Tag der Verteidigung: 05.07.1999

Bibliographische Beschreibung

Frank Epperlein: „Numerische Simulation des Transports in ungeordneten Vielelektronensystemen“,
 Dissertation an der Fakultät für Naturwissenschaften der Technischen Universität Chemnitz,
 153 Seiten, 71 Abbildungen, 1 Tabelle

Referat

Inhalt dieser Arbeit ist die Untersuchung der Physik des ungeordneten wechselwirkenden Elektronenproblems auf der isolierenden Seite des Metall-Isolator-Übergangs mit verschiedenen Methoden. Als Modellsystem dient dabei ein verallgemeinertes Coulomb-Glas-Modell mit Transfermatrixelementen zwischen verschiedenen Plätzen, das Quanten-Coulomb-Glas. Ziel ist, herauszufinden, wie sich die Elektron-Elektron-Wechselwirkung auf die Lokalisierungs- und Transporteigenschaften des Modells auswirkt.

Im ersten Teil wird das Quanten-Coulomb-Glas in Hartree-Fock-Näherung behandelt. Da diese Näherung eine effektive Einteilchentheorie ist, können die Lokalisierungs- und Transporteigenschaften mit denselben Methoden wie beim Anderson-Modell der Lokalisierung untersucht werden. Es erweist sich, daß die Wechselwirkung im Rahmen einer Einteilchen-Näherung immer zu einer stärkeren Lokalisierung der Zustände an der Fermienergie und damit zu einer Verschlechterung des Transports im Vergleich zum nichtwechselwirkenden System führt. Mit Hilfe verschiedener Argumentationen im Einteilchenbild läßt sich dieses Ergebnis auch gut physikalisch verstehen.

Im zweiten Teil steht die Frage nach der Gültigkeit der Hartree-Fock-Näherung für das Quanten-Coulomb-Glas im Mittelpunkt. Dazu werden die Hartree-Fock-Resultate mit Ergebnissen aus der exakten Diagonalisierung sehr kleiner Gitter verglichen. Es werden Lokalisierungskriterien entwickelt, die einen direkten Vergleich mit den Einteilchenlokalisierungsmaßen gestatten. Zur Beurteilung der Transporteigenschaften dient der Gleichstromleitwert nach dem Kubo-Greenwood-Formalismus. Es zeigt sich, daß die Hartree-Fock-Näherung den Transport unterschätzt und daß die Wechselwirkung im Vergleich zum nichtwechselwirkenden System bei schwacher Unordnung eine Verringerung des Transports und bei großer Unordnung eine Erhöhung des Transports bewirkt.

In dritten Teil werden Idee und Realisierung einer neuen Näherung, der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung, diskutiert. Überlegungen und Untersuchungen zur Konvergenz von Grundzustandsenergie, Energie der angeregten Zustände, Einteilchenzustandsdichte, Rückkehrwahrscheinlichkeit und Leitwert werden vorgenommen. Ergebnisse für zweidimensionale Systeme mit 12, 16 und 25 Gitterplätzen bei Halbfüllung werden vorgestellt. Außerdem erfolgen Untersuchungen mit verschiedenen Wechselwirkungsstärken für ein-, zwei und dreidimensionale Systeme mit 25×1 , 5×5 und $3 \times 3 \times 3$ Gitterplätzen. Die Resultate aus dem zweiten Teil bestätigen sich: Für genügend starke Unordnung induziert Wechselwirkung immer eine stärkere Delokalisierung, für genügend kleine Unordnung immer eine stärkere Lokalisierung.

Schlagwörter

Anderson-Modell, exakte Diagonalisierung, Coulomb-Glas, Coulomb-Wechselwirkung, Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung, Hartree-Fock-Näherung, Leitwert, Lokalisierung, Metall-Isolator-Übergang, Quanten-Coulomb-Glas, Unordnung

Inhaltsverzeichnis

1	Elektronen, Unordnung und Wechselwirkung	7
1.1	Einleitung	7
1.2	Experimentelle Systeme, in denen Wechselwirkungs- und Unordnungseffekte wichtig sind	9
1.3	Bisherige Ergebnisse: Modelle und Methoden	13
1.4	Bisherige Ergebnisse: Experimente	24
1.5	Was soll diese Arbeit leisten?	25
2	Quanten-Coulomb-Glas in Hartree-Fock-Näherung	27
2.1	Grundidee der Hartree-Fock-Näherung	27
2.2	Hartree-Fock-Verfahren für das Quanten-Coulomb-Glas	29
2.3	Die Grenzfälle $t/U \rightarrow \infty$ und $t \rightarrow 0$	32
2.4	Untersuchte Systeme und numerische Probleme	33
2.5	Ergebnisse: Einteilchenzustandsdichte	36
2.6	Ergebnisse: Lokalisierungseigenschaften	41
2.7	Leitwerte	50
2.8	Wie gut ist die Hartree-Fock-Näherung?	52
3	Quanten-Coulomb-Glas – Hartree-Fock-Näherung und exakte Lösung für kleine Gitter; ein Vergleich	55
3.1	Einführung: Hartree-Fock-Näherung und die exakte Lösung	55
3.2	Die exakte Lösung	59
3.3	Exakte Lösung: Einteilchenzustandsdichte	60
3.4	Exakte Lösung: Lokalisierungseigenschaften	62
3.5	Exakte Lösung: Leitwerte	71
3.6	Zusammenfassung: Wie gut beschreibt die Hartree-Fock-Näherung Zustände und Energien?	74
4	Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung	79
4.1	Das Verfahren der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung	79
4.2	Konvergenz physikalischer Größen mit wachsender Basisgröße B	83
4.3	Technische Details	86
4.4	Vergleich exakte Lösung – Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung	90
4.5	Test der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung für $g = 25$	99
4.6	Erste Nutzrechnungen und Ausblick	102

Zusammenfassung	107
Anhang 1: Physikalische Größen	109
A Einteilchenzustandsdichte	109
B Rückkehrwahrscheinlichkeit	113
C Leitwert	116
Anhang 2: Hartree-Fock basierte Diagonalisierung; Ablaufplan	123
Literaturverzeichnis	131
Verzeichnis der Abbildungen und Tabellen	139
Verzeichnis der Formelzeichen und Abkürzungen	143
Dank	147
Erklärung	149
Thesen zur Dissertation	151
Tabellarischer Lebenslauf	153

1. Elektronen, Unordnung und Wechselwirkung

1.1 Einleitung

Das traditionelle Konzept der Festkörperphysik ist der Kristall mit perfekter Ordnung. Betrachtet man das Kristallgitter als unabhängig von den Elektronen, die sich im Kristall bewegen können, so kann man seinen Einfluß auf die Bewegung der Elektronen durch ein periodisches Hintergrundpotential beschreiben. Die Periodizität dieses Potentials erleichtert die Lösung des Eigenwertproblems der Elektronen, die sich in diesem Kristallpotential bewegen, sehr stark.

Wenn außerdem die Elektronen noch als nichtwechselwirkende Teilchen angenommen werden, so reicht es, ein Einteilchenproblem zu lösen; alle physikalischen Größen können durch Aufsummierung von Einteilcheneffekten gewonnen werden.

Für dieses Einteilchenproblem im periodischen Potential gilt das sogenannte Blochsche Theorem [B29, W31]: Die Wellenfunktion für den gesamten Kristall kann durch das Produkt eines Phasenfaktors und der Lösung der Bloch-Gleichung in der Elementarzelle des Gitters dargestellt werden. Aus den Lösungen in der Elementarzelle werden jetzt Einteilchenzustände, die über den ganzen Kristall ausgedehnt sind, und die diskreten Energieeigenwerte verschmelzen zu Energiebändern mit verbotenen Zonen dazwischen. Die Elektronen in einem solchen periodischen Potential können genau wie freie Elektronen beschrieben werden, nur daß ihre Dispersionsrelation jetzt eine andere ist, was für Energien nicht zu weit entfernt von den Bandkanten zum Konzept einer effektiven Masse geführt hat.

Da alle Einteilchenzustände im gesamten Kristall ausgedehnt sind, bestimmt allein die Bandfüllung, ob ein Material ein elektrischer Leiter oder ein Isolator ist: Haben wir leere oder gefüllte Bänder, so sind keine niederenergetischen Anregungen möglich, und das Material ist ein Isolator. Haben wir teilweise gefüllte Bänder, so sind niederenergetische Anregungen möglich, und das Material ist ein Leiter. Sind einmal Anregungen möglich, so ist, da alle Zustände über den gesamten Kristall ausgedehnt sind, der Transport widerstandslos.

Wie kann man dann in diesem Bild das Phänomen des elektrischen Widerstandes, insbesondere bei $T = 0$, erklären, ohne die näherungsweise Gültigkeit des Bloch-Theorem zu verlieren? Widerstand bedeutet dann, daß die Blochwellen gestreut werden müssen, also eine endliche Lebensdauer bekommen. Bei $T = 0$ kann das nur eine Streuung an Störstellen im periodischen Kristallpotential sein. Wenn die Störstellen nicht so häufig sind, daß sie die Wellenfunktion der Elektronen wesentlich ändern, kann der Transport durch eine Boltzmann-Gleichung für die Elektronen mit effektiver Masse beschrieben werden.

(Bei $T > 0$ kommt die Streuung der Elektronen an den Quanten der Schwingungen des Kristallgitters dazu, den Phononen.)

Ein Metall-Isolator-Übergang (metal-insulator transition, MIT) ergibt sich in diesem Modell nur durch Änderung der Bandfüllung.

Was aber passiert, wenn die Unordnung in Form von Störungen des periodischen Kristallpotentials nicht mehr so klein ist, daß ihr Einfluß auf die Wellenfunktionen der Elektronen vernachlässigt werden kann? Das ist durchaus keine rein akademische Frage, gibt es doch eine Menge Substanzen, für die diese Annahme zutrifft: Legierungen, teilweise kompensierte Störstellenbänder in dotierten Halbleitern u.a., für die bei entsprechender Wahl der Parameter genau dies der Fall ist (s.u.). Die Konsequenzen eines solchen Zusammenbruchs des Bloch-Theorems durch eine im Verhältnis zum periodischen Gitterpotential nicht mehr vernachlässigbare Unordnung wurden bereits vor längerer Zeit untersucht. Selbst noch im Einteilchenbild gibt es neue und interessante Phänomene (siehe auch Abschnitt 1.3.): Wenn das Bloch-Theorem zusammenbricht, sind nicht mehr alle Zustände von vornherein über das ganze System ausgedehnt. Bei hinreichend starker Unordnung existieren stattdessen auch lokalisierte elektronische Zustände, die keinen Transport mehr erlauben. In einem Material können, abhängig von der räumlichen Dimension, gleichzeitig lokalisierte und delokalisierte elektronische Zustände vorliegen, die in verschiedenen Energiebereichen liegen. Sie sind durch eine bestimmte Energie voneinander getrennt (die „Beweglichkeitskante“) und erlauben einen neuen Mechanismus eines MIT: Wenn sich die Fermienergie aus dem Bereich der delokalisierten Zustände in den der lokalisierten Zustände verschiebt, kommt es zu einem unordnungsinduzierten MIT. Dieser unordnungsinduzierte MIT durch Verschieben der Fermienergie über die Beweglichkeitskante heißt „Anderson-MIT“ [A58, M66]¹.

Eine weitere Frage, die ebenfalls über den Horizont des Bloch-Bildes hinausweist, ist: Was passiert, wenn die Wechselwirkung der Elektronen untereinander nicht mehr vernachlässigbar ist? Das kann zum Beispiel der Fall sein in Systemen mit geringer Elektronendichte, wo die Wechselwirkungsenergie groß gegenüber der kinetischen Energie wird. Auch hier kommt es zu interessanten Effekten (siehe auch Abschnitt 1.3.): Ohne Unordnung sind zwar immer noch alle Zustände im System ausgedehnt, aber das Einteilchenbild bricht zusammen. Im Vielteilchenbild ändern sich sowohl Einteilchenzustandsdichte als auch die Zustandsdichten der Anregungen des Systems im Verhältnis zum Bloch-Bild. Insbesondere kann eine genügend starke Wechselwirkung der Elektronen untereinander bei tiefen Temperaturen zu einer Lücke („Mott-Lücke“) in der Zustandsdichte der für den elektronischen Transport relevanten Anregungen führen. Wenn die Fermienergie des Systems in eine solche Lücke geschoben wird, gibt es keine Anregungen mehr, die den Transport übernehmen können, und das System wird zum Isolator. Ein solcher durch die Coulomb-Wechselwirkung induzierter MIT heißt „Mott-Übergang“ [M49].

Das ist bis hierher etabliertes und abgesichertes physikalisches Terrain.

Was geschieht aber, wenn nun weder Unordnung noch Wechselwirkung vernachlässigt werden können? Dieser Fall ist kompliziert: Neben dem Effekt des wechselwirkungsinduzierten Mott-Übergangs durch die Entstehung der Mott-Lücke in den Anregungszustandsdichten auf Grund der Wechselwirkung sind bei geringerer Wechselwirkungsstärke noch mehrere weitere kontroverse Effekte vorstellbar, wie kurz angedeutet werden soll:

a) Durch die langreichweitige Wechselwirkung koppeln die Einteilchenzustände zu Vielteilchenzuständen. Der Zustand des Gesamtsystems ist nicht mehr durch das Produkt von Einteilchenzuständen darstellbar. In einer bestimmten energetischen Umgebung eines

¹Zur Übersicht siehe besonders [KM93]

Vielteilchen-Platz-Basiszustands gibt es nun viel mehr Vielteilchen-Platz-Basiszustände, als es Einteilchen-Platz-Basiszustände in der Umgebung eines bestimmten Einteilchen-Platz-Basiszustandes gibt. Folglich sollte es bei einer bestimmten kinetischen Energie im wechselwirkenden System nach der Diagonalisierung eine viel größere Hybridisierung von Platz-Basiszuständen geben als im Fall ohne Wechselwirkung, d.h., die Wechselwirkung sollte eine Delokalisierung im Fock-Raum zur Ortsbasis bewirken. Es ist nun nicht pauschal klar, wie sich diese Tendenz auf die Transporteigenschaften, d.h. auf den Grad der räumlichen Lokalisierung der für den Transport notwendigen Anregungen, auswirkt. Wenn eine starke Unordnung vorliegt, sollte diese Delokalisierung zu einer Verbesserung des Transports führen.

b) Andererseits könnte die Wechselwirkung wie bei der Mott-Lücke zu einer wechselwirkungsinduzierten Absenkung der Einteilchenzustandsdichte an der Fermienergie und damit zu einer verstärkten Anderson-Lokalisierung der für den Transport relevanten Zustände führen, da im Einteilchenbild in der Umgebung der Senke mit einer bestimmten kinetischen Energie weniger Zustände hybridisiert werden können. Eine verstärkte Einteilchen-Lokalisierung heißt aber eine Verschlechterung des Transports.

Diese naiven Argumentationen benutzen mehr das Vielteilchen- bzw. das Einteilchenbild und versuchen, die Wechselwirkung bzw. Unordnung auf verschiedene Weise zu berücksichtigen. Es ist nun pauschal überhaupt nicht klar, wann welches Bild eher angemessen ist und wann welcher Effekt eintreten wird – eine Verstärkung des Transports im Vergleich zum System ohne Wechselwirkung oder eine Abschwächung.

Die genauere Betrachtung stößt auf einige Hindernisse: Vielteilchensysteme mit Unordnung und Wechselwirkung gehören zu den komplexesten physikalischen Systemen überhaupt, da durch die Unordnung fast jede Art von Symmetrienausnutzung verwehrt ist.

Die gleichzeitige Betrachtung von Wechselwirkung und Unordnung eröffnet damit ein weites Feld reichhaltiger Physik, das trotz großer Anstrengungen (siehe Abschnitt 1.3) bisher noch bei weitem nicht richtig verstanden ist.

1.2 Experimentelle Systeme, in denen Wechselwirkungs- und Unordnungseffekte wichtig sind

Das Verhalten von Elektronen unter dem gleichzeitigen Einfluß von Unordnung und Wechselwirkung ist keineswegs nur ein interessantes theoretisches Problem. Es gibt einige Materialien, bei denen weder die Wechselwirkung noch die Unordnung vernachlässigt werden kann.

Die am besten untersuchten Systeme dieser Art sind teilweise kompensierte Störstellenbänder in Halbleitern. Von diesen Systemen stammen auch die meisten experimentellen Daten.

Ein Störstellenband (Abb. 1.1) ist ein mit Majoritätsstörstellen der Konzentration N und Minoritätsstörstellen der Konzentration KN dotierter Halbleiter, wobei $K(0 \leq K \leq 1)$ der Kompensationsgrad ist. Als Beispiel sei ein n-dotierter Halbleiter betrachtet:

Die Majoritätsstörstellen sind jetzt Donatoren der Konzentration N_D , die Minoritätsstörstellen sind Akzeptoren der Konzentration $N_A = KN_D$. Bei genügend tiefen Temperaturen sind alle Akzeptorniveaus besetzt, die verbleibenden Elektronen können sich auf den Donatorplätzen anordnen. Auf diesen Fall genügend tiefer Temperaturen wollen wir uns im weiteren beschränken:

Wichtige Größen für das physikalische Verhalten des Systems sind zunächst die Donorkonzentration N_D und der Lokalisierungsradius l der elektronischen Wellenfunktion

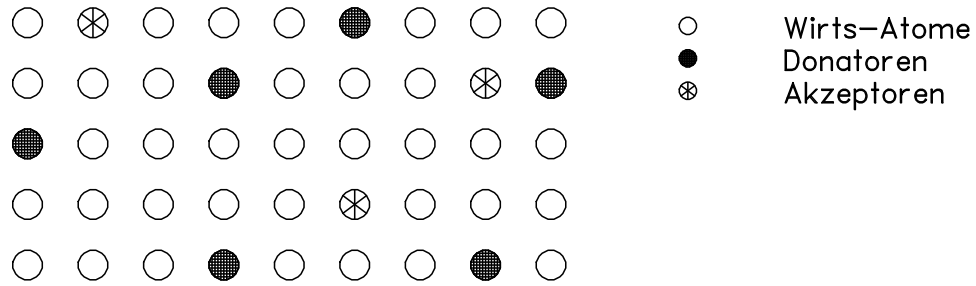


Abb. 1.1: Teilweise kompensiertes Störstellenband in einem Halbleiter

an einer einzelnen („nackten“) Störstelle, der vom dotierten Material und vom Halbleitermaterial abhängt und zusammen mit dem mittleren Abstand \bar{r} der Donatoren das Transferintegral t zwischen zwei Plätzen bestimmt, das ein Maß für die mittlere kinetische Energie der Elektronen ist. Zwischen diesen Größen besteht dabei eine Wechselbeziehung: Je höher der Dotierungsgrad, umso kleiner ist der mittlere Abstand zwischen den einzelnen Donatoratomen ², umso größer wird bei gleicher Lokalisierungslänge das Transferintegral zwischen zwei Plätzen, also die Möglichkeit der Hybridisierung. Wenn N_D also genügend klein ist und die mittleren Abstände zwischen den Donatoren dementsprechend groß sind, findet kaum eine Hybridisierung zwischen Elektronen auf verschiedenen Plätzen statt, und das System befindet sich im lokalisierten Bereich. Erreicht N_D die kritische Konzentration ³ N_c , tritt der MIT auf. Ein typischer Wert ⁴ für das Transferintegral ist

$$t = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m_{\text{eff}}} \left(\frac{N_D^{-1/3}}{l^2} \right)^2 \exp \left(-\frac{N_D^{-1/3}}{l} \right).$$

Eine weitere wichtige Energieskala im System ist die mittlere Coulomb-Energie. Bei der mittleren Coulomb-Energie muß man zwischen der Energie von Elektronen auf einem Donatorplatz und der Energie auf verschiedenen Plätzen unterscheiden. Die Energie auf verschiedenen Plätzen hängt über

$$U_{ik} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{e^2 \hat{n}_i \hat{n}_k}{r_{ik}}$$

mit dem Abstand r_{ik} zwischen den Plätzen zusammen, wobei ϵ_r die relative Dielektrizitätskonstante ist und \hat{n}_i, \hat{n}_k die Besetzungszahlen der Donatorplätze i und k sind. Ein

² $\bar{r} \approx N_D^{-1/3}$

³Für Si:As liegt z.B. die kritische Konzentration der As-Atome bei $8.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [SC86]. Nach dem Mott-Kriterium [PO85] gilt für die kritische Konzentration $N_c l^3 \approx 0.02$.

⁴Aus der Wellenfunktion

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} 2 \left(\frac{1}{l} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{r}{l} \right)$$

des Donatorelektrons der „nackten Störstelle“ mit dem Lokalisierungsradius l erhält man nach einiger Rechnung für das Transferintegral zwischen zwei Atomfunktionen

$$t = - \int dV \psi(|\mathbf{r}|) \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{1}{2m_{\text{eff}}} \nabla \cdot \nabla \psi(|\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}|) = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m_{\text{eff}}} \left(\frac{\bar{r}}{l^2} \right)^2 \exp \left(-\frac{\bar{r}}{l} \right).$$

typischer Wert ist damit

$$U = \frac{e^2 N_D^{1/3}}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}.$$

Die Wechselwirkungsenergie am selben Platz ist die Hubbard-Energie $U_{\text{Hubb}} = U\hat{n}_{i\downarrow}\hat{n}_{i\uparrow}$. Befindet man sich im Bereich starker Lokalisierung der elektronischen Wellenfunktion, ist die Hubbard-Energie so groß, daß Doppelbesetzung von Plätzen praktisch ausgeschlossen ist. Damit befinden sich alle Elektronen im sogenannten unteren Hubbard-Band.

Befindet man sich dagegen in der Nähe des MIT, so ist die Hubbard-Energie niedriger, und es hängt vom Hubbard-Parameter U ab, in welchem Maße Doppelbesetzungen vorliegen. (Der Parameter U wird vom dotierenden Material bestimmt, ist aber umso größer, je kleiner der Lokalisierungsradius l der elektronischen Wellenfunktion an einer „nackten“ Störstelle ist.)

Eine dritte wesentliche Energieskala ist die mittlere Schwankung des Unordnungspotentials ϕ .

Unordnung kommt im System in der zufälligen räumlichen Verteilung der Akzeptoren und der Donatoren vor. Diese zufälligen Verteilungen kann man über ein Unordnungspotential ϕ berücksichtigen, das aus der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Akzeptoren und Donatoren hervorgeht. Ein typischer Wert ist hier ebenfalls, solange wir uns auf das untere Hubbard-Band beschränken können, $W \sim \frac{e^2 N_D^{1/3}}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}$, womit klar ist, daß die Stärke der Coulomb-Effekte und die mittlere Schwankung des Unordnungspotentials in der Regel etwa von gleicher Größenordnung sind.

Wann werden Wechselwirkungs- und Unordnungseffekte wichtig?

Das ist eine Frage nach dem Verhältnis von Transferintegral, mittlerer Coulomb-Energie und der mittleren Schwankung des Unordnungspotentials.

Wir wissen bereits, daß die mittlere Coulomb-Energie und die mittlere Schwankung des Unordnungspotentials immer etwa von derselben Größenordnung sind, d.h., wenn Unordnungseffekte wichtig werden, werden im teilweise kompensierten Störstellenband auch Coulomb-Effekte wichtig.

Die Frage ist nun, unter welchen Bedingungen auch das mittlere Transferintegral einen größenordnungsmäßig ähnlichen Wert erreicht:

Das mittlere Transferintegral zwischen zwei Plätzen nimmt bei gleichem Lokalisierungsradius l der elektronischen Wellenfunktion an einer „nackten“ Störstelle exponentiell mit dem mittleren Abstand der Donatoren und damit auch exponentiell mit der Donatorkonzentration N_D ab.

Die mittlere Coulomb-Energie und die mittlere Schwankung des überlagerten Unordnungspotentials nehmen dagegen nur mit einer Potenzfunktion ab.

Bei sehr kleiner Konzentrationen an Störstellen ist die kinetische Energie der Elektronen daher immer vernachlässigbar, und nur Coulomb-Wechselwirkung und Unordnung spielen eine Rolle. Gleichzeitig genügt wegen der starken Lokalisierung die Betrachtung des unteren Hubbard-Bandes. Ein solches System kann deshalb rein klassisch beschrieben werden und wird als klassisches Störstellenband (classical impurity band, CIB) bezeichnet⁵. Der Hamilton-Operator ist in diesem Fall durch

$$\hat{H}_{\text{CIB}} \propto \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{(1-n_i)(1-n_j)}{r_{ij}}}_{\text{Donator-Donator-Anteil}} - \underbrace{\sum_{i,\nu} \frac{1-n_i}{r_{i\nu}}}_{\text{Donator-Akzeptor-Anteil}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\mu \neq \nu} \frac{1}{r_{\mu\nu}}}_{\text{Akzeptor-Akzeptor-Anteil}}$$

⁵In einem realen Halbleiter ist die klassische Beschreibung gültig, solange $N_D l^3 \leq 0.002$ gilt [SK84].

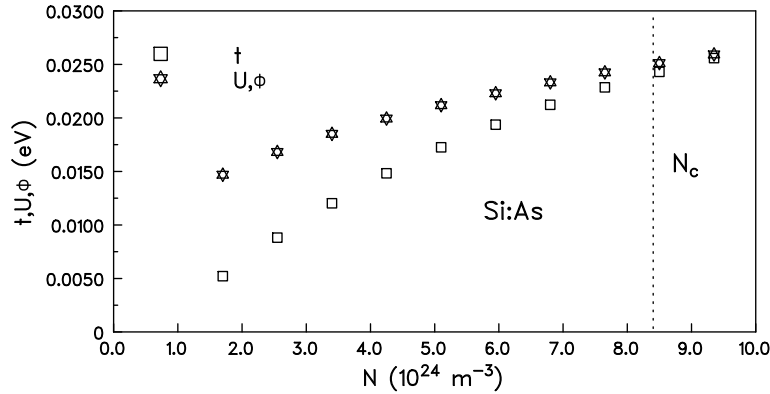


Abb. 1.2: Vergleich der Größenordnungen von Schwankungen des mittleren Unordnungspotentials ϕ , mittlerer Coulomb-Energie U_{ik} und mittlerem Transferintegral t für Si:As. Die kritische Konzentration liegt bei $8.5 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$. (Die Daten sind abgeleitet von Pollak und Ortuno (1985)[PO85].)

gegeben, wobei i und j die Donatorplätze und ν und μ die Akzeptorplätze numerieren, die jeweils ungeordnet im Raum verteilt sind.

Bei einer Konzentration von Störstellen in der Nähe der kritischen Konzentration N_c und nicht zu großem Lokalisierungsradius l der elektronischen Wellenfunktion der „nackten“ Störstelle können dagegen alle drei Energieskalen, mittlere Coulomb-Energie, mittlere Schwankung der Unordnung und mittleres Transferintegral zwischen zwei Plätzen, von derselben Größenordnung sein.

Je nach dem Wert des Hubbard-Parameters U beim dotierenden Material kann es dabei zwei Fälle geben:

- Die Hubbard-Energie ist nicht groß genug, um Doppelbesetzungen auszuschließen; bei der Beschreibung des Systems muß, insbesondere in der Nähe des MIT, der Spin berücksichtigt werden.
- Die Hubbard-Energie ist groß genug, um Doppelbesetzungen weitgehend auszuschließen. Unterdrückt man die Spinfreiheitsgrade und beschränkt sich von vornherein auf qualitative und langreichweitige Effekte, reicht auch hier wieder die Betrachtung des unteren Hubbard-Bands im Rahmen eines Modells spinloser Fermionen. Außerdem kann man die Coulomb-Wechselwirkung näherungsweise als Wechselwirkung zwischen Ladungen an Donatorplätzen betrachten. Der Hamilton-Operator eines solchen teilweise kompensierten Störstellenbandes kann dann als

$$\hat{H} \propto \underbrace{- \sum_{i,j} t(r_{ij}) \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j}_{\text{kinetischer Anteil}} + \hat{H}_{\text{CIB}}$$

geschrieben werden.

Man sieht, daß das System des teilweise kompensierten Störstellenbandes zwar nicht die Möglichkeit bietet, alle Energieskalen unabhängig voneinander zu variieren, aber daß es mit verschiedenen Materialien und Dotierungsgraden möglich ist, einen weiten Bereich der Phänomene abzudecken. Einen Überblick über die Größenordnung der verschiedenen Energieskalen am Beispiel eines teilweise kompensierten Störstellenbands in Si:As in Abhängigkeit von der Konzentration der Donatorstörstellen gibt Abb. 1.2.

Es existieren auch noch andere experimentell realisierte Strukturen, in denen bei entsprechender Parameterwahl sowohl die kinetische Energie der Elektronen als auch Unordnungs- und Coulomb-Effekte wichtig werden. Eine Möglichkeit sind Variationen des Konzepts der Störstellenbänder, bei denen die Bereitstellung der Ladungsträger vom eigentlichen System mit Unordnung getrennt wird. Elektronen werden in einem Bereich des Halbleiters mit hoher Dotierung zur Verfügung gestellt und erst dann in das eigentliche Experimen-

tiersystem mit geringerer Störstellendichte transportiert [KSS96]. Man erreicht so eine größere Unabhängigkeit der Parameter.

Weitere Systeme, auf die hier auch nicht detaillierter eingegangen werden soll, sind granulare Metalle [PA92, ASCA75], n-i-p-i-Übergitter [D85, DP88] und leitende Polymere [RB87, HKSS88, LCP93].

1.3 Bisherige Ergebnisse: Modelle und Methoden

Die Einführung von Wechselwirkung und Unordnung in ein Elektronensystem eröffnet, wie wir bereits im ersten Abschnitt angedeutet haben, ein weites Feld von komplexem physikalischen Verhalten. Um ein qualitatives Verständnis der Effekte zu erlangen, sind vereinfachte Modellvorstellungen notwendig.

Die Frage ist: Was spielt physikalisch eine dominierende Rolle? Gesucht sind universelle Erscheinungen, die nicht von den Details des physikalischen Systems abhängen. Strukturelle Details der verschiedenen Systeme sollten keine Rolle für qualitative Aussagen spielen, solange man sich für das Verhalten auf größeren Längen- und Zeitskalen interessiert. Als eine gute Grundlage für das Studium ungeordneter Elektronensysteme haben sich daher Gittermodelle [A58, ES75, EP95, TPE96] erwiesen, die auch als Abstraktion des teilweise kompensierten Störstellenbandes von 1.2. angesehen werden können:

- a) Es wird ein Modell spinloser Fermionen betrachtet.
- b) Das Modell besteht aus einem regelmäßigen, in der Regel kubischen Gitter mit g Plätzen und der Gitterkonstanten a . Die Plätze dieses Gitters können von $N = Kg$ Elektronen besetzt werden.
- c) Unordnung wird über ein zufälliges Potential an jedem Gitterplatz eingeführt.
- d) Zur Erhaltung der Ladungsneutralität trägt jeder Gitterplatz eine kompensierende Ladung $+eK$.
- e) Die kinetische Energie wird in einer Gitternäherung (tight-binding) durch das Transfermatrixelement t für das Hüpfen zwischen benachbarten Gitterplätzen beschrieben.

Für den Hamilton-Operator eines solchen Modellsystems ergeben sich damit drei Anteile:

$$\hat{H} = \underbrace{-t \sum_{\langle i,k \rangle} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k}_{\text{kinetische Energie; } \hat{H}_1} + \underbrace{\sum_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \phi_i}_{\text{Unordnung; } \hat{H}_2} + \underbrace{\sum_{i \neq k} \frac{(\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i - K)(\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k - K)}{r_{ik}}}_{\text{Coulomb-Anteil; } \hat{H}_3}, \quad (1.1)$$

wobei $\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_k$ Erzeuger- bzw. Vernichter am Gitterplatz i, k bezeichnen. ϕ_i ist das Zufallspotential am Gitterplatz i mit einer Verteilung der Breite W_0 ⁶, $\langle i, k \rangle$ bezeichnet, daß i und k nächste Nachbarn sein sollen, und r_{ik} ist der Abstand zwischen den Gitterplätzen i und k .

⁶Als Verteilung nimmt man meistens entweder eine Kastenverteilung

$$W(\phi_i) = \frac{1}{2W_0} [\theta(\phi_i + W_0) - \theta(\phi_i - W_0)] ,$$

oder eine Gaußverteilung

$$W(\phi_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} W_0} \exp(\phi_i^2/2W_0^2) .$$

Die genaue Form der Verteilung erweist sich für viele Phänomene als unwichtig, wichtig ist nur, daß sie stetig ist und nicht zu stark veränderlich in der Nähe der Fermi-Energie.

Je nachdem, welche dieser drei Anteile berücksichtigt werden, gelangt man zu verschiedenen Modellen, die wiederum mit unterschiedlichen Methoden behandelt werden können. Einen groben Überblick über die bekannten Phänomene versuchen die Abbildungen 1.3 und 1.4 zu geben:

A) „reine“ Modelle

Nimmt man nur einen der drei Terme im Hamilton-Operator (1.1) mit, gelangt man zu drei Fällen „reiner“ Modelle:

1.) Wignerkristall:

Es wird nur die Coulomb-Wechselwirkung auf dem regelmäßigen Gitter betrachtet,

$$\hat{H}_{\text{Wig}} = \hat{H}_3$$

weder kinetische Energie noch Unordnung. Damit liegt ein klassisches Problem vor. Im Grundzustand sind die Elektronen so auf den Gitterplätzen angeordnet, daß die gegenseitigen Abstände maximiert werden. Eine solche Anordnung nennt man „Wigner-Kristall“. Die Einteilchenzustandsdichte besteht nur aus zwei Peaks, jeweils für die besetzten und unbesetzten Zustände, im Abstand Δ (Madelung-Energie) von der Fermienergie (siehe Abb. 1.5).

2.) Bandelektronen:

Es wird nur der Hüpf-Term aus (1.1) mitgenommen,

$$\hat{H}_{\text{Band}} = \hat{H}_1.$$

Dieses Einteilchenproblem ist durch Fourier-Transformation in den k -Raum unmittelbar lösbar. Für ein kubisches Gitter erhält man ebene Wellen, also delokalisierte Elektronen, mit den möglichen Energien

$$\epsilon_k = -2t \begin{cases} \cos k_x & \text{1-dimensional} \\ \cos k_x + \cos k_y & \text{2-dimensional} \\ \cos k_x + \cos k_y + \cos k_z & \text{3-dimensional} \end{cases} .$$

Die Einteilchenzustandsdichte geht mit wachsender Systemgröße in ein kontinuierliches Band zwischen $-2d t$ und $+2d t$ (d ist die Dimension) über (siehe Abb. 1.6).

3.) Zufallspotential-Gitter:

Der Hamilton-Operator besteht nur aus dem Unordnungsteil von (1.1)

$$\hat{H}_{\text{Zp}} = \hat{H}_2$$

und enthält weder kinetische Energie noch Coulomb-Wechselwirkung. Wieder liegt ein klassisches Problem vor, dessen Grundzustand genau der Besetzung der N Gitterpunkte mit den niedrigsten Zufallspotentialwerten entspricht. Über viele Realisierungen des Zufallspotentials gemittelt, reproduziert die Einteilchenzustandsdichte genau die Verteilungsfunktion des Zufallspotentials (siehe Abb. 1.7).

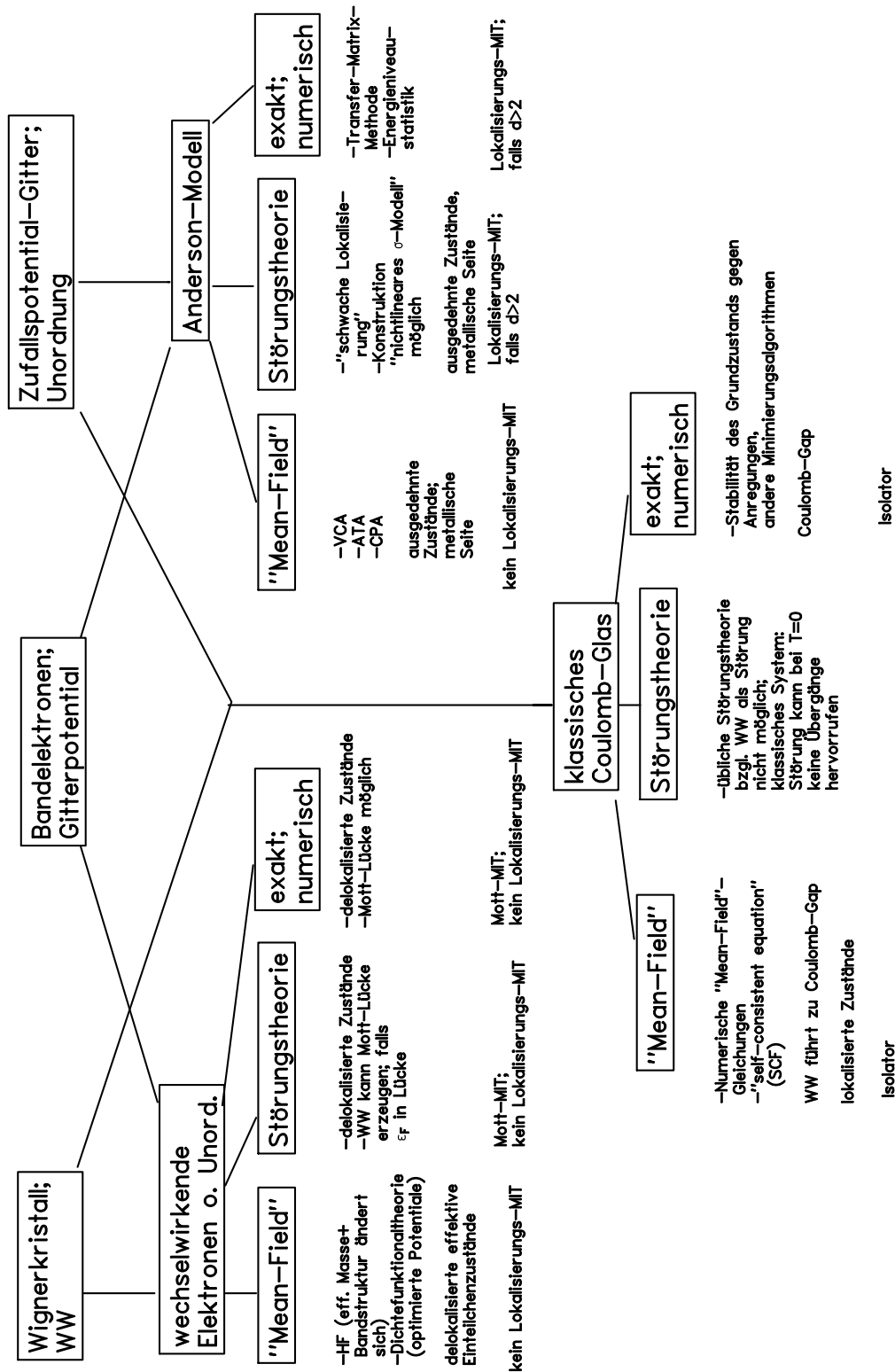


Abb. 1.3: Modelle und Methoden für Elektronen ohne Spin, die Abkürzungen sind im Text erklärt

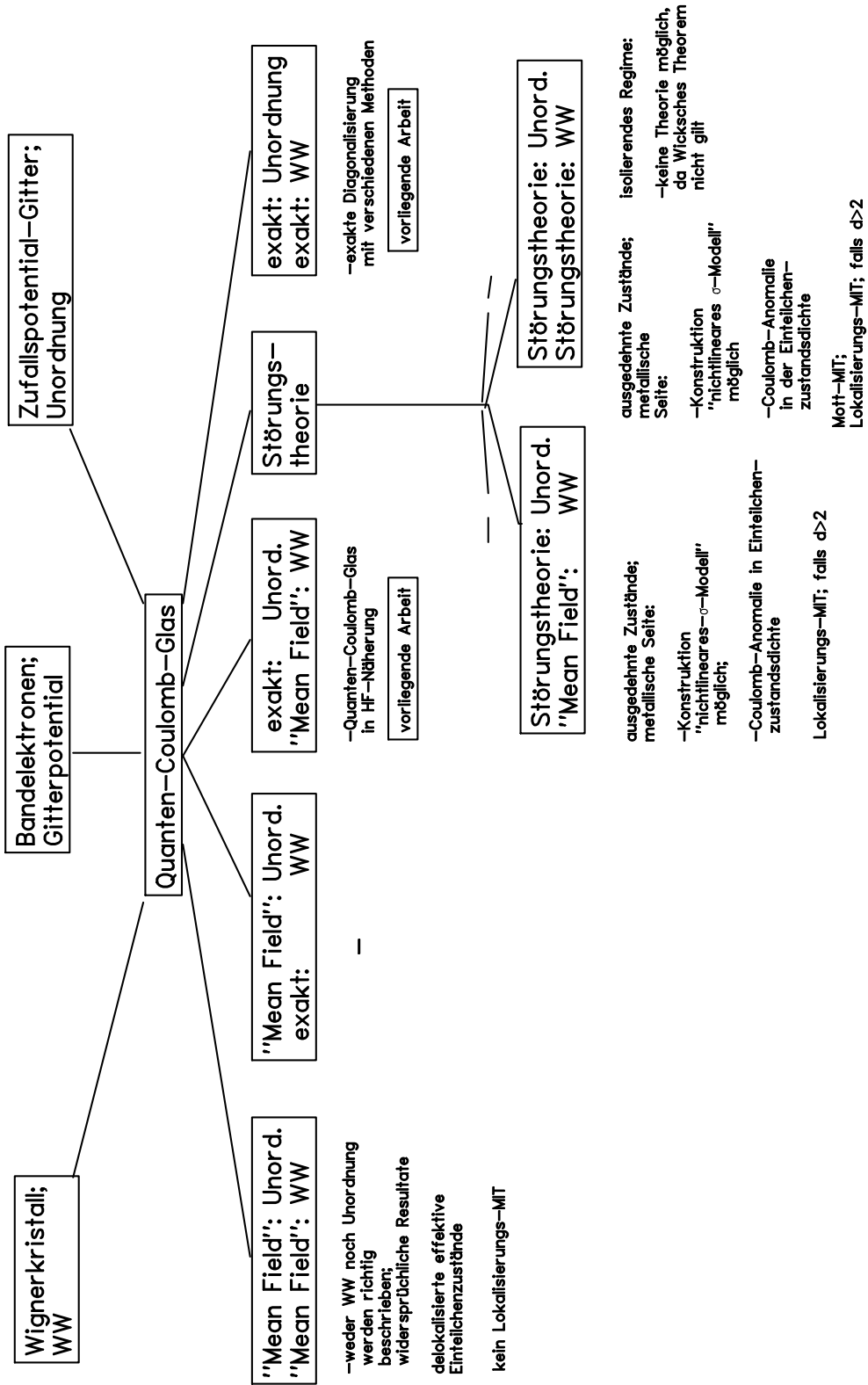


Abb. 1.4: Modelle und Methoden beim Quanten-Coulomb-Glas, die Abkürzungen sind im Text erklärt

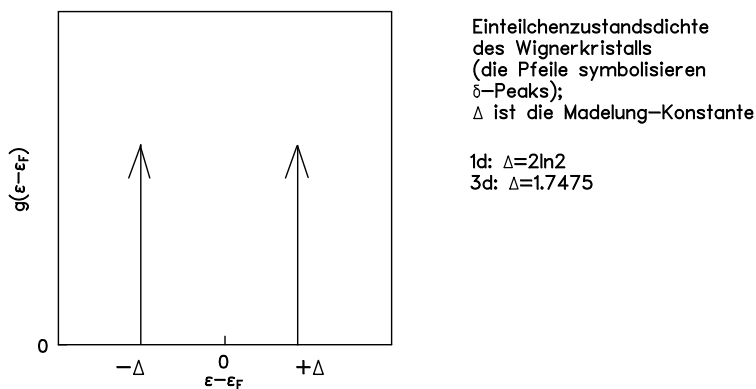


Abb. 1.5: Einteilchenzustandsdichte beim Wignerkristall

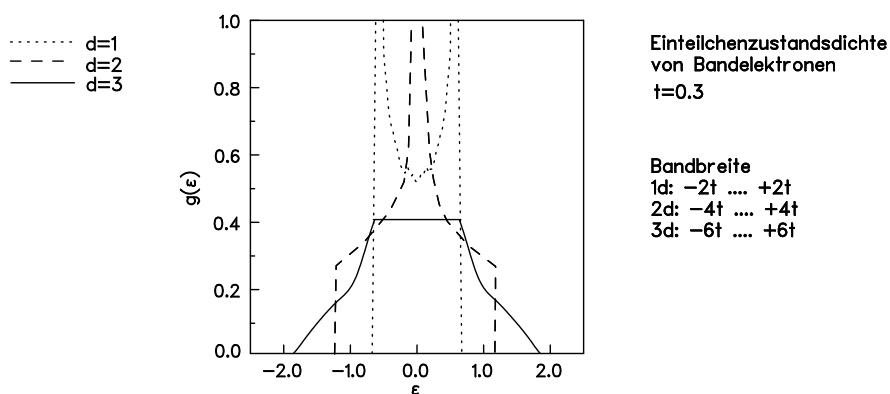


Abb. 1.6: Einteilchenzustandsdichte bei Bandelektronen (qualitativ)

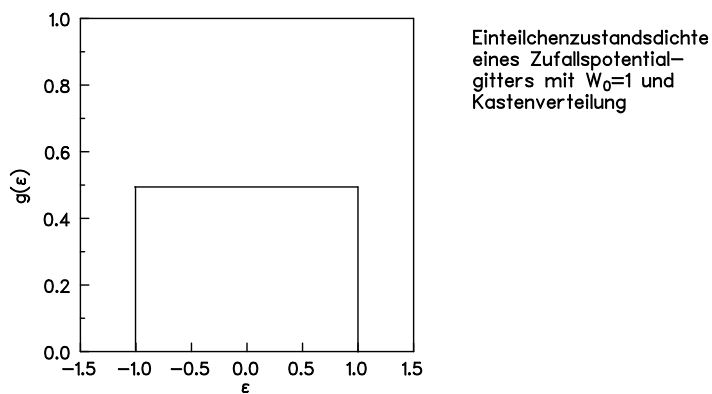


Abb. 1.7: Einteilchenzustandsdichte beim Zufallspotential-Gitter

B) Modelle mit zwei Anteilen im Hamilton-Operator

Nimmt man jeweils zwei Anteile unseres Modell-Hamiltonoperators (1.1) mit, ergeben sich drei Modelle mit jeweils Unordnung und Coulomb-Wechselwirkung, Hüpf-Term und Coulomb-Wechselwirkung sowie Unordnung und Hüpf-Term, die wir im folgenden betrachten wollen:

1.) wechselwirkende Elektronen ohne Unordnung [M49]:

Der Hamilton-Operator enthält den Hüpf-Term und den Coulomb-Term von (1.1),

$$\hat{H}_{\text{Mott}} = \hat{H}_1 + \hat{H}_3,$$

das System ist geordnet. Folglich gilt Translationsinvarianz, und es kann keinen Lokalisierungs-MIT geben, egal, mit welcher Methode das Modell behandelt wird.

a) „Mean-Field“-Näherung: Eine erste Näherung für dieses Vielteilchenproblem mit Wechselwirkung ist die „Mean-Field“-Näherung. Der Zweiteilchenterm im Hamilton-Operator wird dabei durch die beste mögliche Einteilchen-Näherung ausgedrückt, die Erwartungswerte enthält, die selbstkonsistent bestimmt werden müssen. Dem entspricht, daß die Wechselwirkung zwischen den Teilchen durch die Wechselwirkung jedes Teilchens mit einem effektiven Potential ersetzt wird. Damit werden die durch die Wechselwirkung hervorgerufenen Korrelationen im System vernachlässigt und nur noch ein gemittelter Einfluß berücksichtigt. Das allgemeine Variationsverfahren liefert als bestmögliche Näherung für den Zweiteilchenterm im Hamilton-Operator die Hartree-Fock-Näherung (HF-Näherung) [H57]. Für spezielle Kristallpotentiale wie zum Beispiel das vorliegende Gittermodell kann das effektive Potential eines Einteilchenmodells im Rahmen eines Variationsverfahrens weiter optimiert werden, so daß auch ein Teil der Korrelationen mitberücksichtigt wird (z.B. in der Dichtefunktionaltheorie [F95]). Beide Methoden liefern für wechselwirkende Elektronen ohne Unordnung lediglich Korrekturen der Bandstruktur und der effektiven Massen im Verhältnis zu Bandelektronen.⁷ In der Einteilchenzustandsdichte des Gittermodells drücken sich diese Korrekturen lediglich durch eine Verbreiterung des Bandes aus.

b) Störungstheorie: Eine weitergehende Möglichkeit der Berücksichtigung der Korrelationen bietet die diagrammatische Störungstheorie: Der Pfadintegralausdruck für die gesuchten Greensfunktionen mit dem exakten Hamilton-Operator wird in eine semi-konvergente Reihe von Feynman-Diagrammen entwickelt. Im Fall des Modells wechselwirkender Elektronen ohne Unordnung zeigt sich, daß die Korrelationen bei genügend starker Wechselwirkung zu einer Lücke in der Zustandsdichte der für den Transport notwendigen Anregungen, einer Mott-Lücke, führen. Lag die Fermienergie ohne Wechselwirkung in dieser Lücke, so kommt es durch das Einschalten der Wechselwirkung zu einem wechselwirkungsinduzierten MIT, dem Mott-MIT [M49]. Die Einteilchenzustandsdichte zeigt ebenfalls die Mott-Lücke (siehe Abb. 1.8).⁸

c) exakte Rechnung: Exakt berücksichtigt werden die Korrelationen bei der geschlossenen oder numerischen exakten Diagonalisierung des Zweiteilchen-Hamilton-Operators. Eine geschlossene Diagonalisierung ist trotz Translationsinvarianz für wechselwirkende Elektronen ohne Unordnung nicht möglich, ein Äquivalent zum Bloch-Theorem kann für den Fall eines Zweiteilchen-Hamilton-Operators nicht angegeben werden. Numerische Rechnungen führen ebenfalls zur Mott-Lücke und zum Mott-MIT.

2.) Klassisches Coulomb-Glas [P70, ES75]:

Im Hamilton-Operator werden nur der Coulomb-Term und der Unordnungsterm aus (1.1) berücksichtigt:

$$\hat{H}_{\text{CG}} = \hat{H}_2 + \hat{H}_3 .$$

⁷Dabei kann es bei komplizierteren Kristallpotentialen durch die Änderung der Bandstruktur durch das Einschalten der Wechselwirkung zu einem bandstrukturinduzierten MIT kommen.

⁸Als Überblick siehe hier z.B. [U94].

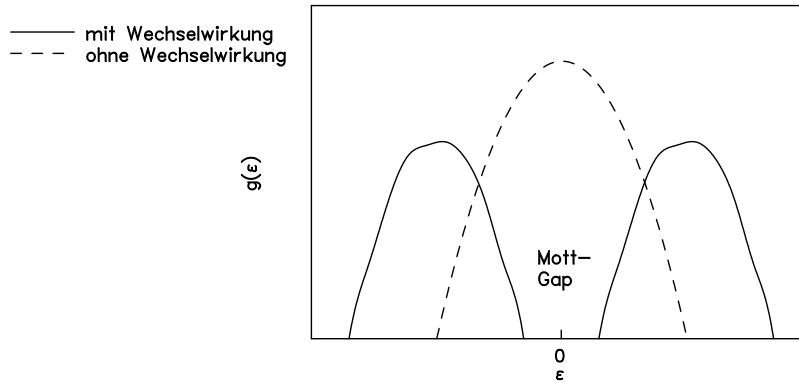


Abb. 1.8: Qualitativer Verlauf der Einteilchenzustandsdichte für wechselwirkende Elektronen ohne Unordnung im Fall starker Wechselwirkung; Mott-Lücke

Durch das Fehlen des Hüpf-Terms haben wir es hier mit einem klassischen System zu tun: Alle Zustände sind lokalisiert, das System ist immer Isolator, es kann keinen MIT geben. Das Modell hat bei $T = 0$ keine innere Dynamik, jede beliebige Besetzung ist ein Eigenzustand. Das Problem besteht darin, den Eigenzustand zu finden, bei dem die klassischen Elektronen so auf dem Gitter verteilt sind, daß die resultierende Gesamtenergie minimal wird, den Grundzustand. Das ist allerdings wegen der (aus der Konkurrenz zwischen Wechselwirkung und Unordnung resultierenden) Frustration des Systems [T77] ein komplexes Problem, das außerdem für jede Realisierung des Zufallspotentials gelöst werden muß.

a) „Mean-Field“-Näherung: Auch in diesem klassischen Vielteilchensystem kann die Wechselwirkung in „Mean-Field“-Näherung behandelt werden. Das führt für jede Realisierung des Zufallspotentials auf ein nichtlineares Gleichungssystem, das nur numerisch gelöst werden kann [GPSW82, GPSW83]. Auch die Unordnung kann Mean-Field-mäßig behandelt werden. Die größte Näherung, der Ersatz des Zufallspotentials durch ein konstantes mittleres Potential, zerstört aber die Frustration als ein wesentliches Merkmal des Systems und führt auf ein Modell wechselwirkender Elektronen ohne Unordnung. Interessiert man sich speziell für die Zustandsdichte des Systems an der Fermienergie ϵ_F , so kann man aus Stabilitätsüberlegungen eine selbstkonsistente Gleichung für die Einteilchenzustandsdichte bei ϵ_F , ableiten, die eine explizite Berechnung erlaubt, die SCE („self consistent equation“) von Efros und Shklovskii [ES75, E76, BEGS79, RE87, DA85, VJS93, SSV95]⁹.

Die Coulomb-Wechselwirkung führt immer zur Ausbildung einer charakteristischen Lücke in der Einteilchenzustandsdichte bei ϵ_F , der Coulomb-Lücke, deren Form weitgehend universell ist und nur von der räumlichen Dimension und kaum von der Stärke und der Verteilung des Zufallspotentials abhängt (siehe Abb. 1.9)¹⁰

b) Störungstheorie: Diagrammatische Störungstheorie in der üblichen Weise ist hier

⁹Eine Zusammenfassung gibt auch [ES92]

¹⁰Man erhält im Grenzfalle unendlich großer Systeme eine Lücke, die nach der SCE in der Umgebung von ϵ_F in 3d quadratisch, in 2d linear und in 1d logarithmisch verläuft:

$$g(\epsilon) = \frac{3}{2\pi} |\epsilon - \epsilon_F|^2 \quad (3d),$$

$$g(\epsilon) = \frac{1}{\pi} |\epsilon - \epsilon_F| \quad (2d) \quad \text{und}$$

$$g(\epsilon) = \frac{1}{\ln(1/|\epsilon - \epsilon_F|)} \quad (1d) .$$

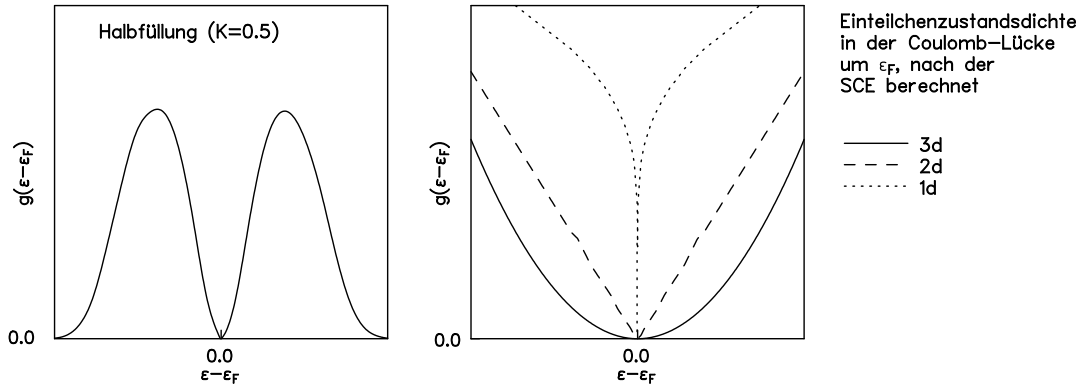


Abb. 1.9: Einteilchenzustandsdichte des klassischen Coulomb-Glases, Coulomb-Lücke (schematisch)

nicht anwendbar, weil das System ein klassisches System ist und die Störung keine Übergänge hervorrufen kann.

c) exakte Rechnung: Numerisch sind verschiedene Minimierungsmethoden denkbar und auch ausgeführt worden: Man kann die Stabilität des Systems gegen Einteilchen-, Zweiteilchen- und höhere Anregungen [DLR82, DLR84, MR87a, MRB92] als Grundzustandskriterium verwenden, Monte-Carlo-Algorithmen [BEGS79, ENS79] und andere Algorithmen heranziehen. Auch hier zeigt die Einteilchenzustandsdichte die charakteristische Coulomb-Lücke an der Fermienergie.¹¹

3.) Anderson-Modell der Lokalisierung [A58, M66]:

Der Anderson-Hamilton-Operator ergibt sich, wenn man nur das Zufallspotential und den Hopping-Term aus (1.1) mitnimmt:

$$\hat{H}_{\text{And}} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 .$$

Im Unterschied zu den beiden bisher betrachteten Modellen mit zwei Termen des allgemeinen Gittermodell-Hamilton-Operators ist der Anderson-Hamilton-Operator ein Einteilchenoperator, d.h., alle Observablen können einfach durch Überlagerung von Einteilchengrößen gewonnen werden.

a) „Mean-Field“-Näherung: Der Hamilton-Operator ist bereits ein Einteilchenoperator. Somit kann lediglich die Unordnung in Mean-Field-Näherung betrachtet werden. Auf dem größten Niveau (VCA, „virtual crystal approximation“) wird das Zufallspotential dabei lediglich durch ein gemittelttes Potential für alle Gitterplätze ersetzt, was das Modell effektiv zu einem Modell für Bandelekttronen macht und nur die Lage des Energiebandes verschiebt. Das Effektivpotentialmodell ist wieder translationsinvariant, und alle Elektronen bleiben delokalisiert. Etwas weniger grob sind Mittelungen der Unordnung über Mittelungen in der T -Matrix (ATA, „average T -matrix approximation“) und über Mittelungen auf dem Niveau der Greensfunktion (CPA, „coherent potential approximation“) [EKL74]). Diese Modelle führen zwar zu besseren Näherungen für die Zustandsdichte, die Unordnung wird aber auch hier letztlich herausgemittelt, und es entstehen effektiv translationsinvariante Modelle, die keinen Lokalisierungs-MIT zeigen können.

¹¹Die besten numerischen Daten (Stabilisierung gegen Anregung mit vier beteiligten Plätzen, [MRB92]) zeigen dabei für 2d und 3d einen steileren Verlauf der Zustandsdichte in der Coulomb-Lücke als die (universellen) analytischen Ergebnisse, nähern sich ihnen aber mit wachsendem W_0 .

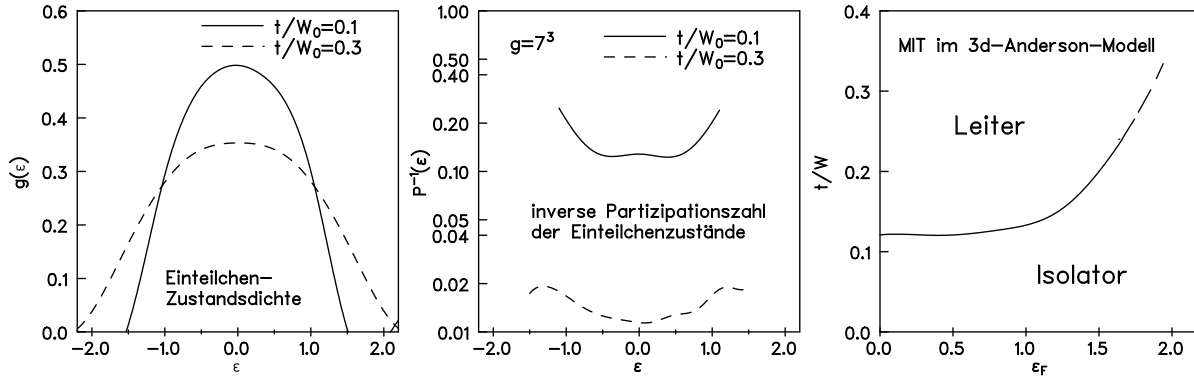


Abb. 1.10: Einteilchenzustandsdichte, Partizipationszahl und MIT beim 3d-Anderson-Modell

b) Störungstheorie: Besser wird die Unordnung in einer diagrammatischen Störungstheorie berücksichtigt. In der nullten Ordnung ergibt sich das Referenzsystem – Bandelektronen ohne Unordnung. Mit steigenden Ordnungen erhält man auf Grund von Interferenzen eine erhöhte Wahrscheinlichkeit für Rückwärtsstreuung von Einteilchenzuständen, die zu Abweichungen vom klassischen Leitwert führt („weak localization“) [B84]. Bei hinreichend tiefen Temperaturen führt dies für Dimensionen $d > 2$ bei genügend starker Unordnung, für Dimensionen $d \leq 2$ dagegen in jedem Fall zu lokalisierten Elektronen und damit zum MIT. Am MIT bricht die Störungstheorie zusammen. Die Abbildung dieses Modells auf ein nichtlineares σ -Modell ist möglich, und aus der Anwendung der Renormierungsgruppentheorie erhält man für dieses Modell einen MIT für alle Dimensionen $d > 2$, für $d \leq 2$ gibt es dagegen nur lokalisierte Zustände [W89].¹²

c) exakte Rechnung: Eine exakte Lösung durch explizite Diagonalisierung ist beim Anderson-Modell wegen der Unordnung nicht möglich, numerisch ist das System aber (weil es eine Einteilchentheorie ist) bis zu relativ großen Systemen (g in der Größenordnung von 100^3) gut lösbar. Ein Maß für die Lokalisierung ist die Partizipationszahl der Einteilchenzustände (siehe Kapitel 4), die angibt, über wieviele Plätze sich ein Zustand verteilt. Weil das Transfermatrixelement im Hüpf-Term nur Übergänge zu den nächsten Nachbarn vermittelt, kann die Schrödinger-Gleichung zu einem rekursiven Ausdruck für die Propagation der Wellenfunktion umgeformt werden (Transfer-Matrix-Methode (TMM)), mit dem sich die Lokalisierungslänge im System berechnen läßt [MK83]. Mittels Finite-Size-Scaling kann dann untersucht werden, ob das System einen MIT aufweist [HS93, SG96]. Auch über die Energieniveaustatistik und mit Argumenten aus der Theorie der Zufallsmatrizen [SSLS93, HS94] sowie durch die Multifraktalanalyse [SG91, SG95] kann man den Anderson-MIT numerisch bestimmen. Man findet einen MIT für Gitter mit beliebigen Dimensionen $d > 2$ [SG96]. Bei Dimensionen $d \leq 2$ gibt es dagegen keinen MIT.¹³ Die Unordnung bewirkt eine Verbreiterung des Bandes im Vergleich zu Bandelektronen ohne Unordnung.

Die Einteilchenzustandsdichte im Anderson-Modell hat ein Maximum in der Bandmitte und fällt zur Bandkante stetig ab (siehe Abb. 1.10). Die Zustände in der Bandmitte können am besten hybridisiert werden, haben die größte Partizipationszahl und sind damit am schwächsten lokalisiert. Weiter zur Bandkante zu werden die Zustände immer stärker lokalisiert (siehe Abb. 1.10). Der Metall-Isolator-Übergang tritt (bei Dimensionen $d = 2 + \epsilon$) für Fermienergien an der Bandmitte bei den kleinsten Transfermatrixelementen auf, je

¹²Zum Überblick siehe [KM93].

¹³Wenn man durch Einschalten eines quantisierenden Magnetfeldes oder Spin-Bahn-Kopplung die Universalitätsklasse des Modells ändert, kommt es auch in 2d zu einem MIT.

weiter die Fermienergie zur Bandkante geschoben wird, umso größer wird das kritische Transfermatrizelement, bei dem der Übergang eintritt (siehe Abb. 1.10 [BKS87]).

C) Quanten-Coulomb-Glas

Mit dem vollständigen Modell-Hamiltonoperator (1.1) erhält man ein Gittermodell, in dem sowohl Unordnung als auch Coulomb-Wechselwirkung und der Hopping-Term eine Rolle spielen, das Quanten-Coulomb-Glas [EP95, TPE96]:

$$\hat{H}_{\text{QCG}} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 . \quad (1.2)$$

Es können nun jeweils sowohl Coulomb-Wechselwirkung als auch Unordnung in Mean-Field-Näherung, mittels diagrammatischer Störungstheorie oder exakt behandelt werden:

a) Unordnung und Coulomb-Wechselwirkung in Mean-Field-Näherung: Die Behandlung der Unordnung in Mean-Field-Näherung auf der Ebene des Potentials selbst (VCA), der T-Matrix (ATA) oder der Greensfunktionen (CPA) führt auch hier, wie beim Anderson-Modell letztlich zu einem translationsinvarianten Modell. Der Ersatz des Coulomb-Terms durch ein selbstkonsistent zu bestimmendes effektives Potential ergibt einen effektiven Einteilchen-Hamilton-Operator, bei dem die Korrelationen im System vernachlässigt werden. Damit sind die Lösungen delokalisierte effektive Einteilchenzustände, und es gibt in der doppelten Mean-Field-Näherung weder einen Lokalisierungs-MIT noch einen Mott-MIT. Somit werden sowohl Unordnung als auch Wechselwirkung in einer solchen Theorie nicht ausreichend beschrieben [VSH86, LP93], gerade das eigentlich interessierende Wechselspiel zwischen Unordnung und Korrelationen wird herausgemittelt.

b) Unordnung in Mean-Field-Näherung und exakte Berücksichtigung der Wechselwirkung: Das Problem ist dasselbe wie oben: Mean-Field-Behandlung der Unordnung führt zu Translationsinvarianz. Damit wird ein Lokalisierungs-MIT von vornherein ausgeschlossen. Das Problem bleibt jetzt ein Vielteilchenproblem, und ein Mott-MIT ist wegen der Berücksichtigung der Korrelationen möglich, aber die Näherung durch das Herausmitteln der Unordnung ist so grob, daß der Aufwand für die exakte Lösung des verbleibenden Vielteilchenproblems kaum lohnt.

c) exakte Berücksichtigung der Unordnung und Mean-Field-Näherung für die Coulomb-Wechselwirkung: Das Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung bei exakter Berücksichtigung der Unordnung ist Thema des 2. Kapitels dieser Arbeit.¹⁴ Dieses Herangehen verspricht tatsächlich neue Effekte: Durch die exakte Berücksichtigung der Unordnung werden Lokalisierungseffekte möglich. Die Berücksichtigung der Wechselwirkung auf HF-Niveau führt auf einen effektiven Einteilchen-Hamilton-Operator, der für viele verschiedene Realisierungen numerisch diagonalisiert werden muß. Der Einfluß der Wechselwirkung auf die Einteilchenzustandsdichte und damit auf die Einteilchenlokalisierung kann so erfaßt werden, nach wie vor werden aber die Korrelationen vernachlässigt. Die Methode ist als effektive Einteilchentheorie bis zu relativ großen Systemen beherrschbar, erlaubt Aussagen sowohl im isolierenden als auch im metallischen Bereich und sollte zumindest in einem Teil des Parameterraums, wo Korrelationen keine große Rolle spielen, eine gute Näherung für das Quanten-Coulomb-Glas liefern¹⁵.

¹⁴Ein ähnliches Vorgehen wurde auch zum Studium der Bildung lokaler Momente [MSB89] und der Eigenschaften von mesoskopischen Dauerströmen [BP95] angewendet.

¹⁵Leider ist die Güte der Näherung aber unkontrolliert, so daß zur Absicherung der Ergebnisse von vornherein auch über die HF-Näherung hinausgehende Untersuchungen notwendig sind.

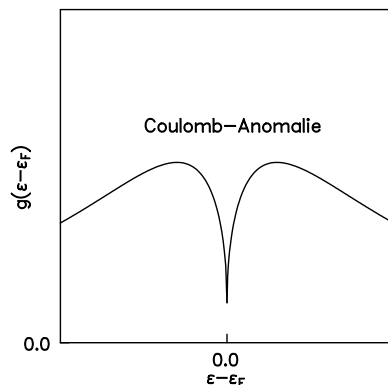


Abb. 1.11: Coulomb-Anomalie

d) diagrammatische Störungstheorie für die Unordnung und Mean-Field-Behandlung für die Coulomb-Wechselwirkung: Das Referenzsystem für die Störungstheorie ist hier ein Modell von Elektronen ohne Unordnung in HF-Näherung, die effektiv wechselwirkungsfrei sind. Wie das Anderson-Modell der Lokalisierung kann damit auch dieses Modell auf ein nichtlineares σ -Modell abgebildet werden, und man erhält einen MIT für alle Dimensionen $d = 2 + \epsilon$. Der Einfluß der Coulomb-Wechselwirkung auf die Einteilchenzustandsdichte zeigt sich in einer wurzelförmigen Anomalie auf der metallischen Seite des MIT, der Coulomb-Anomalie [AA79], die ein Resultat des Austauschterms der HF-Näherung der Coulomb-Wechselwirkung ist [LR85] (siehe Abb. 1.11). Die isolierende Seite bleibt der Theorie versperrt, da die Störungstheorie dort zusammenbricht.

e) diagrammatische Störungstheorie sowohl für die Unordnung als auch für die Coulomb-Wechselwirkung: Auf der metallischen Seite ist hier für beide Anteile eine diagrammatische Entwicklung möglich, wobei das System nullter Ordnung einfach die nichtwechselwirkenden Bandelektronen ohne Unordnung sind. Die Störungstheorie nähert sich von der metallischen Seite asymptotisch dem MIT und bricht dort zusammen. Eine Abbildung auf ein nichtlineares σ -Modell ist möglich, und man erhält einen MIT für alle Dimensionen $d = 2 + \epsilon$ [LR85, F83, BK94]. Auf der metallischen Seite ergibt sich auch hier die Coulomb-Anomalie in der Einteilchenzustandsdichte [AA79]. Die isolierende Seite bleibt wieder unverstanden: Man kann mit der Störungstheorie nicht von einem klassischen Coulomb-Glas starten, weil in einem solchen System das Wicksche Theorem nicht gilt; das ungestörte System ist selbst bereits ein komplexes Vielteilchenproblem. Quantitative Aussagen, die über Universalitätsklassen und kritische Exponenten hinausgehen, können in diagrammatischen Störungstheorien nur sehr schwer gemacht werden ¹⁶.

f) exakte Behandlung von Unordnung und Wechselwirkung: Die exakte numerische Lösung bietet direkten Zugang zur gesamten Physik des Systems, Problem ist aber das exponentielle Wachstum der Größe der zu diagonalisierenden Matrix, so daß es extrem schwer ist, zu hinreichend großen Systemen zu kommen. Das Quanten-Coulomb-Glas in exakter Rechnung für sehr kleine Systeme ist Inhalt des 3. Kapitels dieser Arbeit, größere Systeme werden im 4. Kapitel mit der neuentwickelten Methode der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung untersucht. Die Methode ist dabei für alle Parameterbereiche brauchbar. Eine ähnlicher Ansatz wurde von [EP95, TPE96] realisiert, die dort verwendete Methode erlaubt aber nur die Behandlung von Systemen mit sehr kleinem Transfermatrixelement, also tief im lokalisierten Regime. Aus Untersuchungen der Energieniveaustatistik der Vielteilcheneigenzustände schließen die Autoren auf einen delokalisierenden Einfluß

¹⁶Die $2d + \epsilon$ -Entwicklung, die herangezogen werden muß, ist hochgradig singular [HB78, W89, H92].

der Wechselwirkung [TPE96].

D) Betrachtungen zu Wechselwirkung und Unordnung im Rahmen anderer Modelle

Mit der Problematik von Wechselwirkung und Unordnung verbunden, aber von einem anderen Modell ausgehend, sind eine Reihe von Untersuchungen über das Verhalten von zwei wechselwirkenden Teilchen in einem Gittermodell mit Unordnung im isolierenden Regime. Man hat gefunden, daß die zwei Teilchen ein Paar bilden können, dessen Lokalisierungslänge viel größer als die Einteilchenlokalisierungslänge ist [S94, I95, WMPF95, RS97]. Für Cluster von drei oder mehr Teilchen wurde später sogar noch eine stärkere Delokalisierung vorgeschlagen [WPI97]. Bei abstoßender Elektron-Elektron-Wechselwirkung haben diese delokalisierten Zustände allerdings sehr hohe Energien, womit ihre Relevanz für die niederenergetischen Eigenschaften eines Fermisystems nicht klar ist.

Es wurde auch argumentiert, daß das allgemeine Vielteilchenproblem auf einige wechselwirkende Quasiteilchen oberhalb der Fermifläche reduziert werden kann [OW95, OMW96, JS97]. Das ist aber nur möglich, wenn die Wechselwirkung die Natur des Grundzustands nicht verändert. Bereits im klassischen Coulomb-Glas zeigt sich aber, daß das der Fall ist. In den letzten Jahren hat es weiterhin eine Reihe von numerischen Untersuchungen zum Problem des Transports von ungeordneten wechselwirkenden Elektronen im diffusiven Bereich gegeben, wobei Modelle betrachtet wurden, die mit dem Quanten-Coulomb-Glas verwandt sind. Untersuchungen eines zweidimensionalen Modells spinloser Fermionen im diffusiven Regime zeigten, daß Wechselwirkung immer zu einer Reduzierung der Leitfähigkeit führt [BA96]. Dieselbe Schlußfolgerung wurde auch aus Dichte-Matrix-Renormierungsgruppenrechnungen [SSSSE98] und exakten Diagonalisierungen in 1d gezogen [BP95].

1.4 Bisherige Ergebnisse: Experimente

Die experimentellen Resultate sollen hier nur kurz gestreift werden:

1.) Experimente in teilweise kompensierten Störstellenbändern:

Messungen der Einteilchenzustandsdichte tief im isolierenden Bereich (niedrige Dotierung) sind schwierig, da die typischen Coulomb-Energien im Bereich von 10^{-3} eV liegen und damit spektroskopisch direkt nur schwer erfaßbar sind. Es wurde versucht, aus Messungen der Gleichstromleitfähigkeit bei tiefen Temperaturen auf die Einteilchenzustandsdichte zurückzuschließen. Da der Leitungsmechanismus im klassischen Coulomb-Glas bei $T \neq 0$ und insbesondere die Rolle der Einteilchenzustandsdichte bei der Gleichstromleitung aber noch kontrovers diskutiert werden [P92], ist das problematisch.¹⁷

Kompensierte Störstellenbänder nicht zu weit entfernt vom MIT¹⁸ (aber noch immer im isolierenden Bereich) haben höhere Coulomb-Energien (höhere Dotierung) und sind damit dem Experiment besser zugänglich. In Systemen dieser Art konnten mit Elektron-Tunnel-Messungen [ML95] Existenz und charakteristische Form der Abhängigkeit der Einteilchenzustandsdichte in der Lücke von der Dimension (3d: Potenzgesetz, 2d: linearer Verlauf)

¹⁷ Untersuchungen an organischen Halbleitern, deren typische Energien etwa zwei bis drei Größenordnungen höher liegen, liefern Indizien für die Existenz einer Coulomb-Lücke [SGFGE93]

¹⁸ $n \sim 0.80 \dots 0.9 n_c$

der Coulomb-Lücke im Grenzfall $T \rightarrow 0$ direkt bestimmt werden.

Störstellenbänder in 3 Dimensionen bei verschiedenen Dotierungsgraden zeigen immer einen unordnungsinduzierten MIT im Grenzfall $T = 0$ (z.B. [DZS91, DZS92, AAAD92, AZS92]), für $d = 2$ gibt es bisher in teilweise kompensierten Störstellenbändern kein Anzeichen für einen MIT [BTD80, UDR81].

2.) Experimente in anderen Strukturen:

Neuere Experimente wurden mit aus dem Konzept der Störstellenbänder abgeleiteten Strukturen ausgeführt, bei denen die Bereitstellung der Ladungsträger vom eigentlichen System mit Unordnung getrennt wird. Messungen an derartigen Systemen in zwei Dimensionen mit hoher Mobilität und niedriger Elektronendichte (Si-MOSFETS) zeigten überraschenderweise Indikationen für einen MIT [KKFPD94, KMBF+95, KSS96]. Niedrige Elektronendichte bedeutet hier, daß die Coulomb-Wechselwirkung nicht nur im Verhältnis zur kinetischen Energie sehr stark ist, sondern auch (anders als bei teilweise kompensierten Störstellenbändern) im Verhältnis zur Unordnung. Es ist offen, ob dieser MIT ein Effekt des besonders starken Einflusses der Wechselwirkung ist, ob er vielleicht spininduziert ist, oder ob es sogar ein Supraleiter-Isolator Übergang und gar kein MIT ist [BK97, ZR97, PWMKD97].

1.5 Was soll diese Arbeit leisten?

Insgesamt ergibt sich folgendes Bild: Das Quanten-Coulomb-Glas wird auf der metallischen Seite des MIT recht gut verstanden: Es gibt Indizien dafür, daß die Wechselwirkung dort zu einer stärkeren Lokalisierung der Zustände im Vergleich zum Anderson-Modell führt. Auf der isolierenden Seite dagegen ist nur der vollständig lokalisierte Grenzfall, das klassische Coulomb-Glas, wirklich gut verstanden. Für sehr kleine Transfermatrixelemente gibt es Hinweise auf eine Delokalisierung im Vergleich zum Anderson-Modell. Was im gesamten weiteren isolierenden Bereich bis zum MIT hin passiert, ist unklar.

Untersuchungen von zwei Teilchen im ungeordneten Potential mit einer Hubbard-Wechselwirkung zeigen generell delokalisierende Tendenzen der Wechselwirkung, wobei die Relevanz für den Transport in Systemen endlicher Dichte aber fraglich ist.

Experimentelle Systeme mit geringer Dotierung, in denen die Coulomb-Wechselwirkung eine starke Rolle spielt, zeigen bei 2d einen MIT. Es ist unklar, ob Modelle spinloser Fermionen überhaupt zum Vergleich herangezogen werden dürfen, will man den MIT aber mit dem Einfluß der Coulomb-Wechselwirkung erklären, so müßte diese für schwache Unordnung zu einer Delokalisierung führen.

Kernfrage dieser Arbeit ist, ob bzw. in welchem Bereich die Wechselwirkung im Quanten-Coulomb-Glas zu einer Verstärkung oder Abschwächung der unordnungsinduzierten Lokalisierung führt.

Dabei wird zunächst die Unordnung exakt, die Wechselwirkung aber in HF-Näherung behandelt. Die Methode ist über den ganzen Parameterbereich anwendbar, und der Grad der Lokalisierung kann direkt mit dem Anderson-Modell verglichen werden. Der Einfluß der Einteilchenzustandsdichte auf die Lokalisierungseigenschaften wird gut berücksichtigt, die Korrelationen werden vernachlässigt [Kapitel 2].

Um Klarheit zu gewinnen, in welchen Parameterbereichen das legitim ist, d.h., wo die HF-Methode eine gute Näherung ist bzw. wo Korrelationen wichtig werden, wird die HF-Näherung mit der exakten Lösung für sehr kleine Systeme verglichen. Dabei ist es notwendig, eine Verallgemeinerung der üblichen Maße für Lokalisierung im Anderson-Modell

zu entwickeln. [Kapitel 3].

Die Erkenntnisse aus diesen Untersuchungen führen zur Entwicklung einer neuen Näherungsmethode, der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung (HFD), die beim Quanten-Coulomb-Glas im gesamten Parameterbereich anwendbar ist und die exakte Diagonalisierung größerer Systeme erlaubt. Mit dieser Methode erhaltene Ergebnisse für Leitwerte und Lokalisierungsmaße des Quanten-Coulomb-Glases im lokalisierten bzw. diffusiven Bereich werden diskutiert [Kapitel 4].

2. Quanten-Coulomb-Glas in Hartree-Fock-Näherung

In diesem Kapitel wird das Quanten-Coulomb-Glas mit dem Hamilton-Operator (1.2.) in HF-Näherung behandelt. Da die HF-Näherung eine effektive Einteilchentheorie ist, können die Lokalisierungseigenschaften bzw. die Lage des MIT mit denselben Methoden wie beim Anderson-Modell der Lokalisierung untersucht werden.

2.1 Grundidee der Hartree-Fock-Näherung

Ein systematischer Weg, eine Mean-Field-Theorie zu entwickeln, besteht in der Benutzung der Bogoliubov-Ungleichung [Pei34, F55] für die freie Energie: Zerlegt man den Hamilton-Operator \hat{H} eines Systems auf beliebige Weise in zwei Teile $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, so existiert eine obere Schranke für die freie Energie F des Systems:

$$F \leq F_{var} = F_0 + \langle \hat{H}_1 \rangle_0 ,$$

wobei F_0 die freie Energie des Systems mit dem Hamilton-Operator \hat{H}_0 ist und $\langle \hat{H}_1 \rangle_0$ die thermische Mittelung bezüglich \hat{H}_0 beschreibt.

Wählt man nun als \hat{H}_0 einen Hamilton-Operator, der exakt lösbar ist, lassen sich die Größen F_0 und $\langle \hat{H}_1 \rangle_0$ exakt berechnen. Enthält \hat{H}_0 außerdem freie Parameter, liefert eine Minimierung von F_{var} bezüglich dieser Parameter die bestmögliche Annäherung der freien Energie F des Systems.

Für den Fall $T = 0$, auf den wir uns im folgenden beschränken wollen, wird die Bogoliubov-Ungleichung zu:

$$E \leq E_0 + \langle \hat{H}_1 \rangle_0 = \langle \hat{H} \rangle_0 ,$$

wobei $\langle \hat{H} \rangle_0$ hier der Erwartungswert des exakten Hamilton-Operators bezüglich des Grundzustands von \hat{H}_0 ist. Die wahre Grundzustand des Systems bei $T = 0$ wird damit am besten durch den Grundzustand eines Hamilton-Operators \hat{H}_0 genähert, für den $\langle \hat{H} \rangle_0$ minimal ist.

Sei nun \hat{H} ein Hamiltonoperator der Form

$$\hat{H} = \sum_i \sum_k \hat{H}_{ik} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k + \sum_i \sum_{k \neq i} H_{iikk} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \quad (H_{iikk}, H_{ik} \text{ reell}, \quad (2.1) \\ H_{iikk} = H_{kkii}, H_{ik} = H_{ki})$$

mit Ein- und Zweiteilchenanteil. HF-Naherung heit jetzt, da dieser Zweiteilchenoperator so durch den Einteilchenoperator

$$\hat{H}_0 = \sum_r \sum_s A_{rs} \hat{c}_r^\dagger \hat{c}_s \quad (A_{rs}^* = A_{sr})$$

ersetzt werden soll, da $\langle \hat{H} \rangle_0$ minimal wird. Setzt man $\hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger |0\rangle$ ($|0\rangle$ ist der Vakuumzustand) als Grundzustand des noch unbekanntem Operators \hat{H}_0 an, wobei N die Teilchenzahl ist und die Erzeuger und Vernichter $\hat{b}_\mu^\dagger, \hat{b}_\nu$ mit den Erzeugern und Vernichtern in der Platz-Basis $\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_k$ ber

$$\hat{c}_i^\dagger = \sum_\mu k_{i\mu} \hat{b}_\mu^\dagger \quad \text{bzw.} \quad \hat{c}_k = \sum_\nu k_{k\nu} \hat{b}_\nu \quad \text{mit} \quad \sum_\mu k_{i\mu} k_{k\mu} = \delta_{ik}$$

zusammenhangen sollen, kann man $\langle \hat{H} \rangle_0$ ausrechnen: Fr den Einteilchenteil in \hat{H} erhalt man sofort:

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_i \sum_k H_{ik} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \right\rangle_0 &= \sum_i \sum_k H_{ik} \langle 0 | \hat{b}_N \dots \hat{b}_1 \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle \\ &= \sum_i \sum_k \sum_\mu \sum_\nu H_{ik} k_{i\mu} k_{k\nu} \langle 0 | \hat{b}_N \dots \hat{b}_1 \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle \\ &= \sum_i \sum_k \sum_{\mu=1}^N H_{ik} k_{i\mu} k_{k\mu} \end{aligned}$$

Mit

$$\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k = -\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_k \quad (i \neq k)$$

ergibt sich fr den Erwartungswert des Zweiteilchenteiles von \hat{H}

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_{\text{Zwei}} \rangle_0 &= - \sum_{i,k;k \neq i} H_{iik} \langle 0 | \hat{b}_N \dots \hat{b}_1 \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_k \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle \\ &= - \sum_{i,k;k \neq i} \sum_{\mu,\mu'} \sum_{\nu,\nu'} k_{i\mu} k_{k\mu'} k_{i\nu} k_{k\nu'} H_{iik} \langle 0 | \hat{b}_N \dots \hat{b}_1 \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_{\mu'}^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_{\nu'} \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle \\ &= \sum_{i,k;k \neq i} \sum_{\mu,\nu=1;\nu \neq \mu}^N \left(-k_{i\mu} k_{i\nu} k_{k\mu} k_{k\nu} H_{iik} + k_{i\mu}^2 k_{k\nu}^2 H_{iik} \right). \end{aligned}$$

Wir mssen nun den noch unbekanntem Einteilchenoperator \hat{H}_0 so bestimmen, da

a) $\hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger |0\rangle$ sein Grundzustand ist und gleichzeitig

b) $\langle \hat{H} \rangle_0$ minimal wird.

Dazu minimieren wir zunachst $\langle \hat{H} \rangle_0$ bezglich der $k_{m\lambda}$ und bercksichtigen die Normierung der $k_{i\mu}$ als Nebenbedingung $\sum_i k_{i\mu} k_{i\mu} = 1$ ber die Lagrangesche Multiplikatorenmethode:

$$\begin{aligned} \sum_{m,\lambda} \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle_0}{\partial k_{m\lambda}} \delta k_{m\lambda} &= \sum_{m,\lambda} \left\{ \sum_k \left[\sum_{\nu;\nu \neq \lambda} 2H_{mmkk} \left(k_{m\lambda} k_{k\nu}^2 - k_{m\nu} k_{k\lambda} k_{k\nu} \right) + H_{mk} k_{k\lambda} \right] - \epsilon k_{m\lambda} \right. \\ &\quad \left. + \sum_i \left[\sum_{\mu;\mu \neq \lambda} 2H_{iimm} \left(k_{m\lambda} k_{i\mu}^2 - k_{i\mu} k_{i\lambda} k_{m\mu} \right) + H_{im} k_{i\lambda} \right] - \epsilon k_{m\lambda} \right\} \delta k_{m\lambda}. \end{aligned}$$

Mit (2.1) sieht man, da die jeweils untereinanderstehenden Summanden in Zeile 1 und 2 gleich sind, so da fr die Variation nur noch

$$\sum_{m,\lambda} \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle_0}{\partial k_{m\lambda}} \delta k_{m\lambda} = 2 \sum_{m,\lambda} \left\{ \sum_k \left[\sum_{\nu;\nu \neq \lambda} 2H_{mmkk} \left(k_{m\lambda} k_{k\nu}^2 - k_{m\nu} k_{k\lambda} k_{k\nu} \right) + H_{mk} k_{k\lambda} \right] - \epsilon k_{m\lambda} \right\} \delta k_{m\lambda}$$

verbleibt.¹ Das kann man in eine Eigenwertgleichung umschreiben:

$$\sum_k k_{k\lambda} \left[\sum_l \sum_\nu 2 \delta_{mk} H_{mml} k_{l\nu}^2 - \sum_\nu 2 H_{mmkk} k_{m\mu} k_{m\mu} + H_{mk} \right] = \epsilon k_{m\lambda}$$

Beide obige Forderungen sind damit mit der Wahl

$$A_{ik} = 2\delta_{ik} \sum_l \sum_\mu k_{l\mu}^2 H_{iill} + H_{ik} - 2 \sum_\mu k_{k\mu} k_{i\mu} H_{iikk}$$

für die Hamilton-Matrix des Näherungsoperators \hat{H}_0 erfüllt. Insgesamt ergibt sich so für den optimalen Einteilchenoperator \hat{H}_0 , der den Grundzustand des durch den Hamilton-Operator (2.1) beschriebenen Systems am besten annähert:²

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \sum_i \sum_k \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k H_{ik} + \sum_i \sum_k \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \left[2\delta_{ik} \sum_l H_{iill} \langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l \rangle - 2H_{iikk} \langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \rangle \right] \quad (2.2)$$

Der HF-Näherungsoperator enthält anstelle von Termen mit vier Erzeugern und Vernichtern nur noch jeweils Terme mit zwei Erzeugern und Vernichtern, dafür aber Erwartungswerte von Paaren von Erzeugern und Vernichtern.

Zur Berechnung der Erwartungswerte $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle$ muß man den Grundzustand des HF-Hamilton-Operators kennen; um \hat{H}_{HF} zu diagonalisieren, ist aber wiederum die Kenntnis der Grundzustandserwartungswerte $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle$ erforderlich – eine Schlange, die sich in den Schwanz beißt; die Diagonalisierung kann daher nur in selbstkonsistenter Weise erfolgen: Die Erwartungswerte $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle$, die in die Diagonalisierung des HF-Hamilton-Operators hineingesteckt werden, müssen genau den Erwartungswerten entsprechen, die sich nach der Diagonalisierung mit dem HF-Vielteilchengrundzustand ergeben. Diese Selbstkonsistenz ist zum Beispiel mit Hilfe einer Selbstkonsistenzschleife erreichbar (siehe 2.2.).

2.2 Hartree-Fock-Verfahren für das Quanten-Coulomb-Glas

Der Hamilton-Operator des Quanten-Coulomb-Glases (1.2) wird mit der HF-Näherung (2.2) zu:

$$\hat{H}_{\text{HF}}^{\text{QCG}} = \sum_{i,k} H_{ik} \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle \quad \text{mit} \quad H_{ik} = -t\zeta_{ik} - \underbrace{\frac{\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \rangle}{r_{ik}}}_{i \neq k} + \delta_{ik} \left(\phi_i + \sum_{l \neq i} \frac{\langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l \rangle - K}{r_{il}} \right)$$

wobei $\zeta_{ik} = \begin{cases} 1, & \text{wenn } i, k \text{ Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad . \quad (2.3)$

(Dabei haben wir den Term $\sum \frac{K^2}{r_{ik}}$, der nur eine additive Konstante ist, vernachlässigt.) Der Term mit Erzeugern und Vernichtern zum gleichen Gitterplatz im Erwartungswert wird Hartree-Term genannt, während der Term mit den Erzeugern und Vernichtern zu verschiedenen Gitterplätzen im Erwartungswert Austauschterm heißt. Er gibt den Einfluß der Ununterscheidbarkeit quantenmechanischer Teilchen auf das Effektivpotential wieder. Dieses Einteilchenproblem ist für jede Realisierung des Zufallspotentials selbstkonsistent

¹Die Variation nach λ liefert lediglich die Nebenbedingung zurück.

²Unsere Herleitung war nur für $T = 0$, das Ergebnis gilt aber auch allgemein.

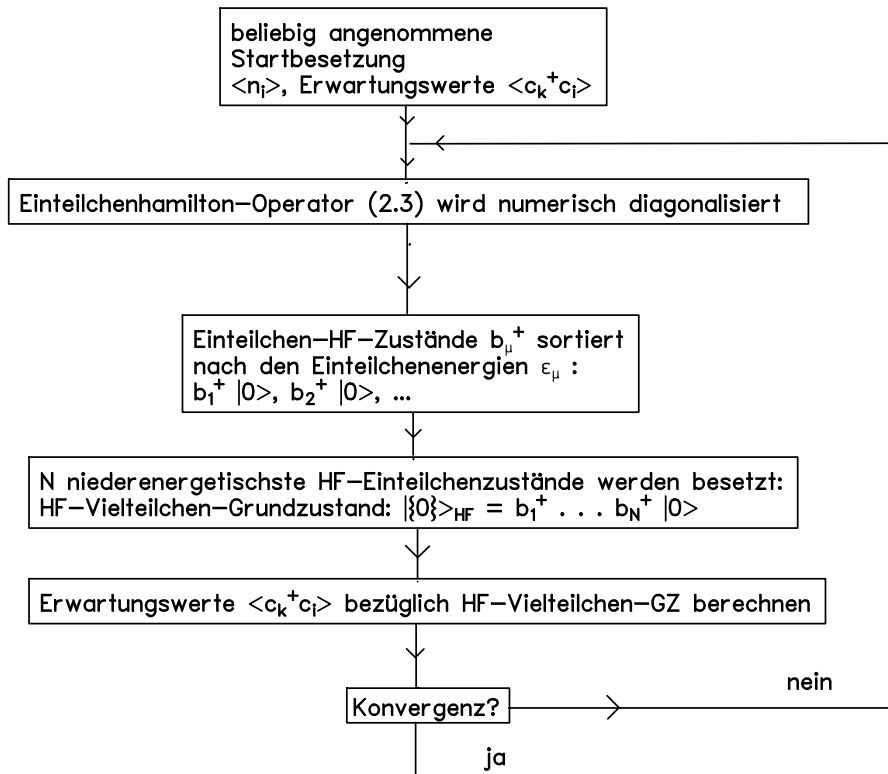


Abb. 2.1 HF-Verfahren beim Quanten-Coulomb-Glas; schematischer Ablauf

numerisch zu diagonalisieren. Diagonalisieren heißt dabei, eine Basistransformation $\hat{c}_i^\dagger = \sum_\mu k_{i\mu} \hat{b}_\mu^\dagger$ in der Weise vorzunehmen, daß der HF-Näherungsoperator (2.3) in den transformierten Erzeugern- und Vernichtern diagonal wird, daß also gilt

$$\hat{H}_{\text{HF}} \hat{b}_\lambda^\dagger |0\rangle = \sum_{i,k} \sum_{\mu,\nu} H_{ik} k_{i\mu} k_{k\nu} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_\lambda^\dagger |0\rangle = \sum_{i,k} \sum_{\mu} H_{ik} k_{i\mu} k_{k\lambda} \hat{b}_\mu^\dagger |0\rangle = \epsilon_\lambda \hat{b}_\lambda^\dagger |0\rangle .$$

Dazu müssen die $k_{i\lambda}$ Eigenvektoren zur Hamilton-Matrix H_{ik} sein:

$$\sum_k H_{ik} k_{k\lambda} = \epsilon_\lambda k_{i\lambda} \quad \text{und} \quad \sum_i k_{i\mu} k_{i\lambda} = \delta_{\mu\lambda} .$$

Selbstkonsistenz ergibt sich jetzt mit Hilfe einer Selbstkonsistenzschleife (siehe Abb. 2.1): Zunächst wird mit beliebigen Besetzungszahlen ³ $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \rangle$ und mit Überlapp-Erwartungswerten $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle = 0$ gestartet. Die Hamilton-Matrix H_{ik} wird numerisch diagonalisiert. Anschließend bildet man den Vielteilchen-Grundzustand dieses HF-Einteilchenhamilton-Operators

³Sinnvoll ist, dafür Lösungen von Grenzfällen des Quanten-Coulomb-Glases, z.B. dem Anderson-Modell der Lokalisierung oder dem klassischen Coulomb-Glas, für dieselbe Realisierung des Zufallspotentials anzusetzen.

als Slaterzustand von wechselwirkungsfreien Einteilchenzuständen. Dazu sortiert man die Einteilchen-Eigenzustände nach ihrer Energie ϵ_μ und besetzt die N niederenergetischsten Einteilchenzustände mit einem Teilchen:

$$|\{0\}\rangle = \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger |0\rangle .$$

Jetzt können die neuen Erwartungswerte $\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \rangle$ berechnet werden:

$$\begin{aligned} \langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \rangle &= \langle \{0\} | \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i | \{0\} \rangle = \langle 0 | \hat{b}_N \dots \hat{b}_1 \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle \\ &= \sum_\mu \sum_\nu k_{k\nu} k_{i\mu} \langle 0 | \hat{b}_N \dots \hat{b}_1 \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle \\ &= \sum_{\mu=1}^N k_{k\mu} k_{i\mu} . \end{aligned}$$

Stimmen diese neuen Grundzustandserwartungswerte mit den Startwerten überein, liegt Selbstkonsistenz vor. Stimmen sie nicht überein, werden sie wiederum als neue Startwerte benutzt. Die Schleife wird solange durchlaufen, bis Übereinstimmung erreicht ist. Eigenwerte ϵ_μ , Eigenvektoren $k_{i\mu}$, Besetzungszahlen n_i , die Erwartungswerte $\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \rangle$ und alle beliebigen anderen Erwartungswerte konvergieren dabei gegen feste Werte, die sich bei Selbstkonsistenz nicht mehr ändern.

Wenn die Selbstkonsistenzschleife korrekt funktioniert und tatsächlich in den HF-Grundzustand konvergiert (und nicht in ein lokales Minimum)⁴, muß bei beliebiger Startkonfiguration dieselbe Zielkonfiguration erreicht werden.

Die HF-Näherung ergibt also insgesamt:

- HF-Einteilchenzustände $\hat{b}_\mu^\dagger |0\rangle$ mit den HF-Einteilchenenergien ϵ_μ ,
- HF-Vielteilchengrundzustand und alle angeregten HF-Vielteilchenzustände $|\{\lambda\}\rangle$, zu denen man durch alle möglichen Besetzungen höherenergetischer HF-Einteilchenzustände gelangt,

$$|\{\lambda\}\rangle = \hat{b}_{\lambda_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\lambda_N}^\dagger |0\rangle ,$$

und ihre Energien $E_\lambda^{\text{HF}} = \sum_{\mu=1}^N \epsilon_{\lambda_\mu}$.⁵ Dabei ist zu beachten, daß die so gebildeten angeregten HF-Vielteilchenzustände im Unterschied zum HF-Vielteilchengrundzustand nicht die Selbstkonsistenzschleife durchlaufen haben; sie sind höherenergetische Vielteilcheneigenzustände zu einem HF-Hamiltonoperator mit den effektiven Potentialen des HF-Grundzustands und damit nicht selbstkonsistent.

⁴Bei der Variation von $\langle \hat{H} \rangle_0$ nach den $k_{i\mu}$ könnte es durchaus mehrere Minima geben; unser Variationsansatz $\sum_m \sum_\lambda \frac{\partial \langle \hat{H} \rangle_0}{\partial k_{m\lambda}} \delta k_{m\lambda} = 0$ nutzt lediglich die Stationarität und kann damit auch nur ein lokales Minimum liefern. Jede Näherung eines Zweiteilchenoperators durch einen Einteilchenoperator, die den Grundzustand optimiert, muß damit von der Form der HF-Näherung sein, egal, ob das Minimum lokal oder global ist. Aus den evt. möglichen mehreren Minima und damit mehreren selbstkonsistenten Lösungen der HF-Gleichung das eigentliche globale Minimum herauszufinden, ist etwas, das der Selbstkonsistenzalgorithmus zusätzlich leisten muß.

⁵Aus der Eigenwertgleichung $\hat{H}_{\text{HF}} |\{\lambda\}\rangle = E_\lambda |\{\lambda\}\rangle$ folgt mit

$$\begin{aligned} \sum_{i,k,\mu,\nu} H_{ik} k_{i\mu} k_{k\nu} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_{\lambda_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\lambda_N}^\dagger |0\rangle &= \sum_{i,k} \sum_{\mu=\lambda_1}^{\lambda_N} H_{ik} k_{i\mu} k_{k\mu} + \sum_{i,k} \sum_{\mu \neq \lambda_1 \dots \lambda_N} \sum_{\nu=\lambda_1}^{\lambda_N} H_{ik} k_{i\mu} k_{k\nu} \\ &= \sum_{\mu=\lambda_1}^{\lambda_N} \epsilon_\mu \sum_i k_{i\mu} k_{i\mu} + \underbrace{\sum_{i,k} \sum_{\mu \neq \lambda_1 \dots \lambda_N} \sum_{\nu=\lambda_1}^{\lambda_N} \epsilon_\nu \sum_i k_{i\nu} k_{i\mu}}_0 , \end{aligned}$$

also (wegen Orthogonalität der $k_{i\mu}$) $E_\lambda = \sum_{\mu=1}^N \epsilon_{\lambda_\mu}$.

Eine Bemerkung zu Energien bei der Hartree-Fock-Naherung

Die HF-Naherung liefert zwar den bestmoglichen aus Slaterzustanden von Einteilchenzustanden konstruierbaren Grundzustand $|\{0\}\rangle$ des Vielteilchensystems, die HF-Grundzustandsenergie

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}_{\text{HF}} \rangle_0 &= E_0^{\text{HF}} = \sum_{\mu=1}^N \epsilon_{\mu} \\ &= \sum_i \sum_k \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle_0 H_{ik} + 2 \sum_i \sum_k H_{iikk} \left(\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \rangle_0 \langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \rangle_0 - \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle_0 \langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \rangle_0 \right) \end{aligned}$$

ist jedoch nicht die beste Naherung fur die Grundzustandsenergie des Vielteilchensystems. Die beste Naherung ist stattdessen

$$\langle \hat{H} \rangle_0 = \sum_i \sum_k \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle_0 H_{ik} + \sum_i \sum_k H_{iikk} \left(\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \rangle_0 \langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \rangle_0 - \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle_0 \langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \rangle_0 \right),$$

also der Erwartungswert des exakten Vielteilchen-Hamiltonoperators, gebildet mit dem HF-Grundzustand, d.h. genau der Ausdruck, der zur Herleitung der HF-Naherung im Abschnitt 2.1. minimiert wurde.

Die beiden Energien unterscheiden sich um

$$\langle \hat{H} \rangle_0 - \langle \hat{H}_{\text{HF}} \rangle_0 = \sum_i \sum_k H_{iikk} \left(-\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \rangle_0 \langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \rangle_0 + \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle_0 \langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \rangle_0 \right).$$

Man kann den HF-Hamiltonoperator nun von vornherein durch Addition dieses Terms so korrigieren, da $\langle \hat{H}_{\text{HF}} \rangle_0$ mit $\langle \hat{H} \rangle_0$ bereinstimmt (korrigierte HF-Naherung). Da der Zusatzterm nur aus Erwartungswerten besteht und nicht in die Diagonalisierung eingeht, ndert sich weder etwas an der Selbstkonsistenzschleife noch an den HF-Einteilchenzustanden. Ebenso gibt es bei beliebigen Energiedifferenzen zwischen Anregungen und damit z.B. bei den relativen Energien der angeregten HF-Zustande bzw. bei den Energien von Einteilchenanregungen zwischen der HF-Naherung und der korrigierten HF-Naherung keinen Unterschied.

2.3 Die Grenzfalle $t/U \rightarrow \infty$ und $t \rightarrow 0$

1. Mean-Field-Grenzfall $t/U \rightarrow \infty$ (Anderson-Modell)

Im Mean-Field-Grenzfall werden exakter Hamilton-Operator und HF-Naherungsoperator gleich dem Hamilton-Operator des Anderson-Modells der Lokalisierung. Hier liegt von vornherein eine Einteilchentheorie vor, und die HF-Naherung liefert sowohl die Zustande als auch alle Energien richtig.

2. Klassischer Grenzfall $t \rightarrow 0$

Fur den anderen Grenzfall $t \rightarrow 0$, dem klassischen Coulomb-Glas, ist die HF-Naherung exakt in dem Sinn, da die klassischen Vielteilchenzustande auch Eigenzustande des HF-Hamiltonoperators sind. Ob die HF-Naherung im Grenzfall $t \rightarrow 0$ tatsachlich den klassischen Vielteilchengrundzustand und damit das globale Minimum erreicht, hangt von

der Energielandschaft des klassischen Coulomb-Glases und von der Leistungsfähigkeit der Selbstkonsistenzschleife ab. Bei nicht zu großen Systemen ist es für den von uns verwendeten Algorithmus immer der Fall.

Während die korrigierte HF-Grundzustandsenergie im klassischen Grenzfall mit der Grundzustandsenergie der exakten Lösung übereinstimmt, beschreibt das HF-Verfahren die relative Lage der Energien der angeregten Zustände falsch (siehe Abschnitt 3.1.). Keinen Unterschied gibt es dagegen im klassischen Grenzfall zwischen exakter Lösung und HF-Näherung bei den relativen Energien von *Einteilchenanregungen* aus dem Grundzustand des Systems mit N Teilchen. Das sei am Beispiel der Energie der niederenergetischsten Einteilchenanregung $E_0^{N+1} - E_0^N$ gezeigt:

$$\begin{aligned} E_{0\text{ HF}}^{N+1} - E_{0\text{ HF}}^N &= \Delta E'' + 2 \sum_{n=0_1}^{0_N} H_{i_{N+1}i_{N+1}nn} \\ E_{0\text{ ex}}^{N+1} - E_{0\text{ ex}}^N &= \Delta E'' + \sum_{n=0_1}^{0_N} H_{i_{N+1}i_{N+1}nn} + \sum_{m=0_1}^{0_N} H_{i_{N+1}i_{N+1}mm} \\ &= \Delta E'' + 2 \sum_{n=0_1}^{0_N} H_{i_{N+1}i_{N+1}nn} = E_0^{N+1}(\text{HF}) - E_0^N(\text{HF}), \end{aligned}$$

wobei $\Delta E''$ die Energierterme bezeichnet, die in beiden Fällen unmittelbar gleich sind. Ursache dafür ist gerade die Nichtselbstkonsistenz der durch die Einteilchenanregung aus dem HF-Grundzustand entstandenen Zustände.

Insgesamt kann man damit feststellen: Bei der HF-Näherung werden im klassischen Grenzfall nur die Energien von Einteilchenanregungen aus dem Grundzustand richtig kalkuliert (und damit physikalische Größen wie die Einteilchenzustandsdichte ⁶), ansonsten aber weder die Energien der Zustände selbst noch die relative Lage der angeregten Zustände $E_\lambda^N - E_0^N$.

2.4 Untersuchte Systeme und numerische Probleme

1. Untersuchte Systeme:

Die Rechnungen erfolgten in 3d für Systeme mit bis zu $g = 10^3$ Gitterplätzen bei einer Wechselwirkungsstärke von $U = 1$. Die betrachteten Transferintegrale erstreckten sich von $t = 0$, dem klassischen Grenzfall, bis $t = 0.7$, was sicher im metallischen Bereich liegt. Das Zufallspotential wurde aus einer Kastenverteilung der Breite $W_0 = 1$ genommen. Alle Größen wurden über ca. 100 Realisierungen des Zufallspotentials gemittelt.

Die Bandfüllungen K lagen im Bereich von $K = \frac{1}{2}$ bis $K = \frac{15}{16}$, was auf Grund der Teilchen-Loch-Symmetrie bei Mittelung über viele Realisierungen auch den Bereich von $K = \frac{1}{2}$ bis $K = \frac{1}{16}$ abdeckt.

⁶Davon kann man sich auch noch auf andere Weise überzeugen:

$$H_{\text{HF}}^{\text{kl.Limit}} = \sum_i n_i \phi_i + \sum_i \sum_k \frac{n_i(n_k - K)}{r_{ik}} = \sum_i n_i \epsilon_i \quad \text{mit } \epsilon_i = \phi_i + \sum_k \frac{(n_k - K)}{r_{ik}}$$

als Einteilchenenergie. Das ist genau das, was sich im klassischen Coulomb-Glas auch ergibt. Wenn die HF-Näherung das globale Minimum findet, stimmen die Besetzungszahlen des HF-Grundzustands und des exakten Grundzustands und damit auch die Einteilchenenergien überein.

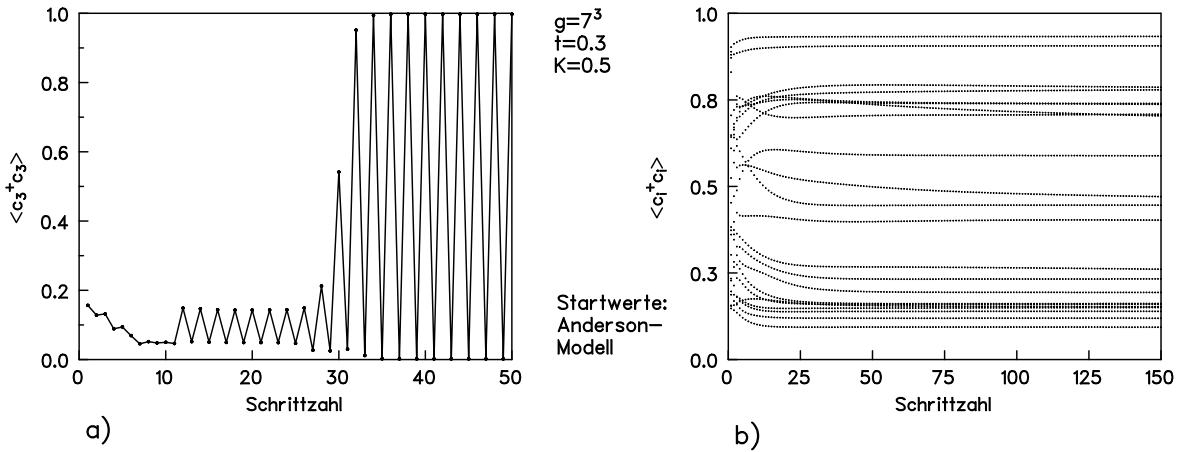


Abb. 2.2: a) Grenzyklus einer ausgewahlten Besetzungszahl bei einem System mit $g = 7^3$ Gitterplatzen ohne Zumischung; b) ausgewahlte Besetzungszahlen desselben Systems bei einer Zumischung von 50%.

2. „Zumischungstrick“:

Wird die HF-Selbstkonsistenzschleife in der abgebildeten Form (siehe Abb. 2.1) realisiert, d.h., werden die nach der Diagonalisierung ermittelten neuen Grundzustandserwartungswerte direkt als Startwerte fur den nachsten Zyklus herangezogen, funktioniert die Schleife reibungslos nur bis zu Systemgroen im Bereich von $g = 4^3$.

Fur groere Systeme kommt es zu einem Aufschaukeln, das sich im Hin- und Herspringen von Eigenwerten und Besetzungszahlen mit jedem neuen Zyklus auert. Das System wechselt dabei in einem stabilen Grenzyklus standig zwischen zwei nichtselbstkonsistenten Zustanden, die so strukturiert sind, da die Erwartungswerte $\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \rangle$, die sich in dem einen Zustand ergeben, genau die Startwerte fur den anderen Zustand sind und umgekehrt (siehe Abb. 2.2 a)). Mit wachsender Systemgroe nimmt die Wahrscheinlichkeit zu, da die Selbstkonsistenzschleife einen Grenzyklus ausbildet, weil die Zahl der nichtselbstkonsistenten Vielteilchenzustande, die durch unterschiedliche Besetzung der Einteilchenzustande gebildet werden konnen, stark anwachst und sich der energetische Abstand zwischen ihnen entsprechend vermindert. Es kann damit eher zu einem „Überschwingen“ der selbstkonsistenten Losung kommen, in dessen Folge sich der Grenzyklus ausbildet.

Abhilfe schafft der „Zumischungstrick“: Die mogliche Abweichung der Erwartungswerte vor und nach der Diagonalisierung wird verkleinert, indem der neue Startwert nicht direkt aus den Erwartungswerten nach der Diagonalisierung gebildet wird, sondern aus einer Mischung zwischen dem alten Startwert und den neu berechneten Erwartungswerten. Eigenwerte und Besetzungszahlen konvergieren jetzt zwar langsamer, dafur nimmt die Wahrscheinlichkeit fur einen Grenzyklus aber ab, weil sich der energetische Abstand von aufeinanderfolgenden Zustanden bei der Konvergenz vermindert (siehe Abb. 2.2 b)).

Es erweist sich als notwendig, bei Systemgroen von $g = 10^3$ 90% vom alten Startwert zuzumischen. Mit einer genugend erhohten Zumischung des alten Startwerts kann man die Selbstkonsistenzschleife immer zur Konvergenz bringen und Grenzyklen vermeiden. Einen Überblick über die notwendigen Zumischungen in Abhangigkeit von der Systemgroe gibt Abb. 2.3 a).

3. Abbruchkriterium der Selbstkonsistenzschleife:

Ein weiteres Problem ist es, überhaupt festzustellen, wann Konvergenz erreicht ist und

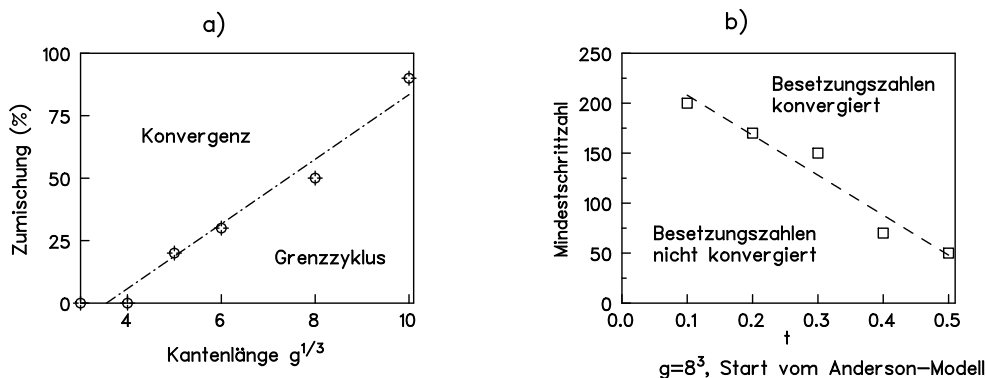


Abb. 2.3: a) Notwendige Zumischung vom alten Startwert in Abhängigkeit von der Systemgröße; b) notwendige Schrittzahl bis zu hinreichender Konvergenz für ein System von $g = 8^3$ Gitterplätzen in Abhängigkeit vom Transfermatrixelement

die Selbstkonsistenzschleife angehalten werden kann. Grundsätzlich können dazu beliebige physikalische Größen vor und nach der Diagonalisierung ausgewertet werden.

Es liegt jedoch nahe, sowieso in der Selbstkonsistenzschleife berechnete Größen heranzuziehen. Man kann z.B. die mittleren Differenzen zwischen den energetisch geordneten Eigenwerten bzw. zwischen den Besetzungszahlen vor und nach der Diagonalisierung mit einem festen Abbruchkriterium vergleichen. Praktisch muß diese Schrankendefinition genau überlegt werden:

Benutzt man die mittleren Differenzen der energetisch geordneten Eigenwerte als Konvergenzkriterium, ist die Gefahr groß, zu früh abzubrechen: Die Eigenwerte konvergieren zwar gleichmäßig, ihre relative Änderung wird aber schnell kleiner als die der Besetzungszahlen (siehe Abb. 2.4) und der anderen Erwartungswerte⁷. Da uns Lokalisierungs- und Transportphänomene interessieren, ist damit eine Konvergenz lediglich im Energieerwartungswert zu grob. Besser ist es, die Besetzungszahlen als Konvergenzkriterium heranzuziehen. Je größer die Zumischung wird, umso langsamer konvergieren die Besetzungszahlen, und umso restriktiver muß die Schrankenfestlegung sein. Die Erfahrung zeigt, daß es schwierig ist, bei den größeren Systemen über die Schrankenwahl einen optimalen Kompromiß zwischen Genauigkeit der Konvergenz und der notwendigen Rechenzeit zu finden: Wählt man die Schranke zu groß, ist das System nicht konvergiert, wählt man sie zu klein, wird die Rechenzeit unverhältnismäßig verlängert, obwohl sich die einzelnen Besetzungszahlen nur noch um wenige Prozent verändern. Einen Ausweg bietet die Rechnung mit festen Schrittzahlen: Konvergenzuntersuchungen für verschiedene Systemgrößen, Transfermatrixelemente und Realisierungen des Zufallspotentials geben eine gute Vorstellung von optimalen Schrittzahlen, nach denen die Konvergenz hinreichend gut ist. Mit diesen Schrittzahlen werden dann alle weiteren Realisierungen gerechnet. Die notwendige Schrittzahl bis zur Konvergenz nimmt mit wachsendem Transfermatrixelement ab, weil die Änderungen der Besetzungszahlen pro Schritt zunehmen. Abb. 2.3 b) zeigt notwendige Schrittzahlen bis zu hinreichender Konvergenz⁸ für ein System mit 8^3 Gitterplätzen in Abhängigkeit von t .

Eine Kontrolle der Konvergenzgüte ist möglich, wenn für dieselbe Realisierung des Zufallspotentials sowohl mit den $\langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \rangle$ aus dem Anderson-Modell der Lokalisierung als auch aus dem klassischen Coulomb-Glas gestartet wird. Nach Ablauf der Konvergenzschrittzahl

⁷Das wird verständlich, wenn man die Störungstheorie betrachtet: Die Energie ist eine „robuste“ Größe; für die Energienäherung in der ersten Ordnung reicht bereits die Näherung des Zustands nullter Ordnung.

⁸maximale Änderung der *einzelnen* Besetzungszahlen pro Schritt noch 1%

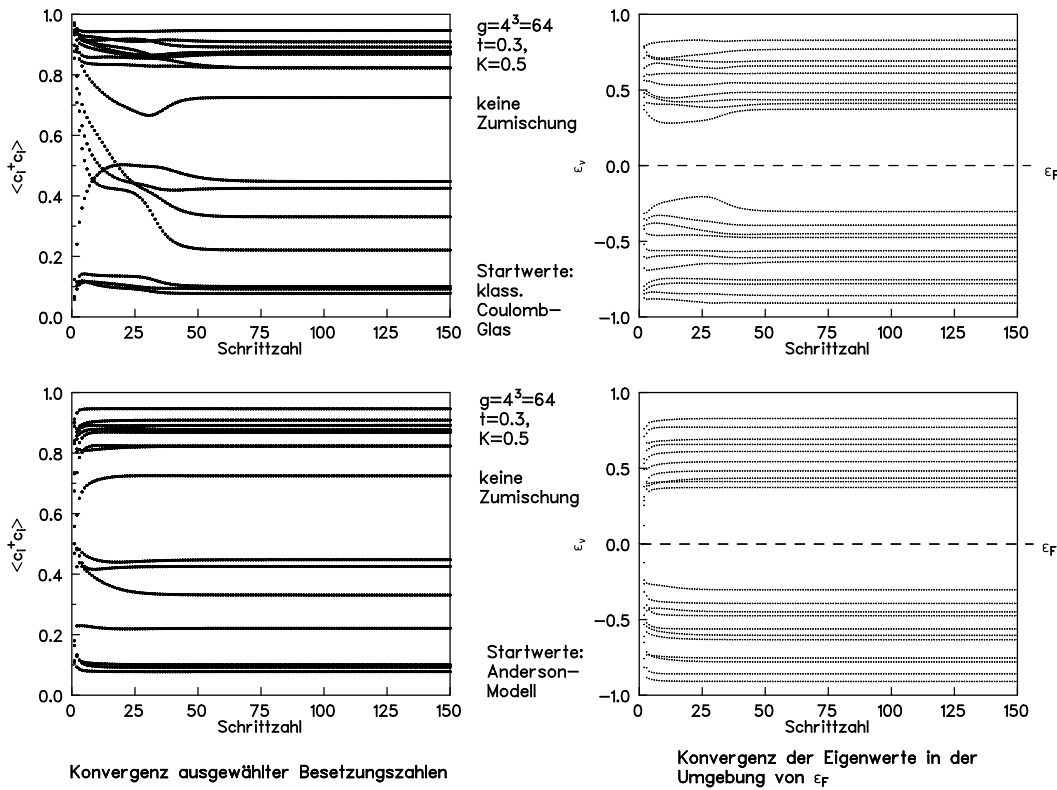


Abb. 2.4: Konvergenz von Eigenwerten und Besetzungszahlen für ein festes Zufallspotential beim Start vom Anderson-Modell der Lokalisierung bzw. vom klassischen Coulomb-Glas

sollten die Besetzungszahlen bei beiden Rechnungen weitgehend übereinstimmen (siehe Abb. 2.4). Bei unseren Rechnungen mit Systemgrößen bis 10^3 ist das so gut wie immer erfüllt.⁹

2.5 Ergebnisse: Einteilchenzustandsdichte

Für die Einteilchenzustandsdichte eines effektiv wechselwirkungsfreien Systems ergibt sich (siehe Anhang 1):

$$g(\epsilon) = \frac{1}{g} \sum_{\nu=1}^g \delta(\epsilon_\nu - \epsilon).$$

Numerisch realisiert man dies durch die Einordnung der Einteilchenenergien in ein Histogramm. Da in kleinen Gittern wie unseren die chemischen Potentiale zwischen verschiedenen Realisierungen des Zufallspotentials ziemlich stark schwanken, weil in jeder einzelnen Realisierung jeweils nur wenige Werte des Zufallspotentials aus der Verteilung herausgegriffen werden, muß noch ein sogenanntes μ -Sampling vorgenommen werden [BEGS79]:

⁹Es ist nur dann nicht erfüllt, wenn die HF-Näherung nicht das globale Minimum findet, sondern in einem lokalen Minimum verbleibt (s.o.), was aber im Bereich unserer Systemgrößen bis 10^3 nur äußerst selten passiert.

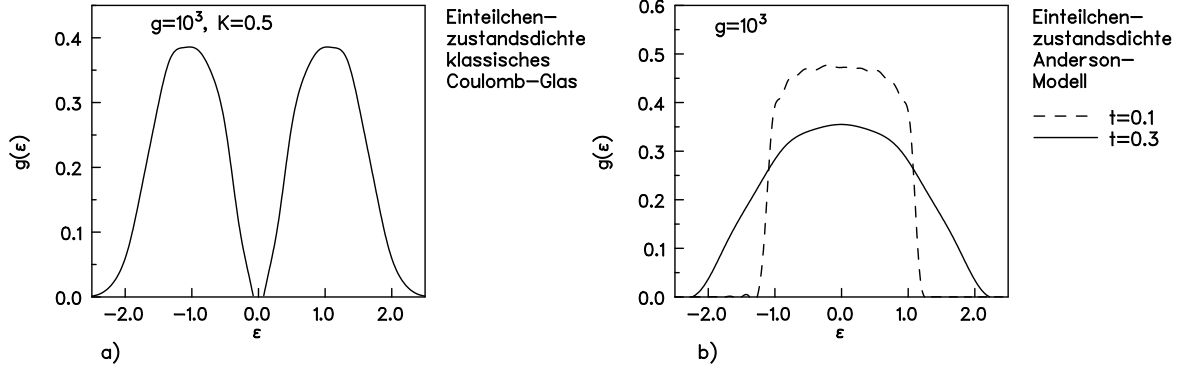


Abb. 2.5: Einteilchenzustandsdichten für die Grenzfälle des Quanten-Coulomb-Glases: a) klassisches Coulomb-Glas; man beachte die harte Lücke der Breite ~ 0.1 , die ein Effekt der endlichen Systemgröße ist, b) Anderson-Modell der Lokalisierung.

Mittelt man direkt, können die Schwankungen des chemischen Potentials vorhandene Strukturen in der Einteilchenzustandsdichte überlagern. Deshalb wird zunächst die mittlere Fermienergie berechnet und dann die Energieskala jeder Realisierung so verschoben, daß ihre Fermienergie mit der mittleren Fermienergie übereinstimmt.

Die Einteilchenzustandsdichte ist aus mehreren Gründen eine Schlüsselgröße bei der Untersuchung des Quanten-Coulomb-Glases:

1.) Sie ist eine in den beiden Grenzfällen des Quanten-Coulomb-Glases, dem Anderson-Modell der Lokalisierung und dem klassischen Coulomb-Glas, sehr gut untersuchte Größe: Beim Anderson-Modell ist die Einteilchenzustandsdichte am größten in der Bandmitte und fällt zu den Bandkanten hin ab (siehe Abb. 2.5 b)). Je größer das Verhältnis zwischen Transfermatrixelement und Unordnungsstärke, t/W_0 , ist, umso breiter wird das Band, und umso flacher verläuft die Kurve. Die Fermienergie kann wegen der fehlenden Wechselwirkung durch Veränderungen der Besetzung beliebig verändert werden, ohne daß sich die Form der Einteilchenzustandsdichte ändert.

Die Einteilchenzustandsdichte des klassischen Coulomb-Glases weist dagegen die charakteristische Coulomb-Lücke an der Fermienergie auf (siehe Abb. 2.5 a)). Ein einfaches und unmittelbares Verständnis dafür, wieso diese Lücke an der Fermienergie im klassischen Fall bei einer Coulomb-Wechselwirkung beliebiger Stärke immer auftreten muß, liefert die ursprüngliche Argumentation von Efros und Sklovskii [ES75].¹⁰ Von besonderem Inter-

¹⁰Efros und Shklovskii argumentieren folgendermaßen: Das klassische Coulomb-Glas sei im Grundzustand. Wir betrachten jetzt einen Elektronensprung von einem besetzten Gitterplatz i zu einem unbesetzten Gitterplatz j . Die Gesamtenergie des Systems vor dem Sprung beträgt

$$E_{\text{vor}} = E_{01} + \sum_k \frac{(1-K)(n_k - K)}{r_{ik}} + \sum_k \frac{-K(n_k - K)}{r_{kj}} + \frac{(1-K)(-K)}{r_{ij}} + \phi_i,$$

nach dem Sprung aber

$$E_{\text{nach}} = E_{01} + \sum_{k \neq i} \frac{-K(n_k - K)}{r_{ik}} + \sum_{k \neq j} \frac{(1-K)(n_k - K)}{r_{kj}} + \frac{-K(1-K)}{r_{ij}} + \phi_j,$$

wobei E_{01} alle die Beiträge sein sollen, bei denen weder der Platz i noch der Platz j eine Rolle spielt. Die Energiedifferenz $E_{\text{vor}} - E_{\text{nach}}$,

$$E_{\text{vor}} - E_{\text{nach}} = \Delta E = \phi_i + \sum_{k \neq i} \frac{n_k - K}{r_{ik}} - \left(\phi_j + \sum_{k \neq j} \frac{n_k - K}{r_{kj}} \right)$$

esse ist die Frage, ob die Coulomb-Lücke im isolierenden Bereich des Quanten-Coulomb-Glases intakt bleibt. Dieser Punkt hat zentrale Bedeutung für die Berechtigung der Anwendung klassischer Modelle auf Experimente relativ nahe am MIT, wo die Überlapp-Erwartungswerte zwischen verschiedenen Störstellen nicht mehr vernachlässigt werden können (siehe Einleitung).

2.) Über die Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases kann eine Vermutung der diagrammatischen Störungstheorie überprüft werden: Dort wird aus Untersuchungen im metallischen Bereich darauf geschlossen, daß der Wert der Einteilchenzustandsdichte an der Fermienergie im wechselwirkenden System Ordnungsparameter für den unordnungsinduzierten MIT sein könnte [KB94]. $g(\epsilon_F)$ sollte danach im gesamten isolierenden Bereich Null sein und am MIT dann einen endlichen Wert annehmen.

3.) Es ist von Interesse, ob es im metallischen Bereich die von der diagrammatischen Störungstheorie vorausgesagte Coulomb-Anomalie gibt, eine wurzelförmige Nichtanalytizität der Einteilchenzustandsdichte an der Fermienergie vor endlichem Hintergrund, und ob Coulomb-Anomalie und Coulomb-Lücke möglicherweise Manifestationen desselben physikalischen Phänomens auf der metallischen bzw. isolierenden Seite des MIT sind.

4.) In einem effektiv wechselwirkungsfreien Systemen wie dem Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung ist die Einteilchenzustandsdichte außerdem auch für Transporteigenschaften relevant, da alle höheren Anregungen aus Einteilchenanregungen überlagert werden können und die Lokalisierung von Einteilchenzuständen direkt mit der Einteilchenzustandsdichte zusammenhängt.

Die numerischen Ergebnisse für die Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung sind in den Abb. 2.6 und 2.7 gezeigt. Für Halbfüllung, also $K = 0.5$, ist der Hamilton-Operator Teilchen-Loch-symmetrisch, und die Fermienergie hängt nicht vom Transfermatrixelement t ab. Für ein dreiviertel gefülltes Band, $K = 0.75$, nimmt die Fermienergie dagegen mit wachsendem t zu. Die Verschiebung der Position der Lücke in Abb. 2.7 mit wachsendem t zur Bandkante zeigt genau diese Verschiebung der Fermienergie an. Für die am Anfang aufgeworfenen Fragen ist besonders das Verhalten der Einteilchenzustandsdichte in der unmittelbaren Umgebung der Fermienergie wichtig. Wir wollen zunächst unsere Erwartungen diskutieren. Dabei benutzen wir wesentlich, daß der HF-Hamilton-Operator ein Einteilchenoperator ist, wir also im Einteilchenbild argumentieren können: Für kleine Transfermatrixelemente befindet sich das System sicher noch in der isolierenden Phase. Die Elektronen im Einteilchenbild sind damit lokalisiert, wenngleich auch nicht mehr nur auf einem Gitterplatz, sondern, wegen des kinetischen Terms $-t \sum_{\langle i,k \rangle} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k$ im HF-Hamilton-Operator, mit einer bestimmten Lokalisierungslänge λ_{Lok} auf mehreren

$$= \epsilon_i - \epsilon_j + \frac{1}{r_{ij}},$$

(mit $\epsilon_i = \phi_i + \sum_{k \neq i} \frac{1-K}{r_{ik}}$ und $\epsilon_j = \phi_j + \sum_{k \neq j} \frac{-K}{r_{kj}}$ als Einteilchenenergien auf den Plätzen i und j) muß größer als Null sein, denn sonst wäre das System vor dem Sprung nicht im Grundzustand gewesen. Man erhält so eine Forderung für die Einteilchenenergien von besetzten und leeren Plätzen des klassischen Coulomb-Glases im Grundzustand:

$$\epsilon_j - \epsilon_i - \frac{1}{r_{ij}} > 0 \quad \text{bzw.} \quad |r_{ij}| > \frac{1}{\epsilon},$$

dabei ist ϵ der energetische Abstand der Plätze über die Fermi-Energie hinweg. Rücken ϵ_i und ϵ_j immer dichter an die Fermienergie heran, muß der räumliche Abstand der Plätze i und j immer größer werden. Im Grenzfall $\epsilon \rightarrow 0$, d.h. $\epsilon_i \rightarrow \epsilon_j \rightarrow \epsilon_F$, muß $|r_{ij}| \rightarrow \infty$ gelten. Die Zahl der Einteilchenenergien in der energetischen Umgebung der Breite ϵ um die Fermienergie verhält sich damit wie $(\frac{1}{\epsilon})^{-d}$, wenn d die räumliche Dimension des Systems ist. Direkt an der Fermienergie kann es daher keine Einteilchenenergien geben. Eine Verallgemeinerung der Argumentation führt schließlich zur SCE [E76, EBG87], mit der sich der Verlauf der Einteilchenzustandsdichte in der Umgebung der Fermienergie direkt berechnen läßt.

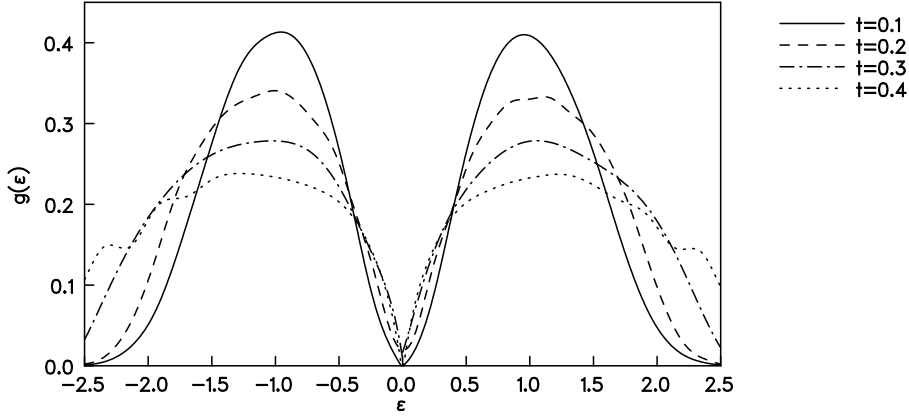


Abb. 2.6: Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung mit $g = 10^3$ bei Halbfüllung ($K = 0.5$)

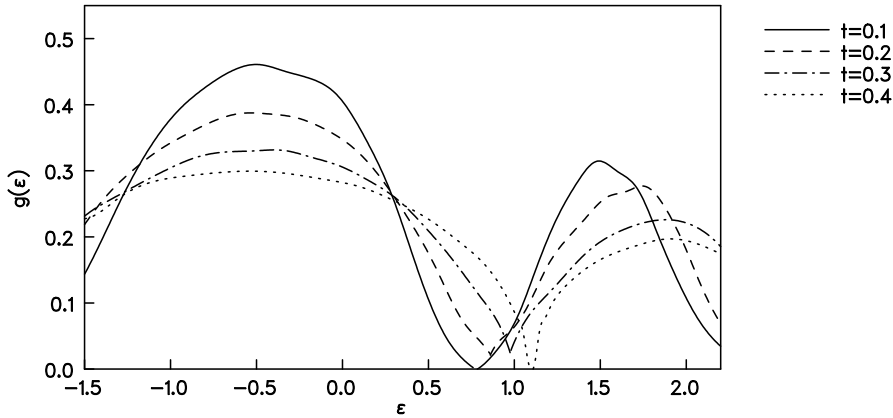


Abb. 2.7: Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung mit $g = 10^3$ und drei-viertel gefülltem Band ($K = 0.25$)

Gitterplätzen. Die Coulomb-Wechselwirkung im Effektivpotential des Hartree-Terms im HF-Hamilton-Operator kann damit auf Längenskalen bis λ_{Lok} durch Hybridisierung von Elektronen abgeschirmt werden, nicht jedoch auf größeren Längenskalen. Der Austausch-term liefert wegen des Überlapperungswertes $\langle \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_i \rangle$ im Zähler, der für Abstände $|r_{ij}| > \lambda_{\text{Lok}}$ sehr schnell gegen Null geht, nur auf Längenskalen bis λ_{Lok} einen Anteil. Damit liegt folgende Situation vor:

Die Physik des Systems auf Längenskalen bis λ_{Lok} wird im wesentlichen vom Austausch-term beschrieben, der Hartree-Term wird auf diesen kurzen Abständen abgeschirmt. Auf Längenskalen größer als λ_{Lok} wird die Physik dagegen nur vom Hartree-Term beschrieben, und das System kann wie ein klassisches System behandelt werden.

Da die HF-Näherung im klassischen Limes die exakte Einteilchenzustandsdichte liefert, sollte die Einteilchenzustandsdichte damit eine Coulomb-Lücke aufweisen. Um den Bereich der Coulomb-Lücke abzuschätzen, benutzen wir die Argumentation von Efros und Shklovski: Abstände $|r_{ij}| > \lambda_{\text{Lok}}$, entsprechen Einteilchenenergien im Energiebereich $|\epsilon - \epsilon_F| \leq \frac{1}{\lambda_{\text{Lok}}}$ um die Fermienergie.

Für Abstände $|r_{ij}| < \lambda_{\text{Lok}}$, d.h. für Einteilchenenergien $|\epsilon - \epsilon_F| > \frac{1}{\lambda_{\text{Lok}}}$, ist das System nicht klassisch beschreibbar, und in der Einteilchenzustandsdichte ergibt sich ein Verhalten, das durch den Austausch-term bestimmt wird.

Diese Argumentation bleibt mit wachsendem t gültig, solange λ_{Lok} der Elektronen nur

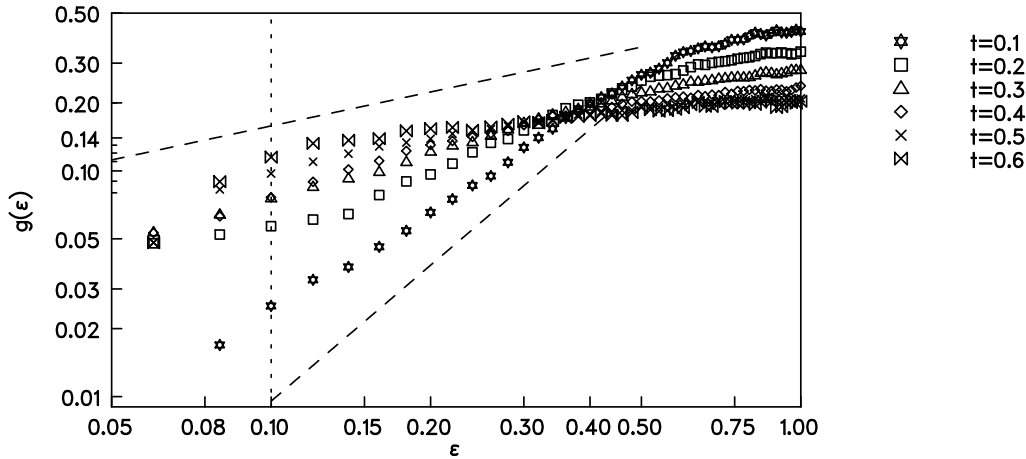


Abb. 2.8: Doppelt-logarithmische Darstellung der Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung mit $g = 10^3$ für Halbfüllung ($K = 0.5$). Die untere gestrichelte Linie stellt das analytische Ergebnis [E76] für die Einteilchenzustandsdichte im klassischen Coulomb-Glas ($t = 0$) dar, die obere gestrichelte Linie entspricht einem Quadratwurzelverhalten mit beliebigem Vorfaktor, was von der Coulomb-Anomalie erwartet wird. Die Punktlinie begrenzt den Bereich, in dem die Daten wegen des Abschneidens der Coulomb-Wechselwirkung im endlichen System nicht mehr verlässlich sind.

endlich bleibt, d.h. das System isolierend ist. Die einzige Veränderung mit wachsendem t ist, daß der Bereich um die Fermienergie, in dem die Coulomb-Lücke auftritt, immer enger wird, und sich der vom Austauschterm bestimmte Bereich der Quanteneffekte immer weiter vergrößert. Erst direkt am MIT bricht die Coulomb-Lücke vollkommen zusammen. Die Elektronen im Einteilchenbild sind jetzt delokalisiert, d.h., λ_{Lok} ist unendlich groß, und der Hartree-Terms wird auf jeder Längenskala abgeschirmt. Andererseits ist der Austauschterm jetzt auf beliebig großen Längenskalen stark. Der klassische Bereich verschwindet so, und die Physik des Systems wird auch unmittelbar an der Fermienergie vollständig von Quanteneffekten bestimmt. Geht man davon aus, daß es im metallischen Bereich die vorhergesagte Coulomb-Anomalie gibt, muß sie damit wesentlich vom Austauschterm verursacht sein.

Nun haben die gerechneten Systeme eine endliche Größe. Das bedeutet, daß es einen größten möglichen Abstand zweier Plätze im System gibt. Im klassischen Coulomb-Glas führt dieser größte mögliche Abstand $|r_{\text{max}}|$ zu einer minimal möglichen potentiellen Energie und damit zu einer harten Lücke in der Einteilchenzustandsdichte, da es unterhalb von (siehe wiederum die Argumentation von Efros und Sklovskii) $\frac{1}{|r_{\text{max}}|}$ keine möglichen Einteilchenenergien mehr gibt. Im Quanten-Coulomb-Glas entspricht der maximale Abstand einem Abschneiden der Coulomb-Wechselwirkung bei Distanzen $\approx |r_{\text{max}}|$ und damit Energien $U_{ij} \sim \frac{1}{|r_{\text{max}}|}$, unterhalb von denen die Resultate nicht zuverlässig sind. (Für $g = 10^3$, also einer Kantenlänge von $L = 10$ ergibt sich $|r_{\text{max}}| \sim 10$, also $U_{ij} \sim 0.1$, siehe Abb. 2.5 a.) Dieser Effekt verfälscht in unseren endlichen Systemen den oben diskutierten Verlauf. In den Abb. 2.6 und 2.7 ist aber gut zu sehen, wie sich der parabolische Verlauf der Zustandsdichte in der Coulomb-Lücke um die Fermienergie (konkav) mit wachsenden t auf einen immer kleineren Bereich verengt, bis er schließlich verschwindet, und wie die wurzelförmige Coulomb-Anomalie (konvex) außerhalb dieses Bereiches immer dominierender wird.

Noch deutlicher zeigt eine doppelt-logarithmische Darstellung der Einteilchenzustandsdichten den vorhergesagten Übergang (siehe Abb. 2.8): Für $t = 0.1$ findet man außer für sehr große Abstände von der Fermienergie ein Potenzverhalten mit einem Exponenten nahe 2, wie für die Coulomb-Lücke in 3d erwartet. Erst außen weit im Band wird der Exponent deutlich kleiner. Mit wachsendem t wird der Exponent auch näher an der Fermienergie

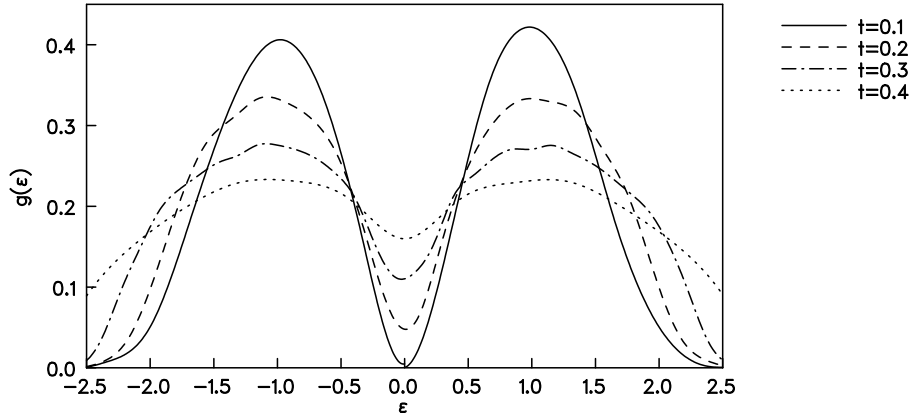


Abb. 2.9: Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in Hartree-Näherung mit $g = 10^3$ bei Halbfüllung ($K = 0.5$)

kleiner und nähert sich immer mehr 0.5, was der Coulomb-Anomalie mit kleinem Hintergrund entspricht. Ein weiteres Indiz für die Richtigkeit der dargestellten Überlegungen zeigt Abb. 2.9: Hier wurde das Quanten-Coulomb-Glas in Hartree-Näherung gerechnet, d.h. ohne Austauschterm. Man sieht deutlich, daß es kein Coulomb-Anomalie Verhalten mehr gibt. Stattdessen dominiert zunehmend der kinetische Term, und im metallischen Bereich bei völliger Abschirmung des Hartree-Terms verschwinden die Strukturen in der Zustandsdichte bei ϵ_F immer mehr.

Folgende Thesen sollen die Ergebnisse zur Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung zusammenfassen:

- Die Einteilchenzustandsdichte zeigt im gesamten isolierenden Bereich eine Coulomb-Lücke, die sich am Phasenübergangspunkt zu einer Coulomb-Anomalie umwandelt.
- Die Coulomb-Lücke auf der isolierenden Seite des MIT ist Resultat des Hartree-Terms, während die Coulomb-Anomalie auf der metallischen Seite vom Austauschterm hervorgerufen wird.

2.6 Ergebnisse: Lokalisierungseigenschaften

Die üblichen Kriterien für Lokalisierung sind nur für nichtwechselwirkende Elektronen definiert, d.h. für Einteilchenzustände. Eine Verallgemeinerung auf wechselwirkende Systeme und damit auf Vielteilchenzustände ist nicht ohne weiteres einsichtig (siehe Kapitel 3). ABER: Durch die Mittelung über die Korrelationen wird in HF-Näherung aus dem Vielteilchenproblem mit Wechselwirkung ein Einteilchenproblem mit selbstkonsistentem Effektivpotential. Für solche effektiven Einteilchenzustände können nun dieselben Kriterien und Verfahren wie beim Anderson-Modell der Lokalisierung angewendet werden.

Das soll im folgenden ausgeführt werden: Teil a) befaßt sich mit den inversen Partizipationszahlen der Einteilchenzustände im Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung, und in Teil b) wird das Phasendiagramm des MIT direkt untersucht, wobei die Energieniveaustatistik der Einteilchenzustände zur Bestimmung des Übergangspunktes herangezogen wird [HS93].

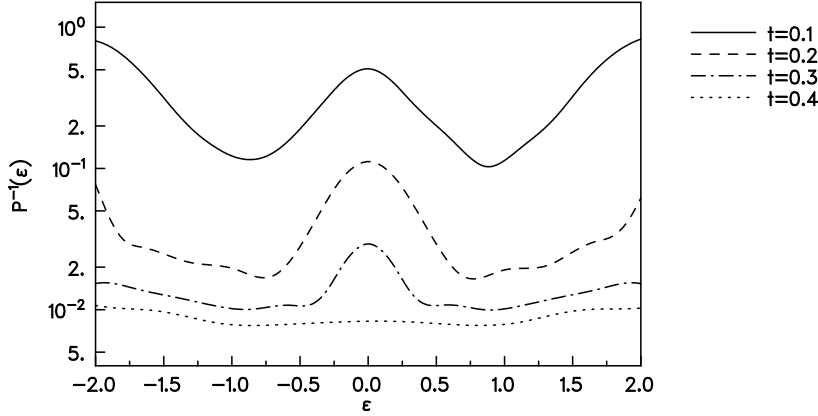


Abb. 2.10: Inverse Partizipationszahl $P^{-1}(\epsilon)$ des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Naherung (8^3 Gitterplatze) als Funktion der Einteilchenenergie bei Halbfullung ($K = 0.5$)

a) Partizipationszahlen:

Ein sehr einfaches Ma zur Untersuchung von Lokalisierungseigenschaften ist die Partizipationszahl eines Einteilchenzustandes P . Sie beschreibt, wieviele Gitterplatze von einem Einteilchenzustand $|\nu\rangle$ eingenommen werden, anschaulicher, uber wieviele Gitterplatze das Elektron in diesem Einteilchenzustand „verschmiert“ ist. Ihr Kehrwert, die inverse Partizipationszahl P^{-1} , gibt damit den Grad der raumlichen Lokalisierung des Einteilchenzustands wieder. Die inverse Partizipationszahl ist definiert als das zweite Moment der raumlichen Wahrscheinlichkeitsverteilung des Zustands auf den Gitterplatzen:

$$P_{\nu}^{-1} = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^g |\langle \nu | \hat{c}_i^{\dagger} | 0 \rangle|^4. \quad (2.4)$$

Fur einen HF-Einteilchenzustand $\hat{b}_{\nu}^{\dagger} | 0 \rangle$ wird daraus

$$P_{\nu}^{-1} = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^g |\langle 0 | \hat{b}_{\nu} \hat{c}_i^{\dagger} | 0 \rangle|^4 = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^g \left| \sum_{k=1}^g k_{k\nu} \langle 0 | \hat{c}_k \hat{c}_i^{\dagger} | 0 \rangle \right|^4 = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^g |k_{i\nu}|^4.$$

Eine sehr nutzliche Groe ist auch die energieselektive inverse Partizipationszahl, bei der uber alle Zustande mit einer bestimmten Energie ϵ gemittelt wird:

$$P^{-1}(\epsilon) = \frac{1}{g(\epsilon)} \sum_{\nu} P_{\nu}^{-1} \delta(\epsilon - \epsilon_{\nu}).$$

Technisch wird das wieder, ahnlich wie bei der Einteilchenzustandsdichte, durch Einordnen der Partizipationszahlen der Einteilchenzustande in ein Histogramm nach den Einteilchenenergien realisiert, wobei durch die Einteilchenzustandsdichte im jeweiligen Energiekanal geteilt wird. Die inverse Partizipationszahl ist sehr gut geeignet, um bei gleicher Systemgroe den Grad der Lokalisierung von Einteilchenzustanden zu vergleichen.

Die Abb. 2.10 und 2.11 zeigen Ergebnisse fur die energieselektive inverse Partizipationszahl $P^{-1}(\epsilon)$ eines Quanten-Coulomb-Glases in HF-Naherung mit $g = 8^3$ Gitterplatzen und halb- bzw. dreiviertel gefulltem Band. Bemerkenswert ist die starke Erhohung von P^{-1} fur die Einteilchenzustande in der Nahe der Fermienergie, die bis zu eine Groenordnung erreichen kann (man beachte die logarithmischen Skalen). Die Erhohung von P^{-1} entspricht einem viel starkeren Grad der Lokalisierung fur die Zustande um ϵ_F , verglichen mit dem Rest des Bandes. Wenn wir bedenken, wie die Ausdehnung von lokalisierten Zustanden im

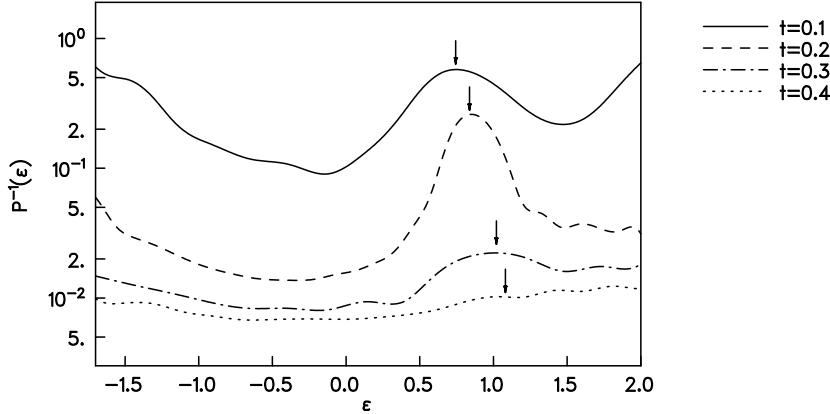


Abb. 2.11: Inverse Partizipationszahl P^{-1} des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung (8^3 Gitterplätze) als Funktion der Einteilchenenergie bei dreiviertel gefülltem Band ($K = 0.5$). Die Pfeile markieren die Lage der Fermienergie.

Einteilchenbild mit der Zustandsdichte zusammenhängt, wird schnell klar, woher dieser Effekt kommt: Eine Verringerung der Einteilchenzustandsdichte in einem bestimmten Bereich der Einteilchenenergien bedeutet, daß mit einem bestimmten Transfermatrixelement weniger Zustände hybridisiert werden können. Sie führt damit auf eine verstärkte Lokalisierung der Einteilchenzustände in diesem Energiebereich. Umgekehrt bedeutet eine Erhöhung der Einteilchenzustandsdichte in einem Energiebereich, daß mehr Zustände hybridisiert werden können, die Lokalisierung der Einteilchenzustände in diesem Energiebereich also verringert wird. Der erhöhte Lokalisierungsgrad der Einteilchenzustände um die Fermienergie im Verhältnis zu den Zuständen weiter außen im Band ist im isolierenden Bereich somit einfach eine Folge der Coulomb-Lücke in der Einteilchenzustandsdichte.

Auch die Größe des Effekts läßt sich in diesem Bild gut verstehen: Bei sehr kleinen Transfermatrixelementen können die Einteilchenzustände an sich nur wenig hybridisieren. Eine zusätzliche Reduzierung ihres Überlapps durch eine Erhöhung ihres energetischen Abstandes fällt damit nicht sehr ins Gewicht. Dementsprechend erhöht sich der Grad ihrer Lokalisierung nur schwach.

Mit wachsendem Transfermatrixelement nimmt die Lokalisierungslänge der Zustände zu, und der Einfluß der Einteilchenzustandsdichte wird stärker. Am stärksten ist der Effekt der erhöhten Lokalisierung an der Fermienergie für t im Bereich der Breite der Coulomb-Lücke ϵ_B : Die Zustände entfernt von der Fermienergie sind dann bereits beträchtlich weiter ausgedehnt, während die Hybridisierung an der Fermienergie wegen des zu großen energetischen Abstandes noch nicht möglich ist.

Für $t > \epsilon_B$ wird die Hybridisierung auch an der Fermienergie einfacher, und die Zunahme des Lokalisierungsgrads verringert sich wieder.

Wegen der Wechselwirkung kann die Fermienergie, anders als beim Anderson-Modell, nicht einfach durch Änderung der Bandfüllung durch die Einteilchenzustandsdichte „geschoben“ werden. Weil die Coulomb-Lücke immer an der Fermienergie liegt, verschieben sich mit der Fermienergie auch die am stärksten lokalisierten Einteilchenzustände durch das Band. Die inverse Partizipationszahl sieht für jede Bandfüllung anders aus, und die Zustände nahe ϵ_F sind unabhängig von der Bandfüllung immer stärker lokalisiert als im Band (siehe Abb. 2.11). Da die Coulomb-Lücke für verschiedene Bandfüllungen die gleiche Form hat, bleibt auch die Größe des Effekts ungefähr gleich.

Ein Vergleich der inversen Partizipationszahlen des Quanten-Coulomb-Glases mit denen

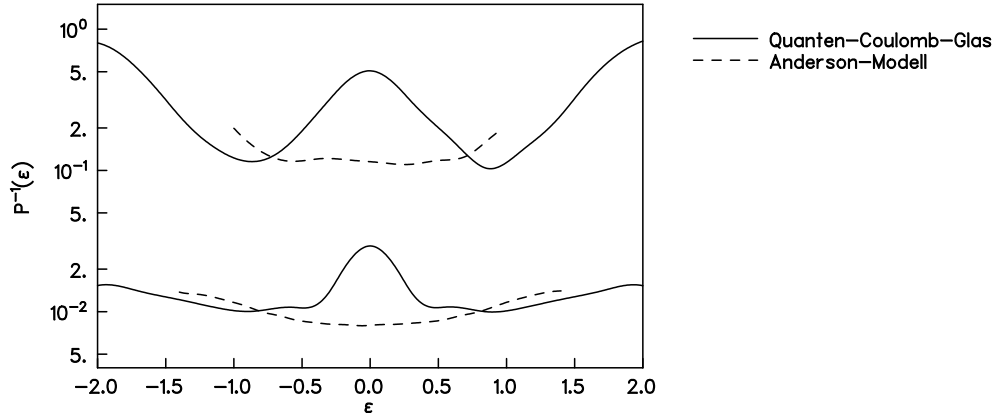


Abb. 2.12: Vergleich der inversen Partizipationszahlen P^{-1} des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung ($K = 0.5$) und des Anderson-Modells der Lokalisierung (8^3 Gitterplätze) für $t = 0.1$ (obere Linien) und $t = 0.3$ (untere Linien)

vom Anderson-Modell der Lokalisierung zeigt, daß die Elektronen im wechselwirkenden System nahe der Fermi-Energie immer stärker lokalisiert sind als im nichtwechselwirkenden Fall (siehe Abb. 2.12). Grund ist wiederum der oben bereits diskutierte Einfluß der Einteilchenzustandsdichte auf die Lokalisierungseigenschaften der Einteilchenzustände: Beim Anderson-Modell der Lokalisierung hat die Zustandsdichte in der Bandmitte ein Maximum, d.h., die Zustände in der Bandmitte sind am schwächsten lokalisiert und delokalisieren mit wachsendem t von allen Zuständen im Band zuerst. Ihre inverse Partizipationszahl bleibt dann mit weiter wachsendem t konstant, und die aller anderen Zustände fällt allmählich auf diesen Wert ab.

Da die Zustandsdichte im wechselwirkenden System wegen der Coulomb-Lücke bei ϵ_F für jede Bandfüllung kleiner ist als im Anderson-Modell, muß der Grad der Lokalisierung im wechselwirkenden System bei ϵ_F immer über dem Anderson-Wert liegen. Für festes t ist die Erhöhung am größten bei Systemen mit ϵ_F in Bandmitte, sie wird kleiner, je weiter man ϵ_F zur Bandkante schiebt, da die Zustandsdichte im Anderson-Modell abnimmt. Für feste Bandfüllung erreicht sie ihr Maximum bei $t \approx \epsilon_B$ (s.o.) und verschwindet erst, wenn alle Zustände im Quanten-Coulomb-Glas delokalisiert sind, d.h. am MIT für das Quanten-Coulomb-Glas.

Folgende Thesen sollen die Ergebnisse zur Lokalisierung aus der Analyse der inversen Partizipationszahl des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung zusammenfassen:

- Die HF-Einteilchenzustände nahe an der Fermienergie sind im isolierenden Bereich immer stärker lokalisiert als die Zustände etwas weiter weg von der Fermienergie.
- Die HF-Einteilchenzustände an der Fermienergie sind im isolierenden Bereich immer stärker lokalisiert als die Zustände des nichtwechselwirkenden Systems für dasselbe Transfermatrixelement. Der Unterschied ist am größten, wenn die Fermienergie in der Bandmitte liegt und wird für Fermienergien weiter an der Bandkante kleiner.

b) MIT-Phasendiagramm:

Ein Lokalisierungs-MIT findet in einem Einteilchensystem genau dann statt, wenn die Zustände an der Fermienergie einen Lokalisierungs-Delokalisierungsübergang erfahren. Das Phasendiagramm des MIT gibt an, bei welchem Transfermatrixelement das für welche Lage der Fermienergie der Fall ist.

Das MIT-Phasendiagramm könnte prinzipiell auch über die inversen Partizipationszahlen bestimmt werden. Man müßte dazu Systeme mit verschiedener Bandfüllung betrachten und das Skalenverhalten der inversen Partizipationszahl für die Zustände an der Fermienergie bei verschiedenen Transfermatrizelementen untersuchen. Das ist aber numerisch ein diffiziles Unterfangen, da es nicht um absolute Werte für inverse Partizipationszahlen geht, sondern um die Unterscheidung zwischen zwei funktionalen Abhängigkeiten von der Systemgröße.¹¹ Außerdem sind bei dieser Methode sehr viele Variationen zu tätigen: Da sich die Einteilchenzustandsdichte mit der Bandfüllung ändert (und sich die Fermienergie auch noch mit dem Transfermatrizelement verschiebt), müßte die Variation der Systemgröße bei verschiedenen Transfermatrizelementen für jede Bandfüllung separat vorgenommen werden.¹² Aus diesen Gründen wurde auf eine einfachere Methode zurückgegriffen, die im Anderson-Modell der Lokalisierung bereits etabliert ist und auf statistische Eigenschaften der Energieniveaus zur Feststellung des Lokalisierungs- Delokalisierungsübergangs von Einteilchenzuständen zurückgreift. Die Methode soll im folgenden kurz skizziert werden:

1. Energieniveaustatistik

Ausgangspunkt ist die Theorie der Zufallsmatrizen: Man betrachtet dort Hamilton-Matrizen, die mit zufälligen Elementen besetzt sind. Es erweist sich, daß es möglich ist, Aussagen zur allgemeinen Verteilung der Eigenwerte solcher Matrizen allein aus einigen allgemeinen Symmetrien des betrachteten Objektes zu treffen.

Die Verteilung der Eigenwerte kann dabei über verschiedene statistische Maße charakterisiert werden. Eine Möglichkeit ist es z.B., die Verteilung des Abstandes benachbarter Energieniveaus zu untersuchen. (In Übereinstimmung mit der Literatur wird diese Größe hier mit $P(s)$ bezeichnet, was nicht mit dem P für die Partizipationszahl verwechselt werden darf.) Die statistischen Schwankungen dieses Abstands sind allerdings noch von dem Einfluß der Zustandsdichte des Systems überlagert: Wenn die Zustandsdichte keine Konstante ist, ist es damit unmöglich, die Fluktuationen in verschiedenen Teilen des Spektrums direkt zu vergleichen. Vor der statistischen Analyse muß das Eigenwertspektrum zunächst entfaltet werden, d.h. so entzerrt werden, daß der Einfluß der Zustandsdichte verschwindet und sich im Mittel ein gleicher Abstand der Energieniveaus einstellt. Das geschieht durch die Abbildung $\epsilon_\nu \rightarrow \epsilon'_\nu$ mit

$$\epsilon'_\nu = \bar{N}(\epsilon_\nu) \quad (s = \epsilon'_{\nu+1} - \epsilon'_\nu),$$

wobei $\bar{N}(\epsilon_i)$ die geglättete integrierte Zustandsdichte ist. Nach dieser Entfaltung ergeben sich je nach Besetzung des Zufallshamilton-Operators zwei Grenzfälle für die Verteilung benachbarter Energieniveaus (siehe Abb. 2.13):

¹¹Weist ein Einteilchenzustand eine endliche Lokalisierungslänge λ_{Lok} auf, dann „spürt“ er die Systemgrenzen nicht mehr, sobald die Linearabmessung des Systems größer als λ_{Lok} wird. Er verändert sich auch nicht mehr, wenn das System über diese Länge hinaus vergrößert wird. Die inverse Partizipationszahl eines lokalisierten Zustands bleibt damit oberhalb einer Systemgröße λ_{Lok} konstant. Unterhalb dieser Größe dehnt sich der Zustand mit wachsender Systemgröße aus, aber langsamer, als die Systemgröße zunimmt. Für die inverse Partizipationszahl bedeutet das, daß sie abnimmt, aber nicht so stark, wie die Systemgröße zunimmt.

Ist ein Einteilchenzustand delokalisiert, so „füllt“ er jedes beliebige System immer aus, d.h., die inverse Partizipationszahl wird mit wachsender Systemgröße immer genau so abnehmen, wie die Systemgröße zunimmt.

¹²Das ist beim Anderson-Modell einfacher: Da man dort die Fermienergie beliebig durch das Band schieben kann, ohne daß sich irgendetwas an den Lokalisierungseigenschaften ändert, reicht es, die Variation der Systemgröße bei verschiedenen t nur für eine Bandfüllung vorzunehmen und die Systemgrößenabhängigkeit der Partizipationszahl jeweils im gesamten Band zu untersuchen.

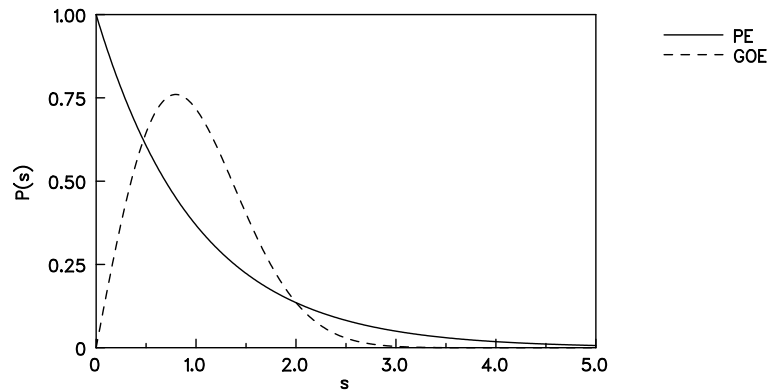


Abb. 2.13: PE und GOE-Verteilung; s ist der Abstand zweier benachbarter Energieniveaus.

Poisson-Ensemble (PE): Die Zufallshamiltonmatrix wird nur in der Diagonalen mit Zufallszahlen besetzt. Die Eigenwerte sind damit vollständig unkorreliert. Fur die Abstande zwischen beliebigen Zufallszahlen ergibt sich immer eine Poisson-Verteilung:

$$P_{\text{PE}}(s) = e^{-s} .$$

Je groer der Abstand, umso geringer die Wahrscheinlichkeit. Dieses Verhalten wird auch Levelclustering genannt.

Gausches-Orthogonales-Ensemble (GOE): Die Zufallshamiltonmatrix wird uberall mit Zufallszahlen besetzt. Bei der Diagonalisierung beeinflusst jede Zufallszahl jeden Eigenwert, d.h., wir haben vollstandig korrelierte Energieniveaus vorliegen. Die Abstande zwischen den Energieniveaus lassen sich naherungsweise mit einer Wigner-Verteilung beschreiben [Me91]:

$$P_{\text{GOE}}(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4}s^2} .$$

Anstelle von Levelclustering kommt es zu Levelabstoung: Die Hybridisierung fuhrt zu einer verstarkten energetischen Aufspaltung der Eigenzustande.

2. Anwendung auf das Anderson-Modell der Lokalisierung

Wieso helfen diese Aussagen bei der Bestimmung des MIT im Anderson-Modell? Es erweist sich, da die beiden obigen Grenzfalle etwas mit lokalisierten und unendlich ausgedehnten Einteilchenzustanden im Anderson-Modell zu tun haben. Der Befund ist, da die Abstande zwischen entfalteten benachbarten Energieniveaus lokalisierter Anderson-Zustande der PE-Statistik gehorchen, die Abstande zwischen Energieniveaus unendlich ausgedehnter Zustande im Anderson-Modell aber der GOE-Statistik. Der ubergang zwischen PE- und GOE-Statistik kann damit zur Bestimmung des Lokalisierungs-Delokalisierungsubergangs von Anderson-Einteilchenzustanden herangezogen werden.

Das lat sich wie folgt verstehen: Fur sehr kleine Transfermatrixelemente sind die Einteilchenzustande auf einem Platz lokalisiert. Diese lokalisierten Zustande in verschiedenen Teilen des Systems konnen nicht hybridisieren, ihre Energieniveaus konnen sich damit beliebig nahe kommen, und es kommt zu Levelclustering. Diese Argumentation bleibt auch fur groere t gultig, solange die Einteilchenzustande noch alle lokalisiert sind, weil immer nur endlich viele Zustande hybridisieren konnen. Im unendlich ausgedehnten System gibt es damit immer unendlich viele unkorrelierte Zustande, und die PE-Statistik und das Levelclustering bleiben erhalten.

Wenn dagegen delokalisierte Zustände vorliegen, können sie alle hybridisieren, sie werden vollständig korreliert, und es kommt zur Levelaufspaltung bzw. Levelabstoßung. Die Abstände der Energieniveaus genügen damit in diesem Bereich der GOE-Statistik.

Damit ist plausibel, wieso die Energieniveaustatistik von Einteilchenzuständen am Lokalisierungs-Delokalisierungsübergang im unendlich großen System sprunghaft von einer PE-Statistik zur GOE-Statistik wechselt. Genau am Übergang sind die Zustände weder ausgedehnt noch lokalisiert, und man erhält ein kritisches Ensemble.

Betrachtet man den Bereich um die Fermienergie, kann das zur Ermittlung des MIT herangezogen werden. Die genaue Ermittlung des Übergangspunktes ist auf eine elegante Weise über die Parameter A , C und β einer phänomenologischen Formel für die Verteilung $P(s)$ von Israilev [CIM91, HS93] möglich:

$$P_{\text{phe}}(s) = A s^\beta (1 + C\beta s)^{2\beta \frac{1-\beta/2}{\beta} - 0.16874} \exp \left[-\frac{\pi^2}{16} \beta s^2 - \frac{\pi}{4} (2 - \beta) s \right].$$

Wegen der Normierung der ersten beiden Momente von $P(s)$,

$$\int ds P(s) = \int ds s P(s) = 1,$$

kann in Wirklichkeit nur ein Parameter frei gewählt werden. Für $\beta = 1$ wird $P_{\text{phe}}(s) \approx P_{\text{GOE}}(s)$ ¹³, und A und C ergeben sich zu $A = 1.655$ bzw. $C = 0.926$ [HS93].

Für $\beta = 0$ ist $P_{\text{phe}}(s) \approx P_{\text{PE}}(s)$, und für A und C erhält man $A = 1$ und $C = \frac{\pi}{2} - 1 \approx 0.57$ [HS93]. Der Sprung von $(A, C, \beta)_{\text{PE}}$ zu $(A, C, \beta)_{\text{GOE}}$ zeigt im unendlich großen System den Delokalisierungsübergang der Einteilchenzustände im Energiebereich an.

Im endlichen System tritt bei wachsendem t anstelle des Sprunges zwischen diesen Werten ein Crossover auf. Man müßte also wieder Systemgrößenabhängigkeiten der Fitparameter betrachten. Genau am Phasenübergang sollten die Parameter systemgrößenunabhängig sein und einen dritten (kritischen) Wert aufweisen, im delokalisierten oder lokalisierten Bereich dagegen immer mit wachsender Systemgröße zu den Werten für den GOE- bzw. PE-Grenzfall skalieren. Als außerordentlich glücklicher Umstand erweist sich jetzt jedoch, daß die Israilev-Formel sehr geschickt parametrisiert ist – bei Analyse der Systemgrößenabhängigkeit findet man, daß A unabhängig von der Systemgröße am kritischen Punkt immer ein Maximum hat und C ein Minimum (siehe Abb. 2.14). Der kritische Wert für β ergibt sich zu $\beta \approx 0.875$.¹⁴ Um den Lokalisierungs-Delokalisierungsübergang für Einteilchenzustände zu bestimmen, muß man $P(s)$ dieser Zustände an die phänomenologische Formel anpassen, die Fitkonstanten A , C und β für verschiedene t auftragen und verifizieren, ob $\beta = 0.875$, das Maximum von A sowie das Minimum von C zusammenfallen. Wenn das so ist, liegt dort das kritische t . Führt man dies für verschiedene Energiebereiche über das gesamte Band aus und trägt das gefundene kritische t über der Energie auf, ergibt sich die Mobilitätskante des Anderson-Modells, die die lokalisierten von den delokalisierten Zuständen trennt. Weil man die Fermi-Energie im Anderson-Modell beliebig durch diese Mobilitätskante schieben kann, ohne daß sie sich verändert, ist die Mobilitätskante gleichzeitig das MIT-Phasendiagramm (siehe Abb. 2.15) [HS93].

¹³Diese empirische Formel gibt dabei sogar eine bessere Näherung für die exakte GOE-Statistik als die Wigner-Verteilung [DH90].

¹⁴Das kritische Ensemble hängt auch von der Geometrie des Systems ab [BMP97, PS98]. Diese Abhängigkeit ist jedoch nur schwach und spielt im Rahmen unserer Genauigkeit keine Rolle, so daß wir für alle Systeme dieselben kritischen Werte für A , C und β annehmen können.

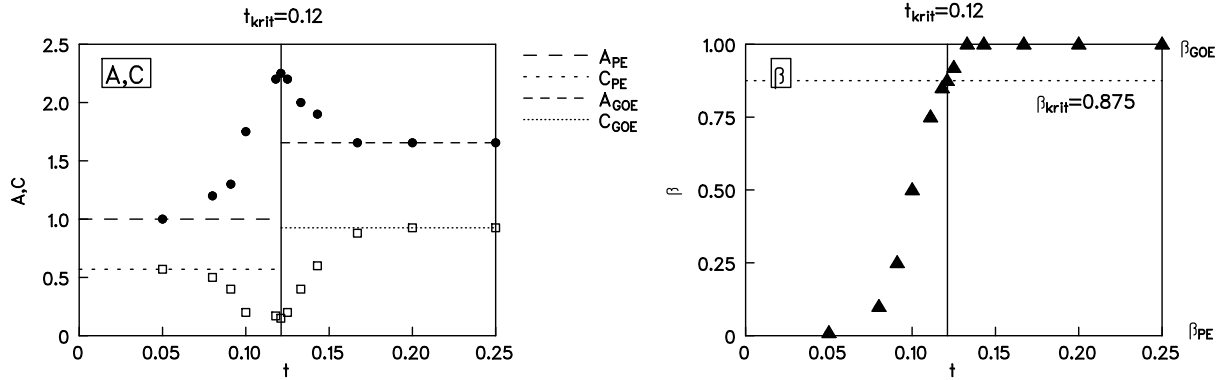


Abb. 2.14: Fitkonstanten A, C und β im Anderson-Modell der Lokalisierung fur die Zustande an der Fermienergie in Abhangigkeit vom Transfermatrixelement t fur $g = 21^3$ (schematisch nach [HS93])

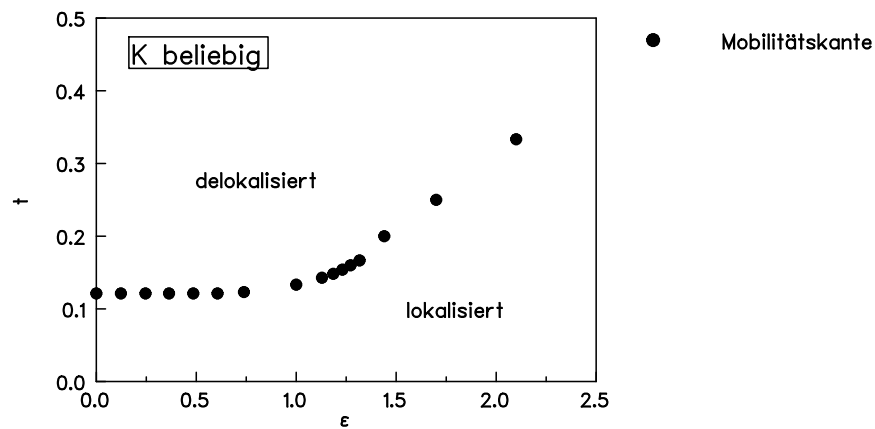


Abb. 2.15: Mobilitatskante im Anderson-Modell der Lokalisierung; die Mobilitatskante ist hier gleichzeitig das MIT-Phasendiagramm.

3. Anwendung auf das Quanten-Coulomb-Glas in Hartree-Fock-Naherung

Da das Quanten-Coulomb-Glas in HF-Naherung als effektive Einteilchentheorie einem Anderson-Modell der Lokalisierung mit speziellem Zufallspotential und zusatzlichen ungeordneten Transfermatrixelementen ahnlich ist, sollte eine Anwendung dieser Methode auch auf dieses Modell moglich sein. Tatsachlich zeigt sich auch im Quanten-Coulomb-Glas der Befund, da lokalisierte Einteilchenzustande der PE-Statistik gehorchen, ausgedehnte Zustande aber der GOE-Statistik (siehe Abb. 2.16). Das lat sich mit ahnlichen Argumenten wie beim Anderson-Modell verstehen.

Man mu nun auch hier $P(s)$ fur die Zustande in einem bestimmten Energiebereich an die Israilev-Formel anpassen und die Abhangigkeit der Fitkonstanten vom Transfermatrixelement t betrachten. Wie man sieht (Abb. 2.17), fallen das Maximum von A , das Minimum von C und der Schnittpunkt von $\beta(t)$ mit der Linie $\beta_{krit} = 0.875$ zusammen. Das stutzt unsere bisherige Argumentation zur Anwendbarkeit des Verfahrens und rechtfertigt gleichzeitig die Anwendung von $\beta_{krit} = 0.875$ fur Anderson-Einteilchenzustande auch fur HF-Einteilchenzustande. Fur jeden Energiebereich findet man so das kritische t . Anders als beim Anderson-Modell der Lokalisierung mu jetzt aber fur jede Bandfullung die Mobilitatskante extra bestimmt werden. Der MIT tritt ein, wo die jeweilige Fermienergie die Mobilitatskante schneidet. Jede Mobilitatskante (Abb. 2.18) tragt damit nur einen Punkt zum MIT-Phasendiagramm bei. Auffallig ist, da die Fermienergie die Mobilitatskante immer etwa in ihrem Maximum schneidet, d.h. der Lokalisierungs-Delokalisierungs-

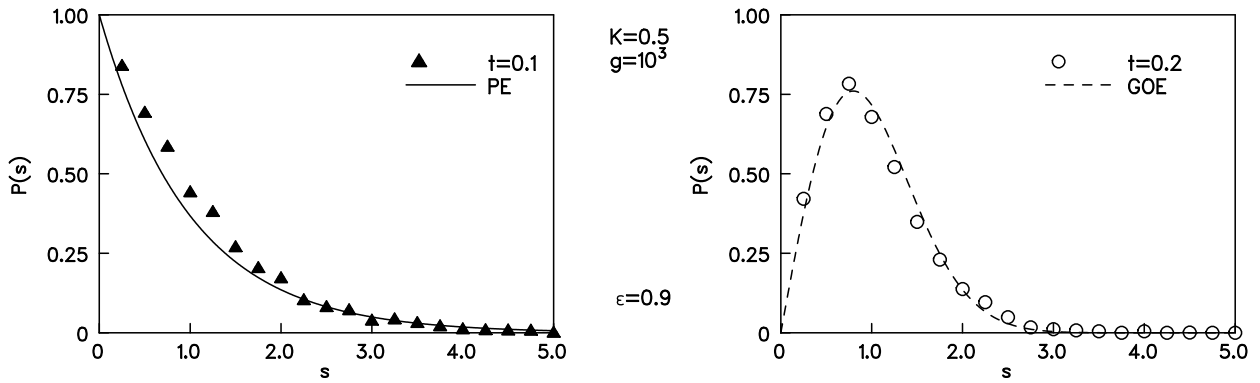


Abb. 2.16: Verteilung der Abstände benachbarter Energieniveaus $P(s)$ beim Quanten-Coulomb-Glas für Einteilchenzustände mit einer Energie $\epsilon = 0.9$, verglichen mit der PE- und der GOE-Verteilung. Die Daten stammen aus einem System $g = 10^3$ Gitterplätzen bei einer Bandfüllung von $K = 0.5$.

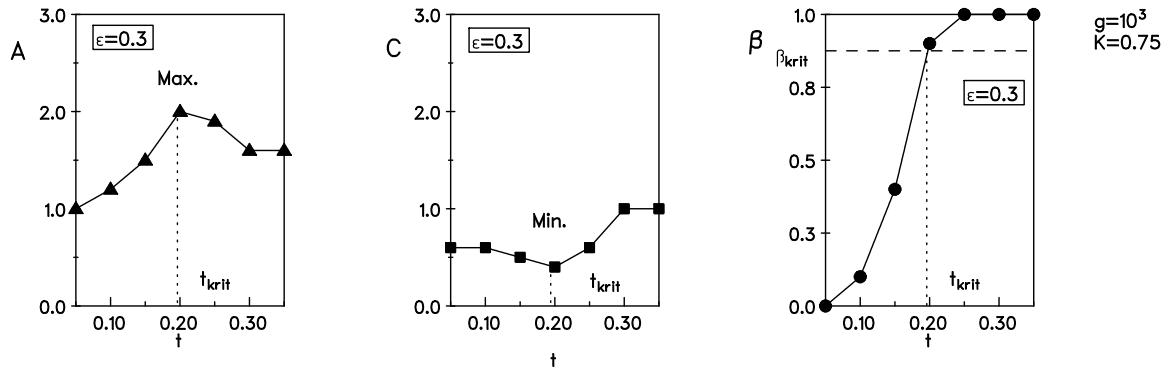


Abb. 2.17: Fitkonstanten A , C und β von $P(s)$ der Einteilchenzustände um $\epsilon = 0.3$ beim Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung mit $K = 0.75$ und $g = 10^3$ für verschiedene Transfermatrizelemente t .

Phasenübergang für die Zustände um ϵ_F immer bei den größten t auftritt. Das ist die Folge der Coulomb-Lücke. Da die Coulomb-Lücke immer etwa die gleiche Form hat, unabhängig davon, wie groß die Bandfüllung ist, ist auch die Größe dieses Maximums immer ungefähr gleich, und das MIT-Phasendiagramm (Abb. 2.19) verläuft bis zu hohen Bandfüllungen fast gerade. Weil die Zustände im Anderson-Modell dagegen in der Bandmitte am schwächsten und an den Bandkanten am stärksten lokalisiert sind, findet der MIT für ϵ_F in der Bandmitte bei den niedrigsten t statt. Je weiter ϵ_F zur Bandkante rückt, umso größer wird das kritische t . Es wird aber nie so groß wie das kritische t des Quanten-Coulomb-Glases. Auch das entspricht genau unserer Überlegung in Abschnitt 2.6.a). Die Resultate zum MIT sollen in folgender These zusammengefasst werden:

- Im wechselwirkenden System tritt der MIT unabhängig von der Fermienergie immer bei größeren Transfermatrizelementen auf als im nichtwechselwirkenden System. Die Differenz ist maximal in der Bandmitte und wird zur Bandkante geringer.

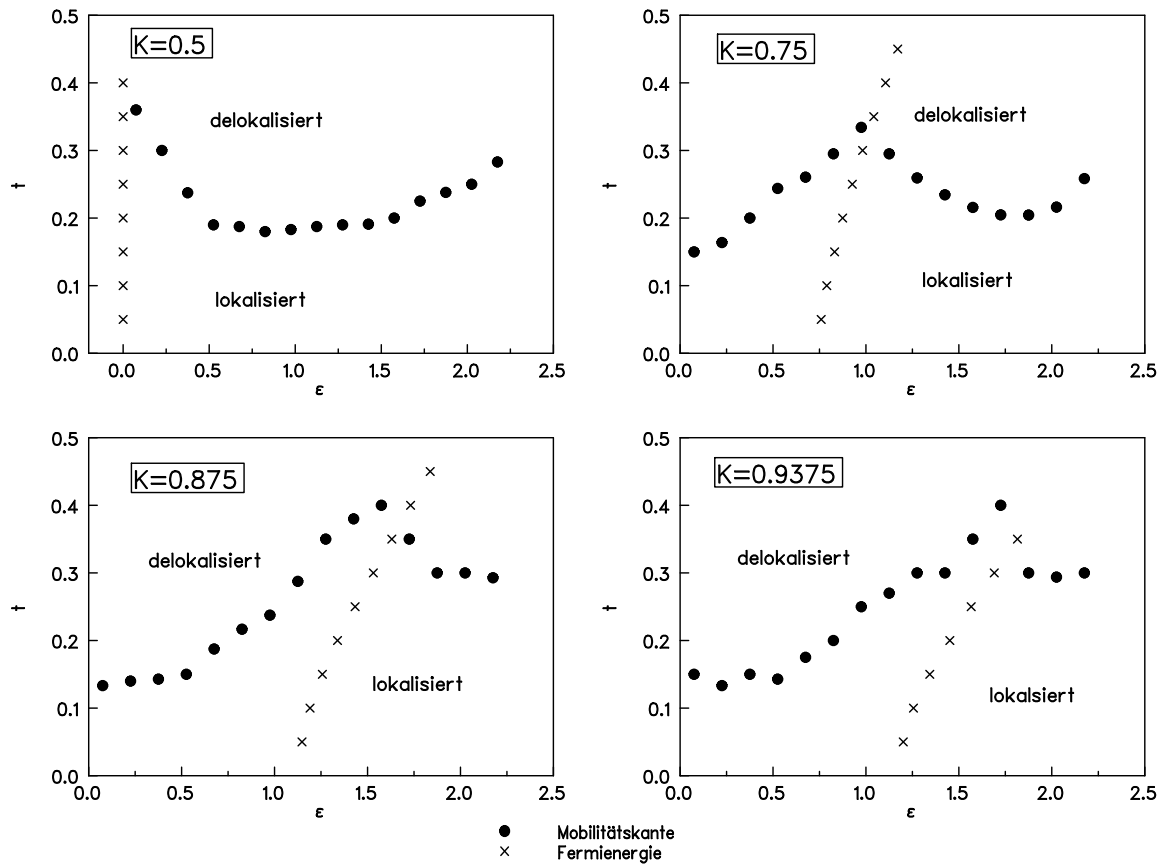


Abb. 2.18: Mobilitatskante des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Naherung fur Bandfullungen $K = 0.5$, $K = 0.75$, $K = 0.875$ und $K = 0.9375$

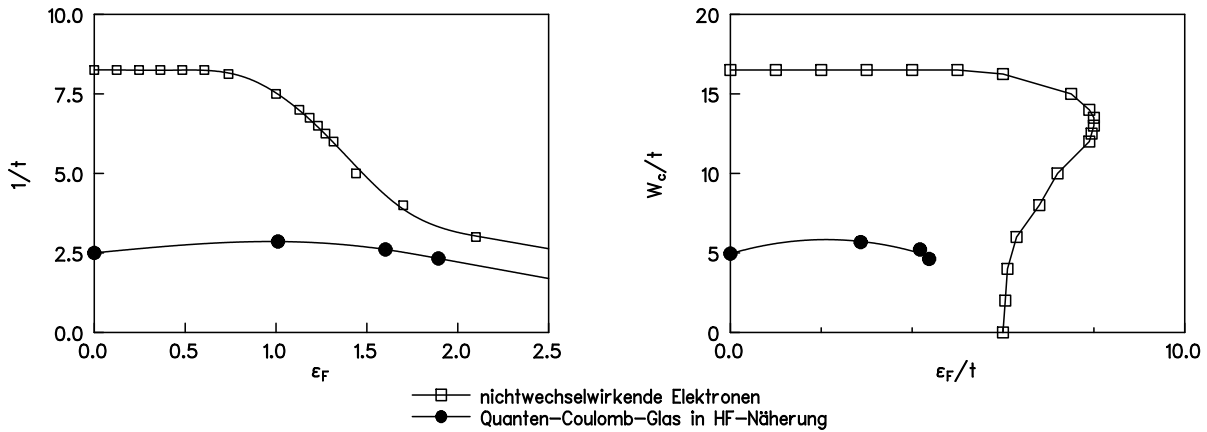


Abb. 2.19: MIT-Phasendiagramm des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Naherung und des Anderson-Modells der Lokalisierung. Das linke Bild zeigt eine Auftragung der Fermienergie gegen das Reziproke des Transfermatrixelements, wobei die Energien auf die Coulomb-Energie $U = 1$ bezogen sind und $W_0 = 1$ ist, im rechten Bild sind die Fermienergie ϵ_F und die kritische Unordnung W_c , jeweils bezogen auf das Transfermatrixelement t , gegeneinander aufgetragen (das ist die ubliche Darstellungsweise im Anderson-Modell). Die Daten fur das Anderson-Modell stammen aus [HS93]. Die Linien sind nur Hilfslinien fur das Auge.

2.7 Leitwerte

Es ist naturlich auch moglich, direkt die Transportgroen zu betrachten.

MIT bedeutet dann das unordnungsinduzierte Verschwinden des Gleichstromleitwerts in

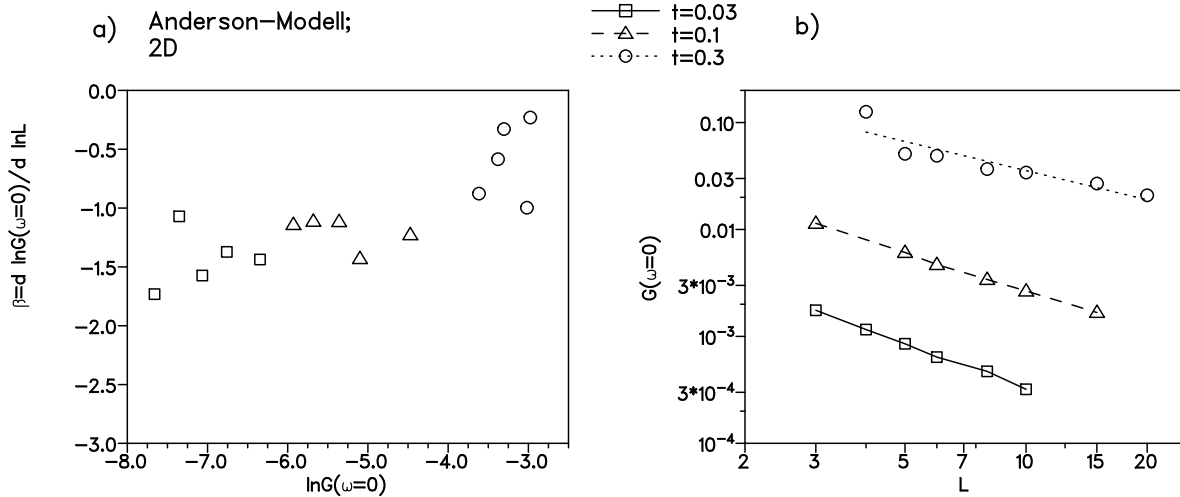


Abb. 2.20: a) Skalenfunktion $\beta = \frac{d \ln G(L)}{d \ln L}$ gegen $\ln G(L)$ für die Systeme aus Teil b) der Abbildung; b) Gleichstromleitwerte eines zweidimensionalen Anderson-Modells der Lokalisierung auf quadratischem Gitter für verschiedene Transfermatrixelemente als Funktion der Kantenlänge L

einem unendlich großen System.

Der Realteil der Leitfähigkeit bei der Frequenz ω in x -Richtung ergibt sich für ein effektives Einteilchensystem in linear-response Näherung (siehe Anhang 1) zu

$$\Re \sigma_{xx}(\omega) = \frac{\pi t^2 e^2 \xi^2}{g \omega} \sum_{\mu=1}^N \sum_{\nu=N+1}^g \delta(\epsilon_\nu - \epsilon_\mu + \omega) \left(\sum_i k_{i\mu} k_{i-\xi \nu} - k_{i-\xi \mu} k_{i\nu} \right)^2.$$

ξ ist hierbei der Abstand zweier benachbarter Gitterplätze in x -Richtung.¹⁵

Man kann diesen Ausdruck anschaulich verstehen: Ein Elektron kann von einer Anregung mit der Frequenz ω durch das System transportiert werden, wenn für die Energie $\hbar\omega$ ¹⁶ eine Teilchen-Loch-Anregung möglich ist und diese eine Verlagerung des Elektrons in Stromrichtung hervorrufen kann.

Im unendlich ausgedehnten System ist dieser Ausdruck für $\omega \rightarrow 0$ immer Null, wenn die Einteilchenzustände um die Fermienergie lokalisiert sind. Das kann man sich folgendermaßen überlegen: $\omega \rightarrow 0$ heißt, daß das den Transport vermittelnde Teilchen-Loch-Paar immer weiter an die Fermi-Energie heranrücken muß. Für unendlich große Systeme ist die Anzahl der Teilchen-Loch Paare unmittelbar an der Fermienergie im Anderson-Fall proportional zu ω , im Fall des Quanten-Coulomb-Glases wegen der Coulomb-Lücke oder der Coulomb-Anomalie sogar noch viel kleiner. Der räumliche Abstand solcher Paare ist damit im Anderson-Modell im Mittel proportional zu $\left(\frac{1}{\omega}\right)$, im Fall des Quanten-Coulomb-Glases ist er wegen der Coulomb-Lücke bzw. wegen der Coulomb-Anomalie im Mittel sogar noch größer als beim Anderson-Modell. Geht nun $\omega \rightarrow 0$, wird dieser Abstand in allen Fällen unendlich groß. Der Überlagerungsterm kann damit von vornherein nur von Null verschieden sein, wenn die Zustände der Teilchen-Loch-Paare an der Fermienergie unendlich ausgedehnt sind.

Eine direkte numerische Rechnung kann sich aber nur mit endlich großen Systemen befassen. Für ein endliches System ergeben sich für die Leitfähigkeit mehrere Deltapeaks bei Frequenzen $\omega \neq 0$, die jedoch durch den Anschluß des endlichen Systems an einen äußeren Stromkreis eine Lorentz-Verbreiterung erfahren (siehe Anhang 1), so daß auch bei $\omega = 0$

¹⁵In dieser Darstellung ergibt sich der Leitwert in Einheiten von $\frac{e^2}{\hbar}$.

¹⁶Man beachte die Konvention $\hbar = 1$.

ein endlicher Wert vorliegt.

Will man den MIT auf diese Weise direkt bestimmen, ist es zunächst notwendig, nach

$$G_{xx}(\omega) = \sigma_{xx}(\omega) \frac{L_y L_z}{L_x}$$

von der Gleichstromleitfähigkeit auf den Leitwert des Systems umzurechnen. Die Abb. 2.20 b) und 2.21 zeigen Gleichstromleitwerte von zweidimensionalen quadratischen Systemen bei verschiedenen Transfermatrixelementen jeweils für das Anderson-Modell der Lokalisierung und das Quanten Coulomb-Glas in HF-Näherung als Funktion der Kantenlänge L . Was man sofort sieht, ist, daß der Gleichstromleitwert des Quanten-Coulomb-Glases immer deutlich unter dem des Anderson-Modells liegt. Mit wachsendem Transfermatrixelement nimmt der relative Unterschied ab. Das ist im Einteilchenbild einfach eine Folge der Absenkung der Zustandsdichte an der Fermienergie durch Coulomb-Lücke bzw. Coulomb-Anomalie und paßt genau zu unseren Schlußfolgerungen bezüglich der Lokalisierungseigenschaften und des MIT.

Zur Ermittlung des Gleichstromleitwerts im Grenzfall eines unendlich großen Systems muß man das Skalenverhalten des Leitwerts untersuchen: Im isolierenden Fall sind die Einteilchenzustände im Anderson-Modell der Lokalisierung exponentiell lokalisiert. Da sich das Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung auch als Anderson-Modell der Lokalisierung mit speziellem Zufallspotential verstehen läßt, erwarten wir im isolierenden Fall ebenfalls exponentiell lokalisierte Einteilchenzustände. Der HF-Gleichstromleitwert sollte damit im isolierenden Bereich mit wachsender Systemgröße exponentiell abfallen. Es bietet sich daher an, zur Bestimmung des kritischen Transfermatrixelements wie beim Anderson-Modell als Skalenfunktion $\beta = \frac{d \ln G(L)}{d \ln L}$ gegen $\ln G(L)$ aufzutragen [AALR79].

Abb. 2.20 a), wo diese Auftragung zunächst für das Anderson-Modell versucht wurde, zeigt jedoch, daß sich mit den Kantenlängen $L = 4 \dots 20$ der von uns untersuchten Systeme nicht einmal für das Anderson-Modell eine vernünftige Skalenkurve ergibt. Es sieht zwar so aus, als ob die einzelnen Punkte auf eine Skalenkurve fallen, und man erkennt sogar in etwa den erwarteten Verlauf für ein Anderson-Modell in $2d$ [H94], aber die Abweichungen der einzelnen Punkte sind zu groß. Dafür kommen vor allem zwei Ursachen in Frage:

1. Die Kantenlängen der Systeme sind zu klein, und wir bewegen uns noch gar nicht in dem Bereich, wo Skalenverhalten gilt.

2. Die Annahme, daß die Verbreiterung γ der einzelnen Peaks proportional zu $\frac{1}{L_x}$ ist (siehe Anhang 1), ist zu grob für eine Analyse, die sehr genaue Gleichstromleitwerte verlangt.

Wenn die Skalenuntersuchung in diesen Systemgrößen beim Anderson-Modell der Lokalisierung fehlschlägt, wird sie beim Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung erst recht fehlschlagen, weil wir dort den MIT bei viel größeren Transfermatrixelementen erwarten und damit die Lokalisierungslängen im isolierenden Bereich noch viel größer werden können als beim Anderson-Modell. Die Systeme müßten also noch größer sein. Im Bereich der von uns untersuchten Kantenlängen L ist eine Bestimmung der MIT über den Gleichstromleitwert damit noch nicht möglich. Eine These soll die Erkenntnisse über die Leitwerte zusammenfassen:

- Das Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung hat immer einen deutlich niedrigeren Gleichstromleitwert als ein nichtwechselwirkendes System mit gleichem Transfermatrixelement.

2.8 Wie gut ist die Hartree-Fock-Näherung?

Wie wir gesehen haben, kann man im Rahmen einer effektiven Einteilchentheorie aus dem Zusammenhang zwischen Einteilchenlokalisierungslänge und Abschirmung sowie zwischen

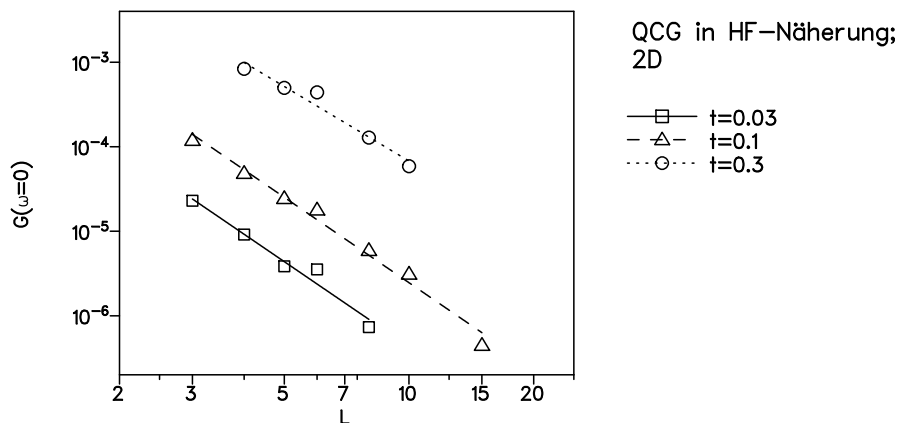


Abb. 2.21: Gleichstromleitwerte eines zweidimensionalen Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung auf quadratischem Gitter für verschiedene Transfermatrizelemente als Funktion der Kantenlänge L

den Hybrisierungsmöglichkeiten der Einteilchenzustände und der Einteilchenzustandsdichte gut verstehen, wieso die Coulomb-Wechselwirkung im HF-Bild für die Zustände an der Fermienergie zu verstärkter Lokalisierung führt und damit den MIT zu größeren Transfermatrizelementen verschiebt. Die Frage ist, wie berechtigt die HF-Näherung tatsächlich ist.

Was durch die Herausmittlung der Korrelationen verlorengeht, ist die Möglichkeit des Systems sich „gleichzeitig“ in mehreren HF-Vielteilchenzuständen zu befinden und dadurch seine Energie weiter zu minimieren. Diese Möglichkeit könnte die verstärkte Lokalisierung wieder zunichte machen oder sogar zu verringerter Lokalisierung führen (Abschnitt 1.1. b)). Mit der Untersuchung dieser Frage befaßt sich Kapitel 3.

3. Quanten-Coulomb-Glas – Hartree-Fock-Näherung und exakte Lösung für kleine Gitter; ein Vergleich

Im 3. Kapitel steht die Frage nach der Gültigkeit der HF-Näherung für das Quanten-Coulomb-Glas im Mittelpunkt. Dazu müssen die HF-Resultate mit Ergebnissen aus der exakten Lösung verglichen werden. Eine exakte Lösung ist nur für sehr kleine Gitter möglich. Während die Einteilchenzustandsdichten direkt verglichen werden können, ist ein unmittelbarer Vergleich der Lokalisierungseigenschaften nicht möglich, da Lokalisierungsmaße von Einteilchenzuständen im Vielteilchenfall nicht definiert sind. Für den Vielteilchenfall werden deshalb Lokisierungskriterien entwickelt, die einen direkten Vergleich mit den Einteilchenlokalisierungsmaßen gestatten.

Aus den Vergleichen werden Rückschlüsse auf die Gültigkeit der HF-Näherung gezogen. Die Idee für eine neue Näherung wird diskutiert.

3.1 Einführung: Hartree-Fock-Näherung und die exakte Lösung

Was sind die Konsequenzen der Hartree-Fock-Näherung für die physikalischen Größen?

Im exakten Quanten-Coulomb-Glas ruft der Zweiteilchenterm in der Coulomb-Wechselwirkung \hat{H}_3 wegen der vier enthaltenen Erzeuger und Vernichter Korrelationseffekte hervor. Die Frage ist nun, was sich bei der exakten Lösung im Verhältnis zum Einteilchenbild ändern könnte bzw., auf den Punkt gebracht: Wird die HF-Antwort „Coulomb-Wechselwirkung führt zu stärkerer Lokalisierung“ durch eine exakte Berücksichtigung der Korrelationen verneint, oder bleibt sie richtig?

Dazu muß man sich überlegen, wie die vernachlässigten Korrelationen die Zustände, die Energien und die physikalischen Größen ändern können. Im folgenden sollen diese drei Dinge zunächst auf dem Level „naiver“ Argumentation grob eingeschätzt werden:

a) Korrekturen der Zustände:

Der Zweiteilchenterm bewirkt eine Mischung verschiedener aus Einteilchenzuständen aufgebauter Vielteilchen-Slaterzustände. Wie verändert diese Mischung den HF-Vielteilchengrundzustand und die angeregten Vielteilchenzustände? Betrachten wir dazu die exakte Diagonalisierung nicht in einer Vielteilchen-Platz-Basis, sondern in einer Vielteilchenbasis aus dem HF-Vielteilchengrundzustand und sämtlichen angeregten HF-Vielteilchenzuständen.

Der exakte Zustand wird nach der Diagonalisierung jeweils eine Überlagerung aus solchen Basiszuständen sein. Wie stark ist diese Überlagerung für Grund- und angeregte Zustände? Der selbstkonsistente HF-Vielteilchengrundzustand besitzt die Extremeneigenschaft, die beste aus einer Slater-Determinante bestehende Näherung des exakten Vielteilchengrundzustands zu sein. Die angeregten Zustände sind dagegen keine optimale Einteilchenabschätzung des entsprechenden exakten angeregten Vielteilchenzustands mehr, weil sie nicht selbstkonsistent sind, und enthalten im Verhältnis zum Grundzustand einen zusätzlichen Fehler.

Der exakte Grundzustand sollte damit aus den wenigsten HF-Basiszuständen überlagert sein, die angeregten exakten Zustände i.a. dagegen aus mehr Basiszuständen. Da Grund- und angeregte Zustände im klassischen Grenzfall und im Mean-Field-Grenzfall korrekt sind, sollten die Korrekturen am stärksten für mittlere t sein, wobei die angeregten Zustände wieder mehr korrigiert werden als der Grundzustand.

b) Korrekturen der Energien der Zustände:

Welche Konsequenzen hat die Mischung für die exakten Vielteilchenenergien im Verhältnis zu den Energien der HF-Näherung?

Für den Grundzustand läßt sich sofort eine klare Aussage treffen: Der exakte Grundzustand kann nur niederenergetischer sein als der HF-Vielteilchengrundzustand. Weil die HF-Grundzustandsenergie im Mean-Field Grenzfall richtig ist, werden die Korrekturen dabei umso größer sein, je kleiner t ist.¹

Bei den angeregten Zuständen ist die Sachlage komplizierter: Da man von vornherein nicht weiß, in welche Richtung man den zusätzlichen Fehler durch die Nichtselbstkonsistenz macht, könnten die Energien der angeregten Zustände durch die Korrelationen ebensogut zu höheren wie zu niedrigeren Werten verschoben werden.

Mit einer einfachen Überlegung kommt man im Grenzfall des klassischen Coulomb-Glases für die angeregten Zustände ein Stück weiter: Wie wir gesehen haben (siehe Abschnitt 2.3.), beschreibt die HF-Näherung die Energie von Einteilchenanregungen und damit die Einteilchenzustandsdichte im klassischen Grenzfall richtig. Es sei jetzt i ein besetzter Zustand und j ein nichtbesetzter Zustand im klassischen Grenzfall jeweils irgendwo im Band. Wir wollen jetzt nach der Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand (Platz i besetzt, Platz j unbesetzt) und dem angeregten Zustand fragen, der sich beim Sprung des Teilchens von i nach j ergibt: Die HF-Näherung als Einteilchentheorie liefert dafür einfach die Differenz zwischen den Einteilchenenergien, also

$$\Delta E = \epsilon_j - \epsilon_i .$$

Bei der exakten Rechnung im klassischen Coulomb-Glas mit Korrelationen (siehe Abschnitt 2.3., Argumentation von Efros und Shklovskii) erhält man aber für die Energie der

¹Das ist anders für die korrigierte HF-Grundzustandsenergie (siehe Abschnitt 2.3.): Hier wird die Korrektur (wie beim Grundzustand selbst) für mittlere t am größten.

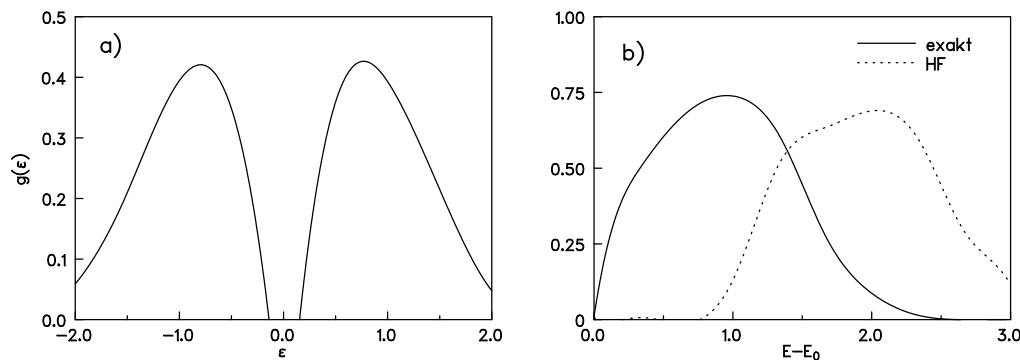


Abb. 3.1 Klassisches Coulomb-Glas in exakter Lösung und mit HF-Näherung ($g = 4 \times 3, K = 0.5$): a) Einteilchenzustandsdichte; die Kurven von HF-Näherung und exakter Lösung stimmen überein; b) Teilchen-Loch-Zustandsdichte.

Teilchen-Loch-Anregung

$$\Delta E = \epsilon_j - \epsilon_i - \frac{1}{r_{ij}} !$$

Damit ist die Energie des entsprechenden angeregten Zustands bei der HF-Näherung relativ zum Grundzustand um einen Betrag von $\frac{1}{r_{ij}}$ zu groß.

Die HF-Näherung erzeugt so trotz korrekter Einteilchenzustandsdichte in der Teilchen-Loch-Zustandsdichte des klassischen Coulomb-Glases eine zusätzliche Lücke (siehe Abb. 3.1). Die Differenz wird umso kleiner, je näher die Teilchen- bzw. Lochenergien bei der Fermienergie liegen (nach Efros und Shklovskii muß gelten: $r_{ij} > \frac{1}{|\epsilon_j - \epsilon_i|}$). Kann man die Argumentation vom klassischen Grenzfall auf den ganzen isolierenden Bereich extrapolieren? Mit einer weiteren Überlegung gelingt auch dies noch ein Stück:

Das Quanten-Coulomb-Glas kann in Einteilchennäherung im gesamten isolierenden Bereich auf Längenskalen größer λ_{Lok} wie ein klassisches Coulomb-Glas in HF-Näherung behandelt werden (siehe Abschnitt 2.3). Dem entspricht eine energetische Region der Breite $1/\lambda_{\text{Lok}}$ um die Fermienergie. Damit greift die obige Argumentation für die Energien zumindest für angeregte HF-Zustände, die energetisch nicht weiter als $1/\lambda_{\text{Lok}}$ vom Grundzustand entfernt sind, wenn die exakte Einteilchenzustandsdichte nicht von der abweicht, die man über die Annahme eines Einteilchenbildes erhält.

Die zusätzliche Lücke wird im Mean-Field-Grenzfall verschwinden, weil dort die HF-Näherung exakt ist und damit auch die Energien der angeregten Zustände exakt beschreibt, sie wird am größten im klassischen Grenzfall sein, wo man am „weitesten“ vom Mean-Field-Grenzfall weg ist und die HF-Näherung die Energien der angeregten Zustände am schlechtesten beschreibt.

c) Korrekturen für die physikalischen Größen:

Was läßt sich aus den bisher diskutierten Punkten für die physikalischen Größen schlußfolgern?

Diskutieren wir zuerst die Einteilchenzustandsdichte: Im klassischen Grenzfall beschreibt die HF-Näherung die Einteilchenzustandsdichte richtig, weil sich die Fehler bei der Grundzustandsenergie des Systems mit N Teilchen und den Energien der angeregten Zustände der Systeme mit $N \pm 1$ Teilchen durch die Differenzbildung und die fehlende Selbstkonsistenz der angeregten Zustände wieder ausgleichen (siehe Abschnitt 2.3.).

Für $t \neq 0$ hängt die Einteilchenzustandsdichte nun nicht mehr nur von der Energiedifferenz zwischen dem Grundzustand des Systems mit N Teilchen und den angeregten Zuständen

des Systems mit $N + 1$ bzw. $N - 1$ Teilchen ab, sondern auch von der Projektion der entsprechenden Zustände der Systeme mit $N + 1$ bzw. $N - 1$ Teilchen auf den Grundzustand des Systems mit N Teilchen (siehe Anhang 1):

$$g(\epsilon) = \frac{1}{g} \sum_i^g \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^2 \delta(E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \epsilon) + \frac{1}{g} \sum_i^g \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle|^2 \delta(E_0^N - E_\lambda^{N-1} - \epsilon). \quad (3.1)$$

Ob die Kompensation der Fehler auch für $t \neq 0$ und unter Einbeziehung der Zustände funktioniert, bleibt damit unklar.² Wenn sich die Einteilchenzustandsdichte aber verändert, dann sollte sie sich am wenigsten in der Umgebung der Fermienergie ändern und weiter zur Bandkante zu stärker, weil der Grundzustand durch das HF-Verfahren am besten genähert wird.

Es verbleibt die Diskussion des Leitwerts: Hier spielen nicht Einteilchenanregungen eine Rolle, sondern die Teilchen-Loch-Anregungen des Systems mit N Teilchen (siehe Anhang 1):

$$G(\omega) = \frac{L_y L_z}{L_x} \sum_\lambda \frac{\pi t^2 e^2 \xi^2}{g \omega} \delta(E_\lambda^N - E_0^N + \omega) \left(\sum_i \langle \psi_0^N | \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i-\xi} | \psi_\lambda^N \rangle - \langle \psi_0^N | \hat{c}_{i-\xi}^\dagger \hat{c}_i | \psi_\lambda^N \rangle \right)^2. \quad (3.2)$$

Die falschen Energien der Teilchen-Loch-Anregungen bei der HF-Näherung spielen damit für diese Größe eine Rolle. Nach unserer Überlegung sollten sich, wenn die Einteilchenzustandsdichte um ϵ_F durch das HF-Verfahren gut genähert ist, die exakten angeregten Zustände zum Grundzustand hin verschieben. Das führt (wenn wir nur den dominierenden $\frac{1}{\omega}$ -Term betrachten und den Einfluß der Überlagerung der Zustände einmal beiseitelassen, was vor allem bei kleinen t gerechtfertigt ist) zu einer Erhöhung des Gleichstromleitwerts gegenüber der HF-Näherung.

Diese relative Erhöhung sollte am stärksten für kleine t sein, wo sich die exakten angeregten Zustände am meisten zum Grundzustand hin verschieben, und im Mean-Field-Grenzfall verschwinden.

Fazit:

Es spricht damit einiges dafür, daß die exakte Lösung den wechselwirkungsinduzierten Effekt stärkerer Lokalisierung, den wir mit der HF-Näherung gefunden haben, wieder abschwächt. Vor allem bei kleinen t könnten sie den Lokalisierungseffekt sogar in das Gegenteil umkehren. Ein Vergleich zwischen der HF-Näherung und der exakten Lösung zur Kalkulierung der Tragweite der Korrekturen ist daher unbedingt sinnvoll, auch wenn er (zunächst) nur für sehr kleine Gitter erfolgen kann.

²Dabei ist klar, daß der Beitrag eines einzelnen Zustands $|\psi_\lambda^{N\pm 1}\rangle$ zur Einteilchenzustandsdichte von dem bei Einteilchennäherung abweicht, denn die Projektionsfaktoren $\sum_i |\lambda^{N+1} \langle \psi | \hat{c}_i^\dagger | \psi \rangle_0^N|^2$ und $\sum_i |\lambda^{N-1} \langle \psi | \hat{c}_i | \psi \rangle_0^N|^2$, die die Projektion der Eigenzustände der Systeme mit $N \pm 1$ auf den Grundzustand des Systems mit N Teilchen darstellen und das Gewicht der Einteilchenenergien bei der entsprechenden Einteilchenenergie liefern, sind kleiner als Eins, sobald die Zustände von Slaterdeterminanten abweichen. Bei Mittelung über alle Beiträge könnte sich aber trotzdem wieder dieselbe Einteilchenzustandsdichte ergeben.

Tabelle 3.1 Größe der vollständigen Basis bei verschiedenen Systemgrößen

g	N	K	$\binom{g}{N-1}$	$\binom{g}{N}$	$\binom{g}{N+1}$
12	6	0.5	792	924	792
16	8	0.5	11440	12870	11440
25	12	0.48	4.5×10^6	5.2×10^7	5.2×10^7
36	18	0.5	8.6×10^9	9.1×10^9	8.6×10^9
64	32	0.5	1.8×10^{18}	1.8×10^{18}	1.8×10^{18}

3.2 Die exakte Lösung

Quanten-Coulomb-Glas in exakter Lösung heißt, das volle Problem

$$\hat{H}_{\text{QCG}}|\psi_\lambda\rangle = E_\lambda|\psi_\lambda\rangle \quad (3.3)$$

mit \hat{H}_{QCG} als Hamilton-Operator des Quanten-Coulomb-Glases (1.2) zu lösen.³ Die Rechnung kann in jeder beliebigen Basis erfolgen. Da der Zweiteilchenterm \hat{H}_3 im Hamilton-Operator aber Platz-Erzeuger und Vernichter $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$ enthält, liegt es zunächst nahe, eine Vielteilchen-Platz-Basis zu verwenden. Wenn wir ein Problem mit N Teilchen betrachten, sind die Basiszustände $|\{i\}\rangle$ jeweils Slaterdeterminanten von N Platz-Zuständen:

$$|\{i\}\rangle = \hat{c}_{i_1}^\dagger \dots \hat{c}_{i_N}^\dagger |0\rangle,$$

wobei wegen des Pauli-Prinzips $i_1 \neq i_2 \neq \dots \neq i_N$ sein muß und $i_1 \dots i_N = 1 \dots g$ gilt. Die Zahl der Basiszustände entspricht damit der Zahl der Möglichkeiten, N Teilchen auf g Gitterplätze zu verteilen – die volle Vielteilchenbasis für ein System mit N Teilchen auf g Gitterplätzen hat also $\binom{g}{N}$ Elemente. In der Vielteilchen-Platz-Basis wird aus der exakten Schrödinger-Gleichung (3.3) mit dem Ansatz $|\psi_\lambda\rangle = \sum_i \alpha_{i\lambda} |\{i\}\rangle$ durch Multiplikation von links mit dem Basiszustand $\langle\{m\}|$ das Eigenwertproblem

$$\sum_i \langle\{m\}|\hat{H}_{\text{QCG}}|\{i\}\rangle \alpha_{i\lambda} = E_\lambda \alpha_{m\lambda}.$$

Zur Lösung muß also die volle Hamiltonmatrix $\langle\{m\}|\hat{H}_{\text{QCG}}|\{i\}\rangle$ (eine Matrix der Dimension $\binom{g}{N} \times \binom{g}{N}$ (!)) diagonalisiert werden. Ihre Eigenwerte E_λ sind die Energien des exakten Grundzustands und der exakten angeregten Zustände $|\psi_\lambda\rangle$, die Eigenvektoren $\alpha_{m\lambda}$ geben jeweils das Gewicht des Basiszustands $|\{m\}\rangle$ im exakten Zustand $|\psi_\lambda\rangle$ an. Um Einteilchengrößen ausrechnen zu können (wie z.B. die Einteilchenzustandsdichte), muß die Rechnung jeweils mit dem gleichen Zufallspotential für ein System mit N Teilchen, mit $N+1$ Teilchen und mit $N-1$ Teilchen vorgenommen werden. Außerdem sind wiederum für alle Größen Mittelungen über viele Realisierungen des Zufallspotentials notwendig. Die exakte Lösung ist ein sehr aufwendiges Problem, was sofort klar wird, wenn wir uns einige Beispiele für die Größe der zu diagonalisierenden Matrizen anschauen (Tabelle 3.1). Die exakten Rechnungen wurden für ein System mit $g = 12$ Gitterplätzen und $N = 6$ Teilchen, also einer Kompensation von $K = 0.5$ (Halbfüllung) vorgenommen. Dabei wurde jeweils über 1000 bis 1600 Realisierungen des Zufallspotentials gemittelt. Einige Rechnungen

³Die Konstante $\sum \frac{K^2}{r_{ik}}$ wird im folgenden wie bei der HF-Näherung vernachlässigt.

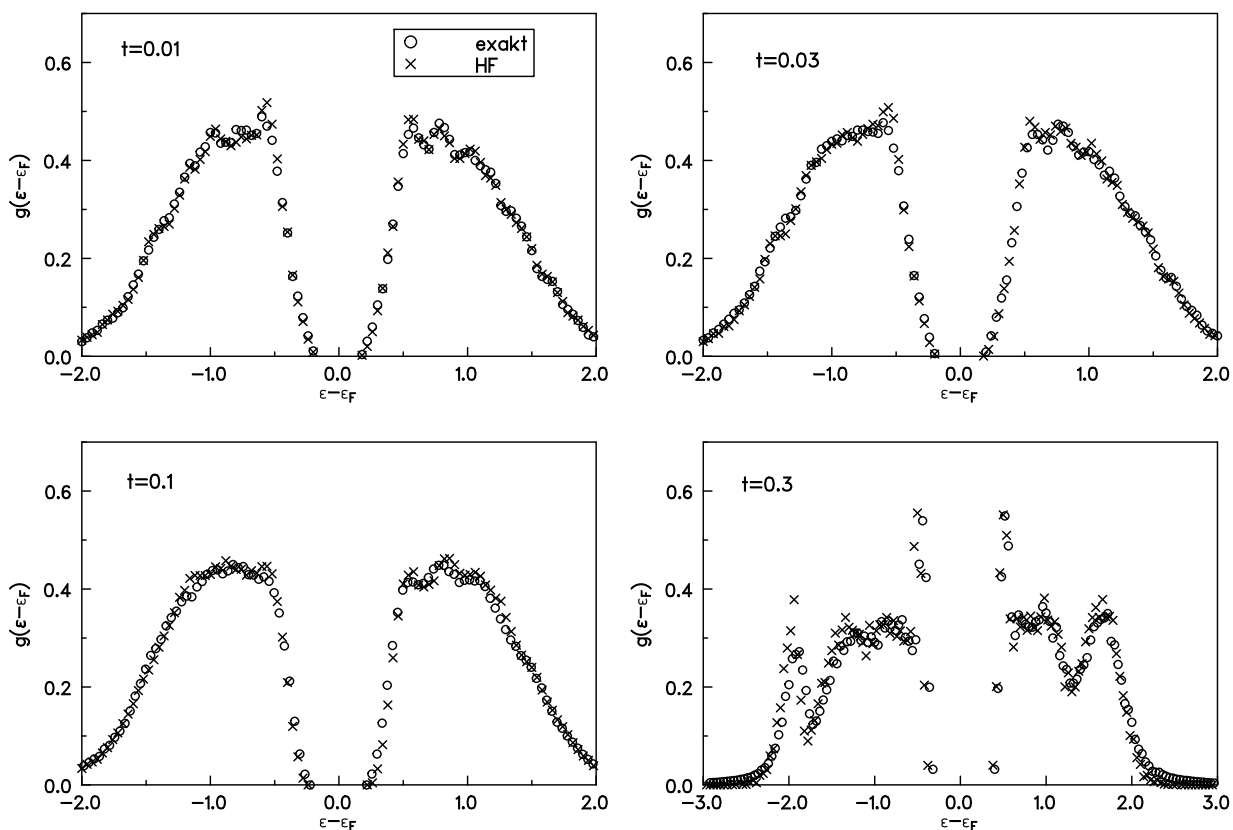


Abb. 3.2 Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases ($g = 4 \times 3$) in exakter Lösung und mit HF-Näherung für verschiedene Transfermatrixelemente t

für einzelne Realisierungen des Zufallspotentials mit $g = 16$ Gitterplätzen und Halbfüllung wurden mit Hilfe eines Lanczos-Diagonalisierungsalgorithmus für die 20 niederenergetischsten exakten Eigenzustände vorgenommen. Der Beschränkung auf wenige niederenergetische Zustände entspricht dabei bei den physikalischen Größen die Beschränkung auf die nahe Umgebung der Fermienergie bzw. auf niedrige Frequenzen beim Transport.

3.3 Exakte Lösung: Einteilchenzustandsdichte

Die Einteilchenzustandsdichte eines Vielteilchensystem mit den Eigenvektoren $|\psi_\lambda\rangle$ und den Eigenenergien E_λ^N kann nach (3.1) aus dem Grundzustand des Systems mit N Teilchen und aus Grund- und angeregten Zuständen eines Systems mit $N + 1$ Teilchen und $N - 1$ Teilchen berechnet werden (siehe Anhang 1). Wenn es überhaupt Abweichungen zwischen HF-Näherung und exakter Lösung gibt, sollten sie nach unseren Überlegungen in Abschnitt 3.1. an der Fermienergie am geringsten sein und zur Bandkante zu größer werden.

Abb. 3.2 zeigt die Einteilchenzustandsdichte der exakten Lösung für ein System von $g = 4 \times 3$ Gitterplätzen bei Halbfüllung für $t = 0.01, t = 0.03, t = 0.1$ und $t = 0.3$. Wegen der Kleinheit des Gitters werden bei $t = 0.3$ die Effekte der Bandstruktur sehr stark sichtbar. Auch ist die harte Lücke in der Zustandsdichte sehr groß (Abschätzung für den unzuverlässigen Bereich um die Fermienergie in der Einteilchenzustandsdichte

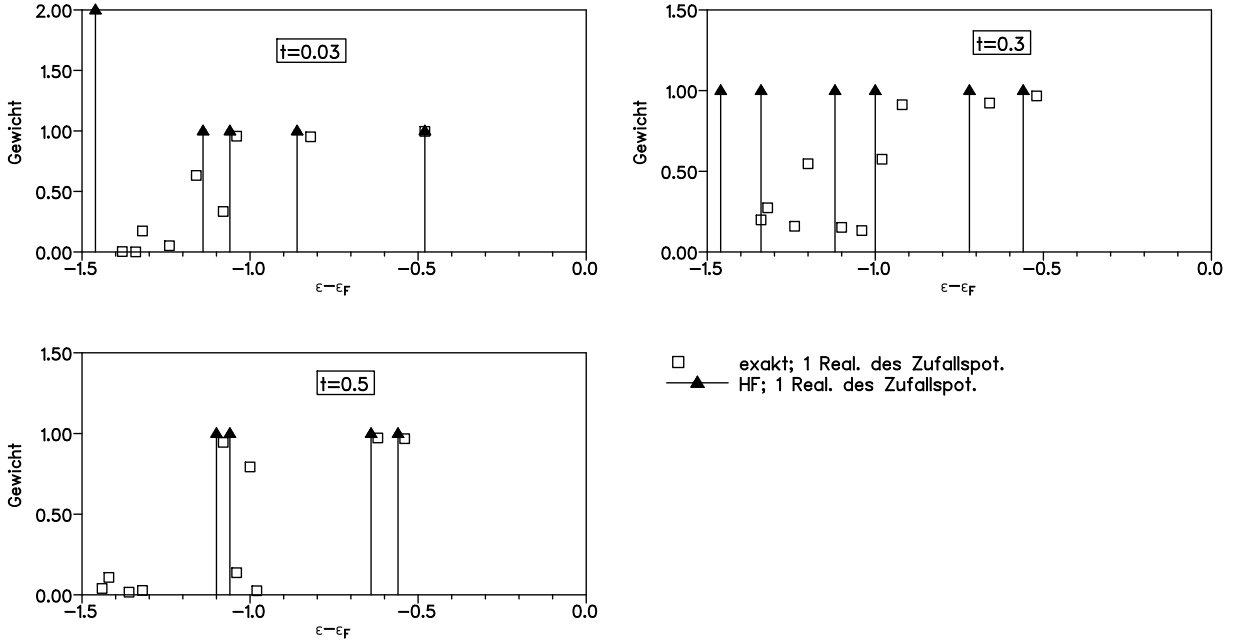


Abb. 3.3 Histogramm der Einteilchenzustände (Lochzweig) eines Quanten-Coulomb-Glases mit $g = 16$ und $K = 0.5$ für eine Realisierung des Zufallspotentials bei $t = 0.03$, $t = 0.3$ und $t = 0.5$ in exakter Lösung und mit HF-Näherung. Dargestellt sind jeweils die Gewichte G_{λ}^{-} im jeweiligen Energiekanal. Die Kanalbreite beträgt 0.02.

$U_{ij} \approx \frac{1}{r_{max}} \approx 0.3$). Wegen der ungeradzahigen Kantenlänge des Gitters ist die Einteilchenzustandsdichte nicht symmetrisch um die Fermienergie.

Was man sieht, ist, daß es keine signifikanten Abweichungen zwischen dem Ergebnis der exakten Rechnung und der HF-Näherung gibt. Die exakte Einteilchenzustandsdichte stimmt an den Bandkanten nicht schlechter mit der HF-Näherung überein als am Rand der harten Lücke. Auch für verschiedene Transfermatrizelemente lassen sich keine wesentlichen Unterschiede in der Übereinstimmung ausmachen. Die Kompensation zwischen den Systemen mit N , $N + 1$ und $N - 1$ Teilchen, die im klassischen Grenzfall dafür sorgt, daß die HF-Näherung die richtige Einteilchenzustandsdichte liefert, scheint damit auch im Quanten-Coulomb-Glas zu funktionieren.

Einen genaueren Einblick in den Mechanismus gibt die Abb. 3.3. Sie zeigt einen Vergleich zwischen HF-Näherung und exakter Lösung für ein System mit $g = 16$ und $K = 0.5$ für eine Realisierung des Zufallspotentials. Man sieht, daß die Übereinstimmung der Einteilchenenergien jeweils in der Nähe der Fermienergie am besten ist. Bei der exakten Lösung sind hier auch die Gewichte $G_{\lambda}^{-} = \sum_i |\langle \psi_{\lambda}^{N-1} | \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle|^2$ bzw. $G_{\lambda}^{+} = \sum_i |\langle \psi_{\lambda}^{N+1} | \hat{c}_i^{\dagger} | \psi_0^N \rangle|^2$ in den Energiekanälen am größten. Was bedeutet das für die Zustände? Die G_{λ}^{\pm} sind Eins, wenn sich die Zustände des Systems mit $N + 1$ und $N - 1$ Teilchen als Slaterzustände des Grundzustandes von N mit einem zusätzlichen Erzeuger bzw. Vernichter darstellen lassen.⁴ Große G_{λ}^{\pm} in den Energiekanälen nahe der Fermienergie heißt damit, daß der Grundzustand von N sowie Grundzustand und niedrige angeregte Zustände von $N + 1$ bzw. $N - 1$ gut durch einen Slaterzustand angenähert werden.⁵ Weiter zur Bandkante werden die G_{λ}^{\pm} in den einzelnen Kanälen immer geringer, weil die exakten höher angeregten Zustände immer schlechter durch Slaterzustände zu beschreiben sind. Auf die Einteil-

⁴Siehe z.B. die Ableitung der Einteilchenzustandsdichte für wechselwirkungsfreie Teilchen in Anhang 1.

⁵Wie man sieht, ist das besonders nahe am klassischen Limes ($t = 0.03$) und in Richtung Mean-Field ($t = 0.5$) der Fall.

chenzustandsdichte hat diese schlechtere oder bessere Beschreibung der exakten Zustände durch HF-Slaterzustände allerdings kaum Einfluß, weil sich gleichzeitig auch die Einteilchenenergien aufspalten. Offensichtlich gleicht diese Aufspaltung der G_λ^\pm auf verschiedene Energiekanäle $E_\lambda^{N\pm 1} - E_0^N$ im Mittel gerade die Verschiebung der Einteilchenenergien gegenüber der HF-Näherung aus. Dieser Ausgleich funktioniert immer, egal, ob die exakten Zustände aus wenigen oder sehr vielen HF-Zuständen gemischt sind. Bei Mittelung über viele Realisierungen erhält man so annähernd dieselbe Einteilchenzustandsdichte. Zusammenfassend ergibt sich also der Befund:

- Die HF-Näherung beschreibt die Einteilchenzustandsdichte im gesamten Band sehr gut.

3.4 Exakte Lösung: Lokalisierungseigenschaften

Räumliche Lokalisierung im wechselwirkenden System

Eine direkte Verallgemeinerung des anschaulichen Konzepts der Anderson-Lokalisierung bei Einteilchenzuständen auf wechselwirkende Systeme ist aus mehreren Gründen nicht möglich:

1. Einteilchenzustände sind in Vielteilchensystemen nicht definiert. Ein Vielteilchenzustand selbst wiederum entspricht immer einer ausgedehnten Ladungsverteilung.
2. Die Vielteilcheneigenschaften werden in einem wechselwirkenden System nicht von den Eigenschaften der Einteilchenanregungen, sondern von höheren Anregungen bestimmt, die sich nicht auf Einteilchenanregungen zurückführen lassen. In einem Vielteilchensystem kann man ganz verschiedene „Lokalisierungen“ für Einteilchenanregungen, Teilchen-Loch-Anregungen, Zweiteilchenanregungen und/oder auch höhere Anregungen betrachten, ohne daß a priori der Leitwert des Systems im thermodynamischen Grenzfall etwas mit dem Grenzverhalten der Lokalisierungsmaße zu tun haben muß.

Im Vielteilchensystem ist damit zunächst der Gleichstromleitwert die natürliche Größe, die man anschauen muß, wenn man wissen möchte, ob das System isolierend oder metallisch ist. Der Leitwert ist jedoch eine komplizierte Größe: Er ist eine Zweiteilchengreensfunktion, die im Rahmen des Systems mit N Teilchen berechnet werden muß und empfindlich von der exakten Kenntnis der *angeregten* Zustände desselben Systems abhängt. Der Leitwert beinhaltet außerdem komplizierte Grenzübergänge, wenn man zu $\omega = 0$ und $T = 0$ geht (siehe Anhang 1). Die Bestimmung des MIT anhand des Leitwerts verlangt nun zusätzlich die Untersuchung des Skalenverhaltens dieser empfindlichen Größe, was nur bei großen Systemen numerisch funktioniert (siehe Abschnitt 2.7.).

Auch ist der Leitwert auf Grund des Differenzterms im Stromoperator zwischen nach rechts und nach links hüpfenden Teilchen der physikalischen Anschauung schwerer zugänglich. Die Vorzüge des Modells der Einteilchenlokalisierung bei der physikalischen Argumentation gehen bei der Argumentation mit dem Leitwert verloren.

Aus diesen Gründen wäre es sehr günstig, wenn sich eine physikalisch sinnvolle Verallgemeinerung des Konzepts der Einteilchenlokalisierung auf wechselwirkende Systeme vornehmen ließe. „Physikalisch sinnvoll“ heißt, daß diese Verallgemeinerung folgende Forderungen erfüllen sollte:

- a) Sie sollte für Vielteilchenzustände definiert sein,

- b) sie sollte die Idee der räumlichen Lokalisierung einfangen,
- c) sie sollte einfacher zu berechnen sein als der Leitwert und „robuster“,
- d) sie sollte sich im Einteilchenfall direkt auf ein gebräuchliches Maß für die Lokalisierung von Einteilchenzuständen reduzieren, und
- e) sie sollte über die Kalkulation eines Lokalisierungs-Delokalisierungsübergangs die Bestimmung des MIT ermöglichen.

Wir werden im folgenden zwei Vorschläge für solche Lokalisierungskonzepte im Fall von Systemen mit Wechselwirkung auf diese Kriterien hin untersuchen und danach ein eigenes Konzept vorstellen, was zumindest a) bis d) sicher erfüllt.

Fock-Partizipationszahl

Wie wir in Kapitel 2 gesehen haben, ist das einfachste Maß für die Anderson-Lokalisierung eines Einteilchenzustands die inverse Partizipationszahl (2.4), die direkt angibt, wie stark der Einteilchenzustand auf verschiedene Platz-Basiszustände „verteilt“ ist. Was ist, wenn man diese Größe direkt auf Vielteilchenzustände verallgemeinert? Auch hier läßt sich vollkommen analog ein einfaches Maß definieren, das angibt, wie viele einzelne Zustände der Vielteilchenbasis an einem exakten Vielteilcheneigenzustand beteiligt sind, die Fock-Raum-Partizipationszahl. Sie ist definiert durch

$$P_{\text{Fock}}^{-1}(\lambda) = \sum_i |\langle \psi_\lambda | \{i\} \rangle|^4 ,$$

wobei $|\psi_\lambda\rangle$ der Vielteilcheneigenzustand ist und $|\{i\}\rangle$ ein Vielteilchenbasiszustand. Inwiefern genügt dieses Maß den obigen Forderungen?

a) Definiertheit für Vielteilchenzustände: Diese Forderung ist natürlich klar erfüllt. Die Fock-Raum-Partizipationszahl kann für jeden Vielteilcheneigenzustand berechnet werden.

b) Einfangen der Idee räumlicher Lokalisierung: Das ist bereits problematischer: Die Fock-Raum-Partizipationszahl ist primär ein Maß für Lokalisierung im Fock-Raum. Das Konzept der Lokalisierung im Fock-Raum ist immer anwendbar, wenn ein Hamilton-Operator in einen Referenzteil und in einen Störungsteil zerlegt werden kann. Die Lokalisierung der exakten Eigenzustände im Fock-Raum bezüglich einer Basis aus den Eigenzuständen des Referenzsystems beschreibt dann, wie stark die Störung die ursprünglichen Eigenzustände mischt. Der Idee einer räumlichen Lokalisierung kann sie sich nur annähern, wenn als Referenzsystem ein klassisches System benutzt werden kann, d.h., wenn der Fock-Raum von einer Vielteilchen-Platz-Basis aufgespannt wird und die Abweichungen vom klassischen Fall klein sind. In diesem Fall bedeutet eine stärkere Mischung der Basis tatsächlich eine Abnahme der räumlichen Lokalisierung.⁶

In einer anderen Basis ist überhaupt keine Aussage möglich, der Zusammenhang mit räumlicher Lokalisierung ist kompliziert: Die stärkere Mischung der Basiszustände kann je nach System sowohl zu schlechterem Transport und stärkerer räumlicher Lokalisierung führen als auch zu besserem Transport und schwächerer Lokalisierung. Weil die Fock-Raum-Partizipationszahl eine Eigenschaft des ganzen Vielteilchensystems ist, nicht eine, die sich

⁶Auch hier ist aber ein Umdenken nötig: Jeder Vielteilchenzustand einer Platz-Basis ist an sich schon eine ausgedehnte Ladungsverteilung, trotzdem ist seine Fock-Raum-Partizipationszahl immer Eins. Intuitiv würde man natürlich einen Platz-Basiszustand als „räumlich lokalisiert“ bezeichnen, weil man ihn als Slater-Determinante aus auf einem Platz lokalisierten Einteilchenzuständen darstellen kann. Außer in diesem Grenzfall kann man umgekehrt im allgemeinen aber einen Vielteilchenzustand nicht einfach in viele Einteilchenzustände „auftrennen“ und die Vielteilchenlokalisierung auf einen unterschiedlichen Grad an Einteilchenlokalisierung von Zuständen in einer Slater-Determinante zurückführen.

auf ein einzelnes Teilchen im System bezieht, kann sie so die Idee der räumlichen Lokalisierung von Teilchen selbst in einer Platz-Basis nur nahe am klassischen Grenzfall einfangen (siehe auch d).

c) Einfachere Berechenbarkeit als der Leitwert: Für ein Vielteilchensystem, das in Platz-Basis diagonalisiert wurde, ist die Fock-Raum-Partizipationszahl bezüglich dieser Basis eine einfach berechenbare Größe:

$$P_{\text{Fock}}^{-1}(\lambda) = \sum_i |\langle \psi_\lambda | \{i\} \rangle|^4 = \sum_i \left| \sum_l \alpha_{l\lambda} \langle \{l\} | \{i\} \rangle \right|^4 = \sum_i |\alpha_{i\lambda}|^4.$$

Kompliziert wird die Rechnung, wenn in einer anderen Vielteilchenbasis $|\{\rho\}\rangle = \hat{b}_{\rho_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\rho_N}^\dagger |0\rangle$ diagonalisiert wird, die Fock-Raum-Partizipationszahl aber zur Platz-Basis gefragt ist:

$$\begin{aligned} P_{\text{Fock}}^{-1}(\lambda) &= \sum_i \left| \sum_\rho \alpha_{\rho\lambda} \langle \{\rho\} | \{i\} \rangle \right|^4 \\ &= \sum_i \left| \sum_\rho \alpha_{\rho\lambda} \langle 0 | \hat{b}_{\rho_N} \dots \hat{b}_{\rho_1} \hat{c}_{i_1}^\dagger \dots \hat{c}_{i_N}^\dagger | 0 \rangle \right|^4 \quad (3.4) \\ &= \sum_i \left| \sum_\rho \alpha_{\rho\lambda} \sum_{\mu_1} k_{i_1\mu_1} \dots \sum_{\mu_N} k_{i_N\mu_N} \langle 0 | \hat{b}_{\rho_N} \dots \hat{b}_{\rho_1} \hat{b}_{\mu_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\mu_N}^\dagger | 0 \rangle \right|^4 \\ &= \sum_i \left| \sum_\rho \alpha_{\rho\lambda} \sum_k V(P_k) \prod_{t=1}^N \sum_{P_k(\rho_t)} k_{i_t P_k(\rho_t)} \right|^4, \end{aligned}$$

wobei $P_k(\rho_t)$ der Wert ist, der bei der k -ten Permutation von $\rho_1 \dots \rho_N$ an die Stelle t tritt und $V(P_k)$ das Vorzeichen von $\langle 0 | \hat{b}_{\rho_N} \dots \hat{b}_{\rho_1} \hat{b}_{P_k(\rho_1)}^\dagger \dots \hat{b}_{P_k(\rho_N)}^\dagger | 0 \rangle$ unter dieser Permutation ist. Durch diese Permutationen, die aus den Slaterdeterminanten der Basisvektoren entstehen, ist das ein extrem unhandlicher Ausdruck, der selbst bei kleinen Basissätzen sehr viel Rechenzeit erfordert. Einfacher als der Leitwert ist die Fock-Raum-Partizipationszahl damit nur bezüglich der Basis zu berechnen, in der auch der Hamilton-Operator diagonalisiert wurde. Da sie keinerlei kritische Grenzübergänge beinhaltet, ist sie allerdings „robuster“ als der Leitwert.

d) Reduktion auf ein gebräuchliches Lokalisierungsmaß im Einteilchenfall: Diese Bedingung ist nur sehr begrenzt erfüllt. Die Fock-Raum-Partizipationszahl bezüglich einer Vielteilchen-Platz-Basis kann für Vielteilchenzustände in einem nichtwechselwirkenden System zunächst problemlos berechnet werden. Wenn $\hat{b}_\mu |0\rangle$ ein Einteilchenzustand ist, ergibt sie sich, analog zur obigen Rechnung (3.4), für den Vielteilchenzustand $|\{\lambda\}\rangle = \hat{b}_{\lambda_1} \dots \hat{b}_{\lambda_N} |0\rangle$ zu

$$P_{\text{Fock}}^{-1}(\lambda) = \sum_i \left| \sum_k V(P_k) \prod_{t=1}^N \sum_{P_k(\lambda_t)} k_{i_t P_k(\lambda_t)} \right|^4,$$

sie erlaubt aber keinen einfachen Rückschluß auf die $k_{i\mu}$ und damit auf die üblichen Maße für Einteilchenlokalisierung. Eine bestimmte Fock -Raum -Platz -Basis -Partizipationszahl eines Vielteilchenzustands eines nichtwechselwirkenden Systems kann damit ganz verschiedenen Überlagerungen von Einteilchenlokalisierungen entsprechen. Insbesondere können die Zustände an der Fermienergie unterschiedlich lokalisiert sein. Selbst wenn einzelne Einteilchenzustände bereits delokalisiert sind, muß das nicht am Skalenverhalten der Fock-Raum-Partizipationszahl zu sehen sein, weil in ihr auch das systemgrößenabhängige

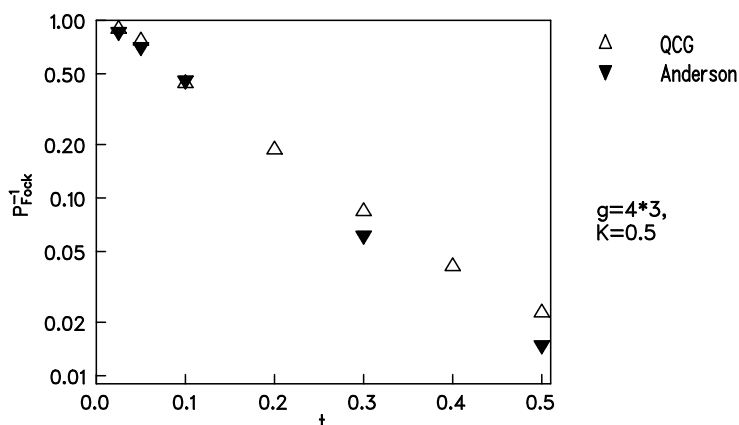


Abb. 3.4 Inverse Fock-Raum-Partizipationszahlen bezüglich einer Platz-Basis des Vielteilchengrundzustands beim Quanten-Coulomb-Glas und beim Anderson-Modell der Lokalisierung

Verhalten der noch lokalisierten Einteilchenzustände eingeht.⁷ Lediglich ein Rückschluß auf die *mittlere* Einteilchenlokalisierung ist möglich.

Weder aus der Systemgrößenabhängigkeit der Fock-Raum-Partizipationszahl bezüglich einer Platzbasis noch aus ihrem Wert lassen sich damit i.a. Schlußfolgerungen auf Einteilchenlokalisierungseigenschaften ziehen, und schon gar nicht auf den MIT.

e) Bestimmbarkeit des MIT aus einem Lokalisierungs-Delokalisierungsübergang: Für ein wechselwirkendes Systems ist ein Rückschluß auf den MIT noch komplizierter, so daß wir zu dieser Frage gar nichts aussagen können.

Die inverse Grundzustands-Fock-Raum-Partizipationszahl bezüglich einer Platzbasis für das Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung ist höher als die des Anderson-Modells, weil die Einteilchenzustände bei der HF-Näherung im Mittel stärker lokalisiert sind als beim Anderson-Modell (siehe Kapitel 2). Für das Quanten-Coulomb-Glas in exakter Lösung lassen sich aus den bisherigen Überlegungen allerdings keine Schlußfolgerungen für die inverse Fock-Raum-Partizipationszahl des exakten Vielteilchengrundzustands ziehen.

Abb. 3.4 zeigt inverse Fock-Raum-Partizipationszahlen für verschiedene Transfermatrixelemente beim Anderson-Modell und beim Quanten-Coulomb-Glas in exakter Lösung. Man sieht, daß die Wechselwirkung für $t > 0.1$ eine verstärkte Lokalisierung bezüglich der Platzbasis im Fockraum bewirkt. Für $t = 0.1$ zeigen Quanten-Coulomb-Glas und Anderson-Modell identische Werte, und es kann nicht ausgeschlossen werden, daß sich für sehr kleine t das Verhalten sogar umdreht, d.h., daß Wechselwirkung zu schwächerer Lokalisierung führt. Damit zeigen die Daten keinen Widerspruch zu den Ergebnissen von Talamantes *et al.* [TPE96], wo für größere Gitter mit einer Näherungsmethode, die nur für sehr kleine Transfermatrixelemente funktioniert (siehe Abschnitt 4.1.), ein delokalisierender Einfluß der Wechselwirkung im Fockraum bezüglich der Platz-Basis gefunden wird. Was diese stärkere oder schwächere Lokalisierung im Fock-Raum für die Lage des MIT bedeutet, ist aber nicht klar.

Partizipationszahl der Verteilung einer Extraladung

Es wurde vorgeschlagen [EP95], Lokalisierung in einem Vielteilchensystem über die räum-

⁷Was man eventuell über die Systemgrößenabhängigkeit eindeutig finden kann, ist, ob alle Einteilchenzustände delokalisiert sind. Ob das etwas mit dem MIT zu tun hat, hängt von der Einteilchenzustandsdichte des konkreten Systems ab.

liche Verteilung der Ladungsdifferenz zwischen den Zuständen desselben Vielteilchensystems mit N und $N + 1$ Teilchen zu definieren. Die Idee ist, daß das „Zerfließen“ der Ladung eines zusätzlichen Teilchens, das in ein Vielteilchensystem injiziert wird, etwas über die Beweglichkeit von Ladungen in diesem System und damit über die Lokalisierung verrät. Inwieweit genügt diese Idee unseren Forderungen a) bis e) ?

a) Definiertheit für Vielteilchenzustände und c) Einfachere Berechenbarkeit als der Leitwert: Die Partizipationszahl der Verteilung einer Extraladung $P_{\Delta n}^{-1}$ läßt sich sehr leicht aus der Differenz der Grundzustandsbesetzungszahlen zwischen dem System mit N und $N + 1$ Teilchen berechnen:

$$P_{\Delta n}^{-1} = \sum_i |\langle \psi_0^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i | \psi_0^{N+1} \rangle - \langle \psi_0^N | \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle|^2 .$$

d) Reduktion auf ein gebräuchliches Lokalisierungsmaß im Einteilchenfall: Im Einteilchenfall reduziert sich das tatsächlich auf die übliche inverse Partizipationszahl des Einteilchenzustands $\hat{b}_{N+1}^\dagger |0\rangle$, in den die zusätzliche Ladung injiziert wird:

$$\begin{aligned} P_{\Delta n}^{-1} &= \sum_i | \langle 0 | \hat{b}_{N+1} \hat{b}_N \dots \hat{b}_1 \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N \hat{b}_{N+1}^\dagger |0\rangle - \langle 0 | \hat{b}_N \dots \hat{b}_1 \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger |0\rangle |^2 \\ &= \sum_i \left| \sum_{\mu=1}^{N+1} k_{i\mu}^2 - \sum_{\mu=1}^N k_{i\mu}^2 \right|^2 \\ &= \sum_i |k_{i, N+1}|^4 . \end{aligned}$$

b) Einfangen der Idee räumlicher Lokalisierung: Dieser Punkt erweist sich bei wechselwirkenden Systemen als ernsthaftes Problem. Anders als die Fock-Raum-Partizipationszahl bezieht sich die Ladungsdifferenz zwar auf die Eigenschaften eines (injizierten) Teilchens und hängt so viel unmittelbarer mit dem Konzept der räumlichen Lokalisierung zusammen, die Referenzgröße $n_i(N + 1) - n_i(N)$ ist aber unglücklich gewählt: Die Addition eines zusätzlichen Elektrons zu einem ungeordneten wechselwirkenden System wird oft eben nicht, je nach Grad des „Zerfließens“ der Ladung, zu jeder vorhandenen Ladung etwas addieren, sondern kann auch wegen der Frustration des Systems durch den Wettbewerb zwischen Unordnung und Wechselwirkung zu einer völligen Neuordnung der Ladungsverteilung führen. Deshalb führt die einfache Berechnung von $P_{\Delta n}^{-1}$ zu einer Überschätzung der Delokalisierung.

Das wird bereits beim klassischen Coulomb-Glas einsichtig, wo wir wissen, daß die Elektronen vollständig lokalisiert sind: Die Grundzustände der Systeme mit N und $N + 1$ Teilchen können sich drastisch unterscheiden, so daß die Ladungsdifferenz zwischen ihnen auf mehr als einem Platz verteilt ist und sich effektiv $P_{\Delta n}^{-1} > 1$ ergibt. Im allgemeinen wird die Methode immer fehlschlagen, wenn das Hinzufügen eines zusätzlichen Elektrons die Ladung an einem bestimmten Platz vermindert, weil die Ladungsdifferenz dann keine wohldefinierte Wahrscheinlichkeitsverteilung mehr ist (siehe Abb. 3.5). Die Idee, über die Betrachtung der Eigenschaften eines injizierten Teilchens ein Maß für räumliche Lokalisierung in Vielteilchensystemen zu gewinnen, das a)-e) erfüllt, führt weiter, nur ist die Partizipationszahl der Extraladung nicht die geeignete Referenzgröße.

Rückkehrwahrscheinlichkeit

Als geeignete Referenzgröße erweist sich die Rückkehrwahrscheinlichkeit R_p der Extraladung. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß das zusätzliche Elektron oder das zusätzliche Loch, das an einem bestimmten Platz in das System injiziert wird, in unendli-

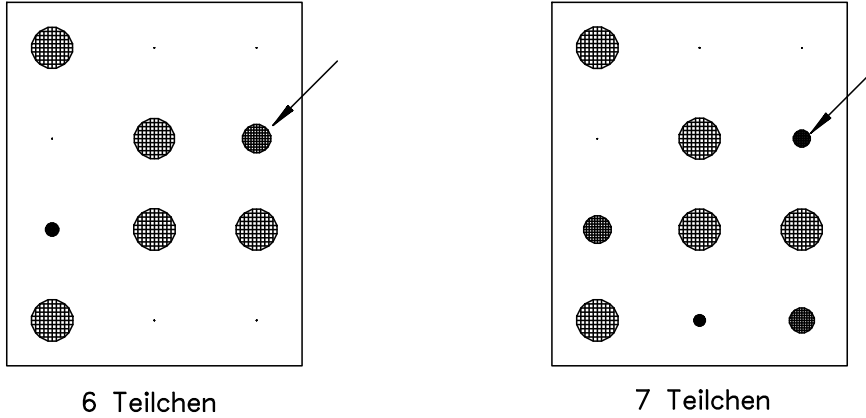


Abb. 3.5 Vergleich der Grundzustände eines Quanten-Coulomb-Glases mit 6 und 7 Teilchen. Der Durchmesser der Kreise ist proportional zur Ladungsdichte auf dem Gitterplatz. Das Hinzufügen eines zusätzlichen Elektrons reduziert die Ladungsdichte an dem mit einem Pfeil gekennzeichneten Gitterplatz.

cher Zeit zu diesem Platz zurückkehrt. Die Rückkehrwahrscheinlichkeit erfüllt die Kriterien a)-d):

a) Definiertheit für Vielteilchenzustände und c) Einfachere Berechenbarkeit als der Leitwert: Die Rückkehrwahrscheinlichkeit eines Quasiteilchens, das am Platz i in ein Fermionen-Vielteilchensystem injiziert wird, ist definiert als (siehe Anhang 1)

$$R(i, t) = |\langle \psi_0^N | [\hat{c}_i^\dagger(t), \hat{c}_i(0)]_+ | \psi_0^N \rangle|^2 .$$

Im Langzeitlimit und bei Mittelung über alle Plätze wird daraus die eigentliche Rückkehrwahrscheinlichkeit einer Einteilchenanregung:

$$R_p = \frac{1}{g} \sum_i \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^4 + \frac{1}{g} \sum_i \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle|^4 .$$

Spektrale Zerlegung und Bezug auf die Zustandsdichte führt schließlich auf die energieaufgelöste Rückkehrwahrscheinlichkeit:

$$\begin{aligned} R_p(\epsilon) &= \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \sum_i \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^4 \delta(E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \epsilon) \\ &+ \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \sum_i \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle|^4 \delta(E_0^N - E_\lambda^{N-1} - \epsilon) , \end{aligned} \quad (3.5)$$

die die Beiträge der Vielteilchenzustände verschiedener Energien zur mittleren Rückkehrwahrscheinlichkeit angibt. Der Aufwand zur Berechnung der energieaufgelösten Rückkehrwahrscheinlichkeit gleicht damit bis auf das zusätzliche Quadrat bei der Überlagerung der Zustände dem zur Berechnung der Einteilchenzustandsdichte. Die Größe verhält sich unkompliziert im Verhältnis zum Leitwert, weil keine Grenzübergänge erforderlich sind.

b) Einfangen der Idee räumlicher Lokalisierung: Die Rückkehrwahrscheinlichkeit fängt die Idee der räumlichen Lokalisierung besser ein als alle anderen bisher betrachteten Vielteilchenmaße: Die Rückkehrwahrscheinlichkeit ist eine Eigenschaft einer Einteilchenanregung, und bereits von der Definition her ist ersichtlich, daß sie unmittelbar etwas mit Transporteigenschaften zu tun hat. Im Falle völlig lokalisierter Einteilchenanregungen gilt $R_p = 1$, d.h., das injizierte Quasiteilchen entfernt sich niemals vom Startort. Bei völlig delokalisierten Einteilchenanregungen gilt $R_p \sim \frac{1}{g}$, d.h., das injizierte Quasiteilchen erreicht mit gleicher Wahrscheinlichkeit jeden Platz im System. Schließlich ist ein

eindeutiger Rückschluß von der Rückkehrwahrscheinlichkeit auf Lokalisierungsmaße im nichtwechselwirkenden Fall möglich:

d) Reduktion auf ein gebräuchliches Lokalisierungsmaß im Einteilchenfall: Alle Ausdrücke mit Rückkehrwahrscheinlichkeiten gehen im wechselwirkungsfreien Fall in die entsprechenden Ausdrücke für die inversen Partizipationszahlen in bezug auf eine Platz-Basis über (siehe Anhang 1). Das ermöglicht einen direkten Vergleich der energieabhängigen inversen Partizipationszahl zwischen Anderson-Modell, Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung und der energieaufgelösten Rückkehrwahrscheinlichkeit beim Quanten-Coulomb-Glas in exakter Lösung.

e) Bestimmbarkeit des MIT aus einem Lokalisierungs-Delokalisierungsübergang: Die Frage, ob eine Kalkulation des MIT über eine Analyse der Systemgrößenabhängigkeit der energieaufgelösten Rückkehrwahrscheinlichkeit möglich ist, bedarf noch der Untersuchung. Zwar ist ein System mit $R_p = 1$ ein Isolator und ein System mit $R_p \sim \frac{1}{g}$ sicherlich ein Leiter, die Betrachtung dieser mittleren Rückkehrwahrscheinlichkeit ist aber für eine genaue Bestimmung des MIT zu grob. Die Frage ist, ob sich der MIT über die Untersuchung der energieaufgelösten Rückkehrwahrscheinlichkeit in der Umgebung der Fermienergie genauer eingrenzen läßt. Ein direkter gedanklicher Vergleich mit dem Kubo-Gleichstromleitwert ist wegen der Grenzübergänge, die in diesem Konzept stecken, schwierig. Möglicherweise liefert ein anderes Herangehen an das Transportproblem über einen Landauer-Büttiker-artigen [D97] Denkansatz, der die Tunnelwahrscheinlichkeit von Elektronen durch das System betrachtet, mehr Klarheit. Immerhin gibt es Ähnlichkeiten im Verhalten von Rückkehrwahrscheinlichkeit und Gleichstromleitwert (siehe Abschnitt 3.5.).

Welche wechselwirkungsinduzierten Abweichungen zwischen Partizipationszahl im HF-Fall und Rückkehrwahrscheinlichkeit beim Quanten-Coulomb-Glas in exakter Lösung sind nach unserer bisherigen Diskussion zu erwarten?

Die energieaufgelöste Rückkehrwahrscheinlichkeit stimmt in ihrer Struktur bis auf das zusätzliche Quadrat in den $G'_\lambda{}^\pm$ mit der Einteilchenzustandsdichte überein. Wir haben gesehen, daß die HF-Näherung die Einteilchenzustandsdichte richtig beschreibt, weil die Verminderung der Gewichte $G_\lambda{}^\pm$ zur Bandkante durch ihre Verteilung auf immer mehr Einteilchenenergien $E_\lambda^{N\pm 1} - E_0^N$ im Mittel wieder kompensiert wird (siehe Abschnitt 3.3.). Im Fall der Rückkehrwahrscheinlichkeit kann das so nicht mehr funktionieren: Die Gewichte⁸ $G'_\lambda{}^\pm$ sind jetzt für eine vollständige Kompensation zu klein und ergänzen sich bei Mittelung zu einem Wert, der niedriger ist als der HF-Wert. Die exakte Lösung führt damit für festes t im gesamten Band zu kleineren Werten für die Rückkehrwahrscheinlichkeit als die HF-Näherung. Je mehr HF-Zustände für ein festes t durch einen exakten Zustand gemischt werden, desto kleiner werden die $G'_\lambda{}^\pm$ im Verhältnis zu den $G_\lambda{}^\pm$, und umso größer sollte die Korrektur sein. Damit erwarten wir für ein festes t an der Fermienergie die geringste Abweichung, zur Bandkante zu dagegen immer größere Abweichungen.

Die t -Abhängigkeit der Korrektur ist nicht so einfach vorhersagbar, weil wir nicht wissen, wie sich der Unterschied in den Einteilchenenergien zwischen HF-Näherung und exakter Lösung relativ zur Aufspaltung der exakten Gewichte auf die Energiekanäle verschiebt. Klar ist lediglich, daß der Unterschied zwischen HF-Näherung und exakter Lösung im klassischen Grenzfall und im Mean-Field-Grenzfall verschwinden muß.

8

$$G'_\lambda{}^+ = \sum_i |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^4 \quad \text{bzw.} \quad G'_\lambda{}^- = \sum_i |\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle|^4$$

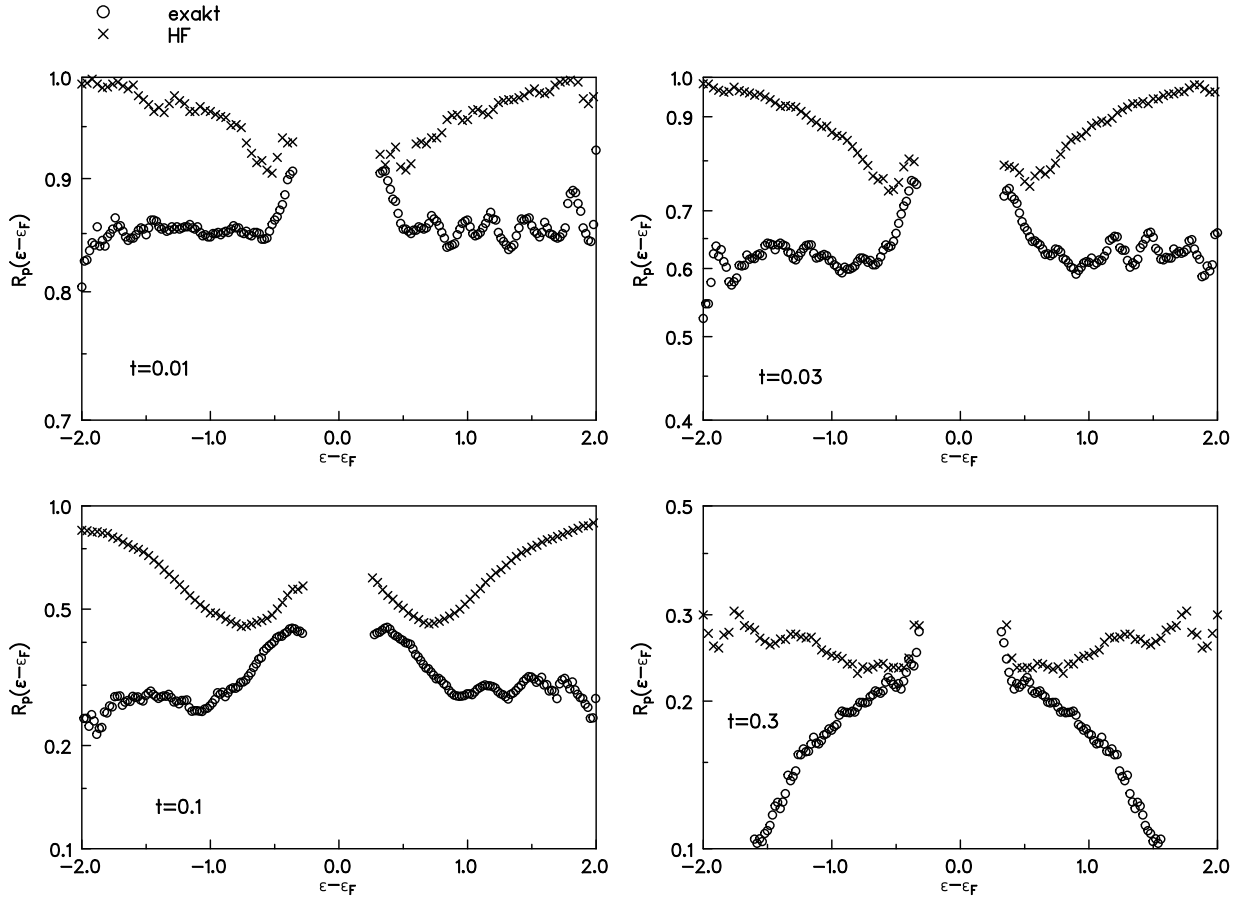


Abb. 3.6 Energieaufgelöste Rückkehrwahrscheinlichkeiten eines Quanten-Coulomb-Glases ($g = 4 \times 3$, $K = 0.5$) in HF-Näherung und in exakter Lösung

Abb. 3.6 zeigt die Rückkehrwahrscheinlichkeiten für ein Quanten-Coulomb-Glas mit $g = 4 \times 3$ und verschiedenen t im Vergleich zu den jeweiligen inversen Partizipationszahlen der HF-Näherung. Für festes t sieht man, daß die HF-Näherung die Rückkehrwahrscheinlichkeit tatsächlich im gesamten Band überschätzt, am wenigsten an der Fermienergie und immer stärker zu den Bandkanten.

Betrachtet man die t -Abhängigkeit, so nimmt der Unterschied zwischen $R_p(\epsilon_F)$ und $P^{-1}(\epsilon_F)$ bis $t = 0.1$ zu und dann wieder ab. Ab $t = 0.3$ unterscheiden sich $R_p(\epsilon_F)$ und $P^{-1}(\epsilon_F)$ kaum noch (siehe Abb. 3.8 a)).

Auf den ersten Blick verwundert aber, daß die Differenz zwischen $R_p(\epsilon_F)$ und $P^{-1}(\epsilon_F)$ bei $t = 0.1$ am größten ist und ab $t = 0.3$ fast verschwindet, obwohl der HF-Vielteilchengrundzustand bei $t = 0.3$ schlechter ist als bei $t = 0.1$. Nun ist, wie wir oben überlegt haben, die Kompensation nicht nur von der Aufspaltung der Zustände abhängig, sondern auch von der Verschiebung der Einteilchenenergien und funktioniert direkt an der Fermienergie eben bei $t = 0.1$ offensichtlich besser als bei $t = 0.3$. Noch größere t liegen dann näher zum Mean-Field Grenzfall, wo die HF-Näherung sowieso exakt wird.

Interessant ist es, für verschiedene t die Rückkehrwahrscheinlichkeit des Quanten-Coulomb-Glases in exakter Lösung mit dem Anderson-Modell der Lokalisierung zu vergleichen: Abb. 3.7 zeigt einen Plot von $R_p(\epsilon)$ vom Anderson-Modell der Lokalisierung und vom Quanten-Coulomb-Glas in exakter Lösung. Die Rückkehrwahrscheinlichkeit im Quanten-Coulomb-Glas hat stets ein Maximum an der Fermienergie und fällt zur Bandkante ab. Für das Anderson-Modell erhält man den üblichen Verlauf mit einem Minimum im Zentrum des

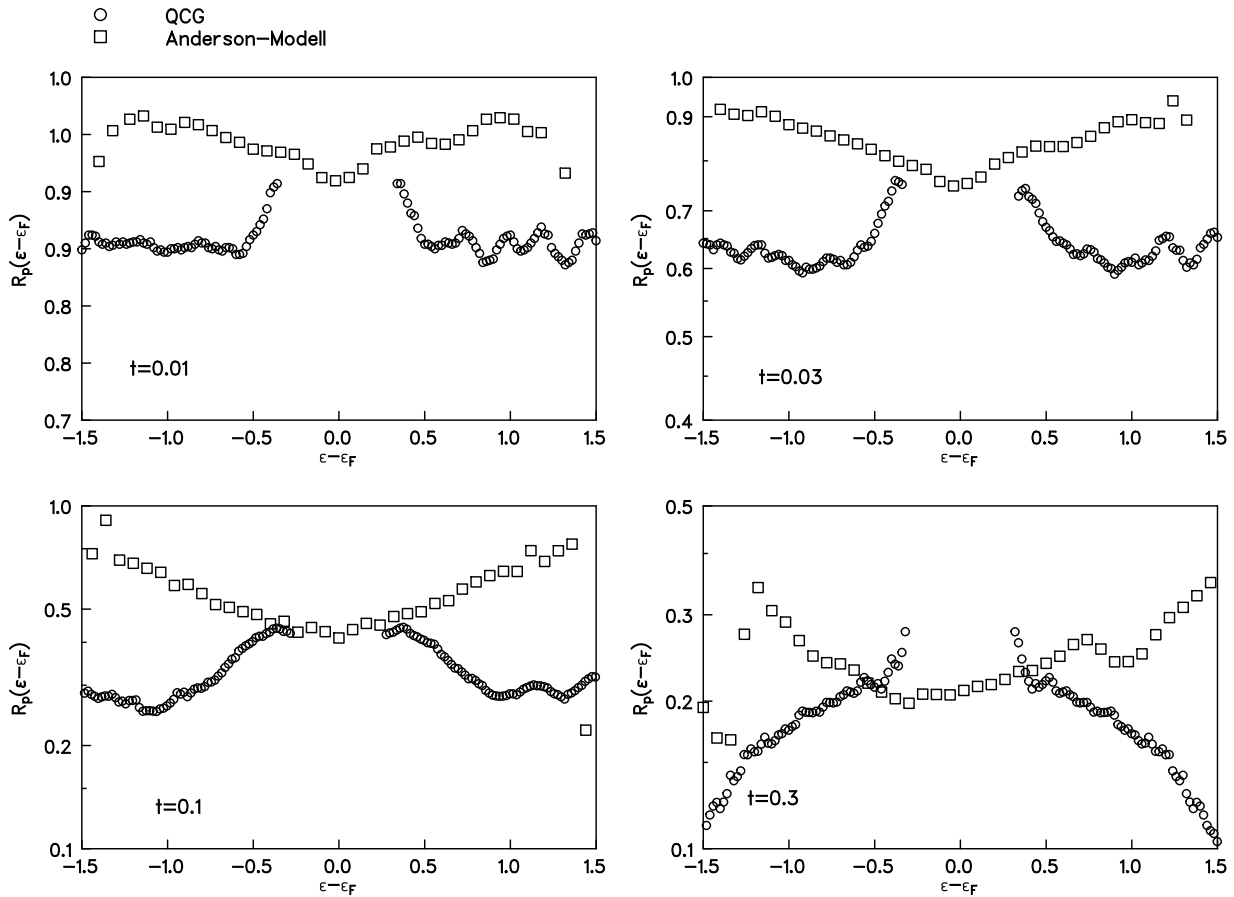


Abb. 3.7 Energieaufgelöste Rückkehrwahrscheinlichkeiten eines Quanten-Coulomb-Glases ($g = 4 \times 3, K = 0.5, W_0 = 1$) in exakter Lösung im Vergleich zum Anderson-Modell der Lokalisierung.

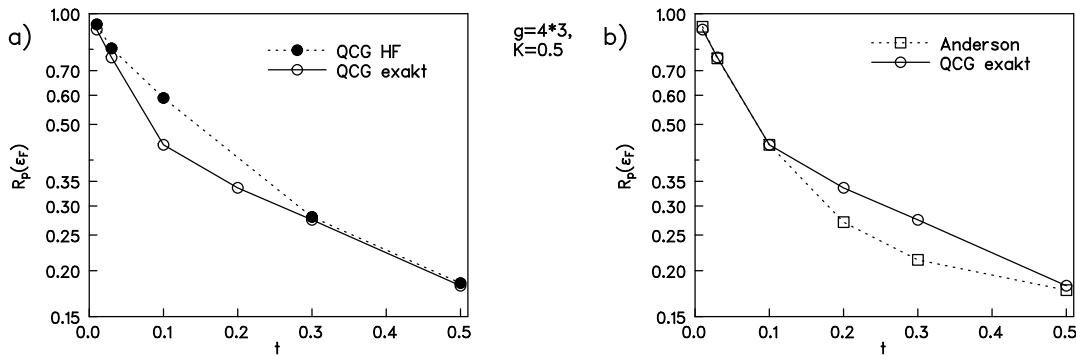


Abb. 3.8 Vergleich zwischen $R_p(\epsilon_F)$ beim System mit $g = 4 \times 3, K = 0.5$: a) Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung und in exakter Lösung; b) Anderson-Modell der Lokalisierung und Quanten-Coulomb-Glas in exakter Lösung

Bandes.⁹ An den Bandkanten gibt es damit für beliebige t eine wechselwirkungsinduzierte Tendenz zu schwächerer Lokalisierung.

Direkt an der Fermienergie (beim Quanten-Coulomb-Glas am Rand der Lücke) (Abb. 3.8 b)) ist das Verhalten komplizierter: Die wechselwirkungsinduzierte Erhöhung von $R_p(\epsilon_F)$

⁹Die Abnahme der Lokalisierung an der Bandkante bei $t = 0.3$ ist ein Bandstruktureffekt wegen der Kleinheit des Gitters, die bei größeren t zunehmend eine Rolle spielt.

bei der HF-Näherung im Verhältnis zum Anderson-Modell, die bei $t \approx 0.3$ am größten ist, reduziert sich in der exakten Lösung wieder t -abhängig – am meisten bei $t = 0.1$, weniger für sehr kleine t und kaum für $t > 0.3$, – so daß $R_p(\epsilon_F)$ des wechselwirkenden Systems letztlich für $t \geq 0.3$ größer ist als beim Anderson-Modell, bei $t = 0.1$ genauso groß ist und bei $t \leq 0.1$ möglicherweise sogar kleiner wird.

Mit der Rückkehrwahrscheinlichkeit als Maß für Lokalisierung bestätigt sich die Aussage der HF-Näherung „Wechselwirkung führt zu Lokalisierung“ damit qualitativ nur für große und mittlere Transfermatrizelemente, nicht jedoch für kleine.

Die Aussagen zur Rückkehrwahrscheinlichkeit seien abschließend noch einmal in zwei Thesen zusammengefaßt:

- Die HF-Näherung überschätzt die Rückkehrwahrscheinlichkeit im Vergleich zur exakten Lösung im ganzen Bereich, nur sehr wenig an der Fermienergie, zu den Bandkanten immer stärker.
- In der exakten Lösung ergibt sich für mittlere und große t eine größere Rückkehrwahrscheinlichkeit an der Fermienergie als beim nichtwechselwirkenden System, für kleine t dagegen eine gleiche oder möglicherweise eine kleinere.

3.5 Exakte Lösung: Leitwerte

Da noch nicht klar ist, inwiefern die Rückkehrwahrscheinlichkeit einen Rückschluß auf Leitwerte erlaubt, bleibt der Gleichstromleitwert im wechselwirkenden Fall die Größe, die man eigentlich betrachten muß, wenn man die Frage stellt, ob Wechselwirkung den Transport erhöht oder verringert. Der Leitwert eines wechselwirkenden Systems ergibt sich über den Kubo-Formalismus (siehe Anhang 1) zu (3.2). Um für ein endliches System den Gleichstromleitwert zu erhalten, muß das System an externe Kontakte angeschlossen werden. Diese Kontaktierung bewirkt wegen der endlichen Lebensdauer der Zustände eine „Ausschmierung“ der Delta-Peaks im frequenzabhängigen Leitwert bei den möglichen Anregungsenergien des Systems zu Lorenz-Kurven der Breite γ : Die Breite γ der Lorenz-Kurve ist dabei proportional zur Verlustrate, die in gröbster Näherung (siehe Anhang 1) über

$$\gamma \sim g_{\text{Kon}} \frac{\bar{n}}{N} \sim \frac{g_{\text{Kon}} N}{g N} \sim \frac{1}{L_x}$$

(g_{Kon} ist die Zahl der Gitterplätze an den Kontakten und \bar{n} die mittlere Besetzungszahl) mit den Dimensionen des Systems zusammenhängt. Der exakte Wert hängt dabei von der konkreten Art des Anschlusses ab.¹⁰ Ist man an Vergleichen zwischen Leitwerten interessiert, kann man den Proportionalitätsfaktor in gewissen Grenzen beliebig wählen, muß ihn aber für alle Systeme konstanthalten. Der Proportionalitätsfaktor sollte dabei mindestens so groß sein, daß im kleinsten Gitter durch die Lorenz-Verbreiterung eine glatte Kurve für den frequenzabhängigen Leitwert entsteht, da ansonsten der Gleichstromleitwert keine sinnvolle Extrapolation ist. Praktisch zeigt sich, daß bei glatter $G_{xx}(\omega)$ -Funktion die zahlenmäßigen Werte im Limes $\omega \rightarrow 0$ vom Proportionalitätsfaktor abhängen, die Relationen zwischen Gleichstromleitwerten bei verschiedenen t aber überhaupt nicht. Für das

¹⁰D.h. z.B. vom Transfermatrizelement zwischen den Gitterplätzen an der Systemgrenze und denen im Kontakt.

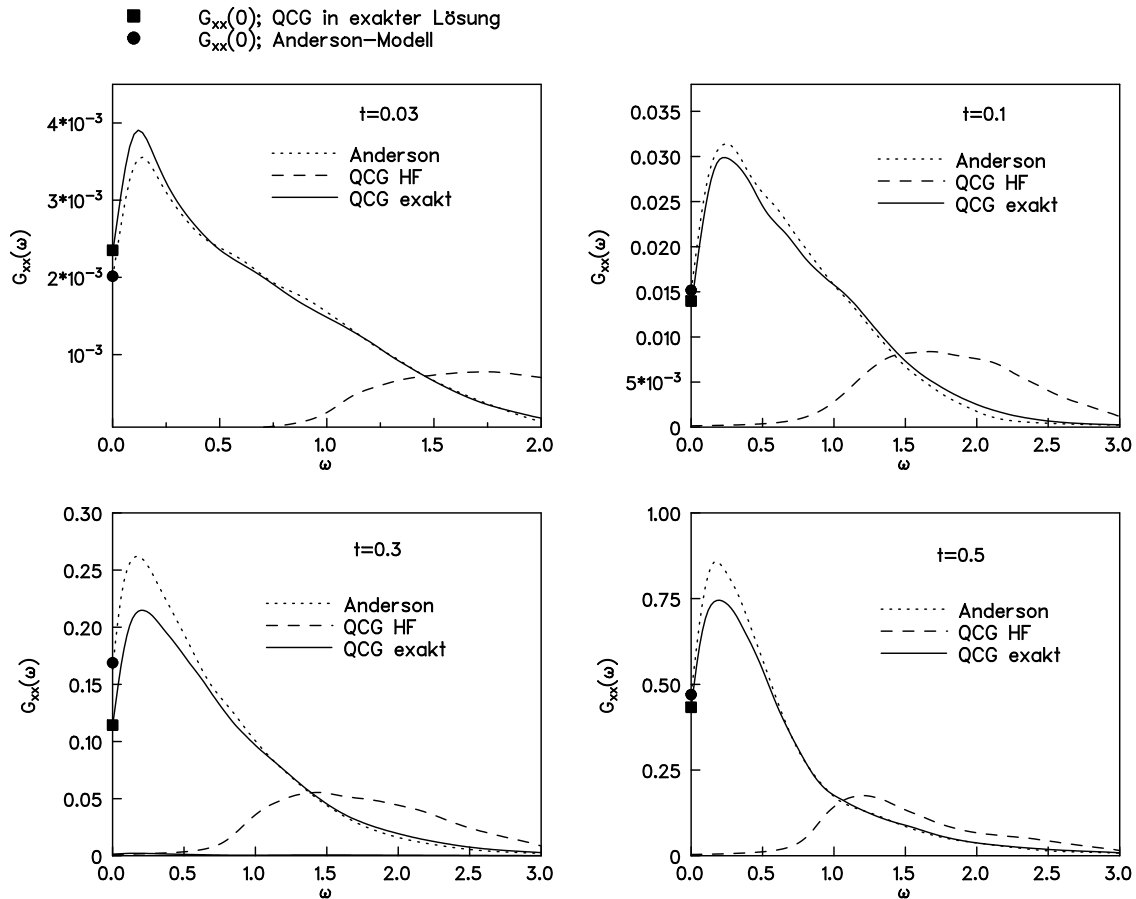


Abb. 3.9 Frequenzabhängige Leitwerte für ein System mit $g = 4 \times 3$, $K = 0.5$ mit $t = 0.03$, $t = 0.1$, $t = 0.3$ und $t = 0.5$

System mit $g = 4 \times 3$ und 630 – 1620 Realisierungen des Zufallspotentials erweist sich eine Verbreiterung von $\gamma = 0.1$ als günstig.

Da die Einteilchenzustandsdichte von der HF-Näherung für alle t gut beschrieben wird (siehe Abschnitt 3.3.) erwarten wir in HF-Näherung nach unseren Vorüberlegungen in Abschnitt 3.1. tatsächlich eine zu breite Lücke in der Teilchen-Loch-Anregungszustandsdichte und damit einen exakten Gleichstromleitwert, der stets größer ist als der HF-Gleichstromleitwert. Weil die falsche Lücke für kleine t größer ist als für große t , sollte der exakte Gleichstromleitwert bei kleinen t weiter über dem HF-Gleichstromleitwert liegen bei großen t .

Die Frage ist, ob die Anhebung des Gleichstromleitwerts stark genug ist, in Teilbereichen oder vielleicht sogar im ganzen Band den Wert für das nichtwechselwirkende System zu überschreiten. Die Überlegungen geben hier keinen Hinweis, weil die Differenz der Leitwerte zwischen Anderson-Modell und dem Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung dort groß ist, wo auch die Korrektur groß ist (kleine t) und dort kleiner wird, wo auch die Korrektur kleiner wird (größere t). Es ist damit alles eine Frage der verhältnismäßigen Veränderungen.

Abb. 3.9 zeigt den frequenzabhängigen Leitwert für ein System mit $g = 4 \times 3$ für verschiedene t . Betrachtet man die Gleichstromleitwerte $G_{xx}(0)$, so kann man feststellen:

1. Der exakte Gleichstromleitwert des Quanten-Coulomb-Glases liegt tatsächlich immer über dem Gleichstromleitwert des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung. Daß die

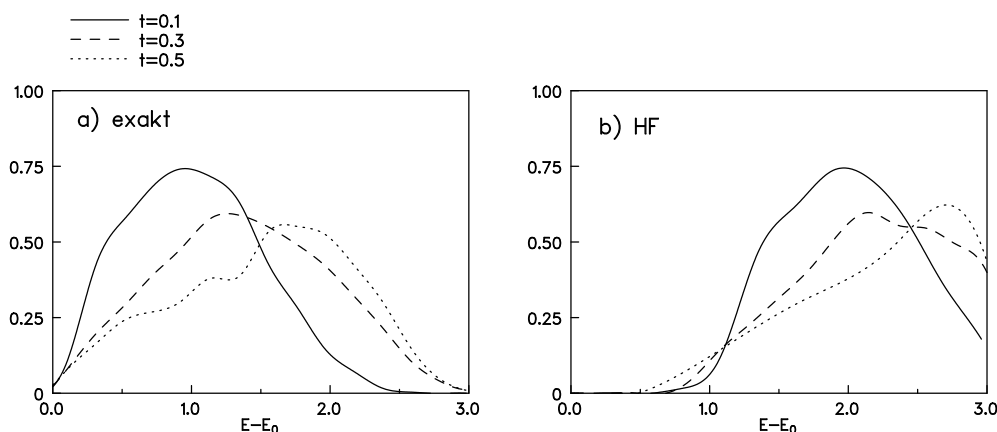


Abb. 3.10 Zustandsdichte der Teilchen-Loch Anregungen bei a) der exakten Lösung und b) der HF-Näherung für $g = 4 \times 3$, $K = 0.5$ bei $t = 0.1$, $t = 0.3$ und $t = 0.5$.

Ursache dafür wirklich das Verschwinden der Lücke in den Zustandsdichten der Anregungen bei der HF-Näherung durch die exakte Lösung ist, bestätigt Abb. 3.10. Weiterhin sieht man auch, daß der Effekt wirklich im klassischen Grenzfall am größten ist und mit wachsendem t abnimmt.

2. Im Vergleich zum Anderson-Modell führt die Wechselwirkung bei großem t/W_0 -Verhältnis zu einer Verringerung des Gleichstromleitwerts und bei kleinem t/W_0 -Verhältnis zu einer Erhöhung.^{11 12} Unklar ist, inwieweit dieses Ergebnis systemgrößenabhängig ist: Die delokalisierende Tendenz für sehr kleine t bleibt sicher auch bei größeren Systemen bestehen, weil im Einteilchenfall die Lokalisierungslänge der Einteilchenzustände hier bereits sehr viel kleiner als die Systemgröße ist und der Rand die Eigenschaften des Systems kaum noch beeinflusst (selbst bei unserem kleinen System). Das ist anders bei den größeren t : Hier beeinflusst der Rand mit Sicherheit die Physik des Systems. Die Frage ist, ob die Lokalisierung nicht vielleicht ein Randeffect ist, der sich mit wachsender Systemgröße zu immer größeren t verschiebt und im thermodynamischen Grenzfall verschwindet. Pauschal kann man dazu nichts sagen: Wir wissen zwar, daß sich mit wachsendem t einerseits

a) der exakte Gleichstromleitwert von oben dem HF-Leitwert annähert und sich andererseits

b) der HF-Wert von unten dem Anderson-Gleichstromleitwert nähert,

wir kennen aber nicht die absoluten Differenzen und ihre Systemgrößenabhängigkeit und können so nicht abschätzen, ob nicht auch für große t der exakte Gleichstromleitwert weiter vom HF-Wert entfernt sein könnte als der Anderson-Wert. Es könnte bei entsprechender Systemgrößenabhängigkeit also durchaus möglich sein, daß überall Delokalisierung erreicht wird. Die Frage läßt sich nur über die exakte Kalkulation des Leitwerts bis zu einem hinreichend großen ω -Bereich für wesentlich größerer Systeme klären.

Für kleine Systeme können wir aber definitiv sagen: Die HF-Anwort „Wechselwirkung führt zu Lokalisierung“ trifft nur bei schwacher Unordnung zu, bei starker Unordnung

¹¹Diese Erhöhung für kleine t ist signifikant, wie zahlreiche Test ergeben haben, und unabhängig von der gewählten Verbreiterung γ für das 12-er System.

¹²Wir erinnern uns, daß die Rückkehrwahrscheinlichkeit, deren Beziehung zum Leitwert noch ungeklärt ist, ein ähnliches Verhalten aufweist: Die Verminderung der HF-Rückkehrwahrscheinlichkeit durch die exakte Lösung reicht für $t \geq 0.1$ nicht aus, die Lokalisierungstendenz gegenüber Anderson zu kompensieren; ab $t = 0.1$ wird jedoch an der Fermienergie vom exakten System stets die Anderson-Rückkehrwahrscheinlichkeit erreicht und möglicherweise sogar unterschritten. Das könnte ein Indiz dafür sein, daß die Bestimmung des MIT mit Hilfe der Rückkehrwahrscheinlichkeit über die Berechnung eines Lokalisierungs-Delokalisierungsübergangs möglich ist.

führt Wechselwirkung zu Delokalisierung. Zwei Thesen sollen die Ergebnisse zum Leitwert zusammenfassen:

- Der Gleichstromleitwert in HF-Näherung ist immer deutlich kleiner als in der exakten Lösung.
- Im Vergleich zum nichtwechselwirkenden System führt die Wechselwirkung bei schwacher Unordnung zu einer Verringerung des Transportes und bei großer Unordnung zu einer Erhöhung des Transportes.

3.6 Zusammenfassung: Wie gut beschreibt die Hartree-Fock-Näherung Zustände und Energien?

Zustände und Energien

Aus der Analyse der Einteilchenzustandsdichte und Rückkehrwahrscheinlichkeit wissen wir, daß der Grundzustand für festes t am besten durch die HF-Näherung beschrieben wird, die angeregten Zustände mit steigender Anregung dagegen immer schlechter. Ein Vergleich verschiedener t zeigt, daß die Beschreibung des Grundzustands durch die HF-Näherung für kleine und große t besser ist als für mittlere t .

Wegen der Kompensationseffekte ist kein einfacher Rückschluß auf die Genauigkeit der Energien möglich. Vom Leitwert können wir lernen, daß die Energien der angeregten Zustände in der HF-Näherung relativ zur Grundzustandsenergie zu hoch sind. Dieser Effekt ist am größten bei $t = 0$ und nimmt mit größeren t ab.

Bleibt die Frage, wie groß die absoluten Fehler der HF-Zustände und HF-Energien in Abhängigkeit von t sind:

a) Einen Eindruck vom Fehler des HF-Grundzustands und der angeregten HF-Zustände vermittelt die Abb. 3.11. Sie zeigt die Projektion ausgewählter exakter Zustände auf die niederenergetischsten 50 HF-Zustände für eine Realisierung eines Systems mit $g = 16$ und $K = 0.5$ bei verschiedenen t . Die Zahlen in den Diagrammen geben jeweils das Quadrat der Projektion des exakten Zustands auf den entsprechenden HF-Zustand wieder. Die Abbildung bestätigt unsere bisherigen Schlußfolgerungen bezüglich der Güte der Zustände. Außerdem fällt noch auf: Die exakten Zustände, in einer HF-Vielteilchenbasis ausgedrückt, setzen sich immer aus dem entsprechenden HF-Vielteilchenbasiszustand und energetisch benachbarten HF-Vielteilchenbasiszuständen zusammen. Dabei ist die Breite der Verteilung beim Grundzustand am geringsten und nimmt mit zunehmender Ordnungszahl des angeregten Zustands zu.¹³

¹³Daß die Partizipationszahl des exakten Grundzustands in einer HF-Basis minimal wird, ist eine direkte Folge der Konstruktion des HF-Verfahrens. Nicht von vornherein ist dagegen zu erwarten, daß die HF-Näherung für endliche t so gut ist, daß die Projektion des Grundzustands auf die HF-Basis nur auf dem HF-Grundzustand und wenigen angeregten HF-Slaterzuständen größere Anteile hat. Wegen der fehlenden Selbstkonsistenz der angeregten HF-Slaterzustände ist auch nicht zwingend, daß die angeregten HF-Slaterzustände mit größeren Gewichten am Grundzustand gerade die niederenergetischen sind. Analoges gilt für die exakten angeregten Zustände: Aus der Konstruktion der angeregten Zustände beim HF-Verfahren als nichtselbstkonsistente Umbesetzung des Grundzustands folgt lediglich, daß ihre Projektion auf die HF-Basis breitere Verteilungen als beim Grundzustand haben sollte.

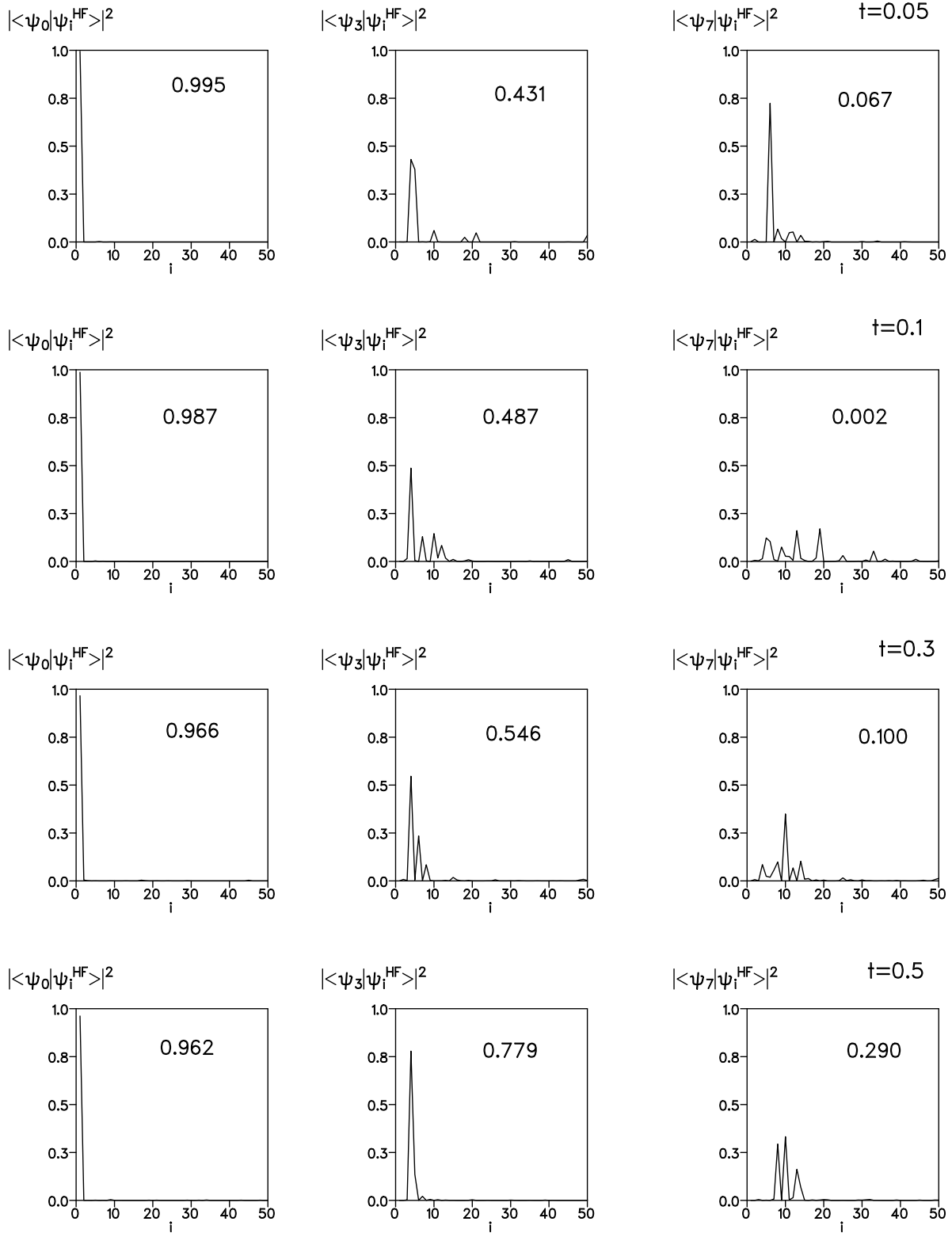


Abb. 3.11 Projektion ausgewählter exakter Zustände auf die niederenergetischsten 50 HF-Zustände für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$ und $K = 0.5$ für $t = 0.03$, $t = 0.1$, $t = 0.3$ und $t = 0.5$. Die Zahlen in den Diagrammen geben jeweils das Quadrat der Projektion des exakten Zustands auf den entsprechenden HF-Zustand wieder.

b) Abb. 3.12 zeigt die relativen Abweichungen von HF-Grundzustandsenergie und korrigierter HF-Grundzustandsenergie (siehe Abschnitt 2.2.) zur exakten Grundzustandsenergie

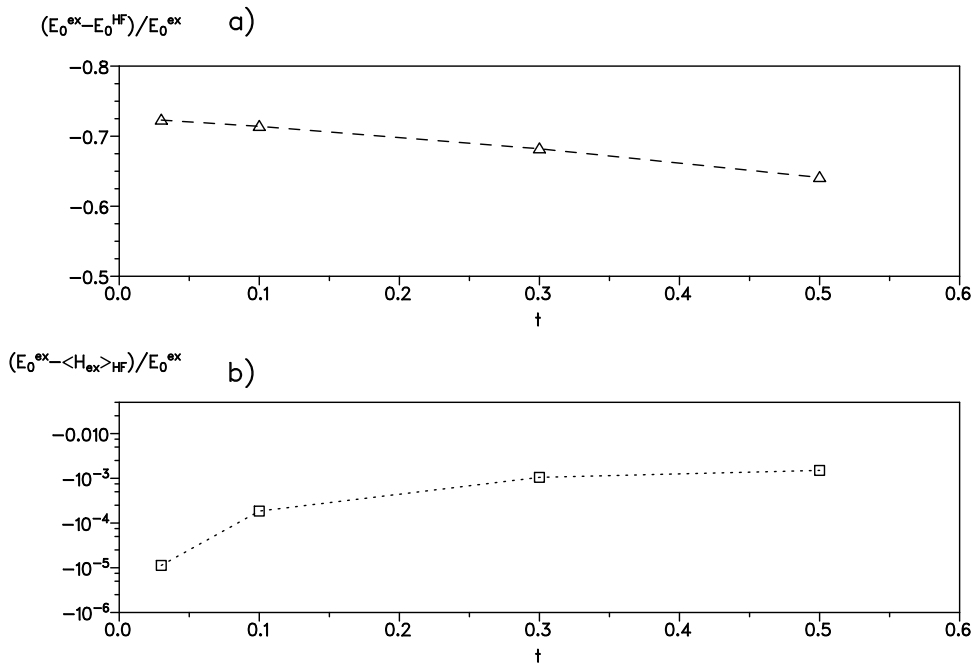


Abb. 3.12 Relative Abweichungen zwischen HF -Grundzustandsenergie (a)), korrigierter HF-Grundzustandsenergie (b)) und der exakten Grundzustandsenergie für ein Quanten-Coulomb-Glas mit $g = 16$ und $K = 0.5$ und einer Realisierung des Zufallspotentials

gie: Während die HF-Grundzustandsenergie im klassischen Grenzfall den größten Fehler aufweist und sich mit wachsendem t zum Mean-Field-Grenzfall hin der exakten Grundzustandsenergie annähert, stimmt die korrigierte HF-Grundzustandsenergie im klassischen Grenzfall mit der exakten Grundzustandsenergie überein, mit wachsendem t nimmt der Abweichung zu, bis sie dann in etwa konstant bleibt. Bis auf die erneute Abnahme des Fehlers zum Mean-Field-Grenzfall hin, die wahrscheinlich die Untersuchung noch größerer t verlangt, ist das genau das Verhalten, was wir erwartet hatten.

Idee einer neuen Näherung

Was, wenn man die Diagonalisierung nicht im gesamten Fock-Raum vornimmt, sondern in einem geeigneten Unterraum? Dieser Unterraum sollte dabei so gewählt sein, daß die exakten Zustände mit der niedrigstmöglichen Anzahl von Basiszuständen mit hoher Genauigkeit ausgedrückt werden können. Den obigen Feststellungen bei a) entnehmen wir sofort, daß die niederenergetischen HF-Vielteilchenzustände genau einen solchen Unterraum für den exakten Grundzustand und die niederenergetischen exakten angeregten Zustände bilden: Wählt man einfach die B niederenergetischsten HF-Zustände als Basis des Unterraums, wird man für den Grundzustand die beste Näherung bekommen und für die niederenergetischsten angeregten Zustände etwas schlechtere Näherungen, die mit steigender Energie immer ungenauer werden. Angeregte Zustände, deren Ordnungszahl größer ist als die Zahl der Basiszustände, lassen sich prinzipiell nicht nähern. Da wir aber an Eigenschaften nahe der Fermienergie oder nahe $\omega = 0$ interessiert sind, für die Grundzustand und niederenergetische angeregte Zustände relevant sind, kann die sehr gute Kenntnis der niederenergetischen Zustände schon wesentlich weiterhelfen. Die Frage ist, ob sich die Basis bei guter Genauigkeit der Zustände tatsächlich weit genug einschränken läßt, um zu

wesentlich größeren Systemen zu gelangen. Die Betrachtung von Abb. 3.11 stimmt optimistisch, sollten doch zumindest für diese Realisierung des Zufallspotentials Grundzustand und die 4 – 5 niederenergetischsten angeregten Zustände sogar bei mittleren t bereits mit einer Basis aus den ersten 50 niederenergetischsten HF-Vielteilchenzuständen gut beschrieben werden können. Das entspricht immerhin einer Basiskontraktion von 12480 Zuständen auf 50 Zustände. Der genaueren Untersuchung der Realisierbarkeit dieser Idee, die wir „Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung“ genannt haben, und ihrer Ergebnisse dient das folgende Kapitel 4.

4. Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung

In diesem Kapitel wird die technische Ausführung der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung (HFD) diskutiert. Überlegungen und Untersuchungen zur Konvergenz von Grundzustandsenergie, Energie der angeregten Zustände, Einteilchenzustandsdichte, Rückkehrwahrscheinlichkeit und Leitwert werden vorgenommen. Ergebnisse für zweidimensionale Systeme mit 12, 16 und 25 Gitterplätzen bei Halbfüllung werden vorgestellt. Außerdem erfolgen Untersuchungen mit verschiedenen Wechselwirkungsstärken U für ein-, zwei und dreidimensionale Systeme mit 25×1 , 5×5 und $3 \times 3 \times 3$ Gitterplätzen.

4.1 Das Verfahren der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung

Idee der Methode:

Die Idee des HFD-Näherungsverfahrens ist, den exakten Hamilton-Operator \hat{H}_{QCG} des Quanten-Coulomb-Glases (1.2) ¹ nicht in der vollständigen Vielteilchen-Platz-Basis $|\{i\}\rangle = \hat{c}_{i_1}^\dagger \dots \hat{c}_{i_N}^\dagger |0\rangle$ ($i = 0, \binom{g}{N} - 1$) zu diagonalisieren, sondern nur in dem Unterraum des gesamten Fock-Raums, der aus den B niederenergetischsten HF-Slaterzuständen $|\{\kappa\}\rangle = \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\kappa_N}^\dagger |0\rangle$ ($\kappa = 0, B - 1$) besteht. Ob dabei die Basis klein genug gemacht werden kann, um deutlich größere Systeme als bei der exakten Diagonalisierung mit brauchbarer Genauigkeit zu behandeln, und wie Zustände, Energien und physikalische Größen mit steigender Basisgröße konvergieren, wird in diesem Kapitel untersucht.

Praktische Ausführung:

Die HFD setzt sich also aus drei Teilaufgaben zusammen:

1. HF-Lösung
 2. Auffinden der B niederenergetischsten HF-Slaterzustände
 3. Aufstellen und Diagonalisieren der Hamilton-Matrix in der abgeschnittenen HF-Basis
- Die einzelnen Teilschritte der Methode sind in Abb. 4.1 verdeutlicht.

¹Die Konstante $\sum \frac{K^2}{r_{ik}}$ wird wieder vernachlässigt.

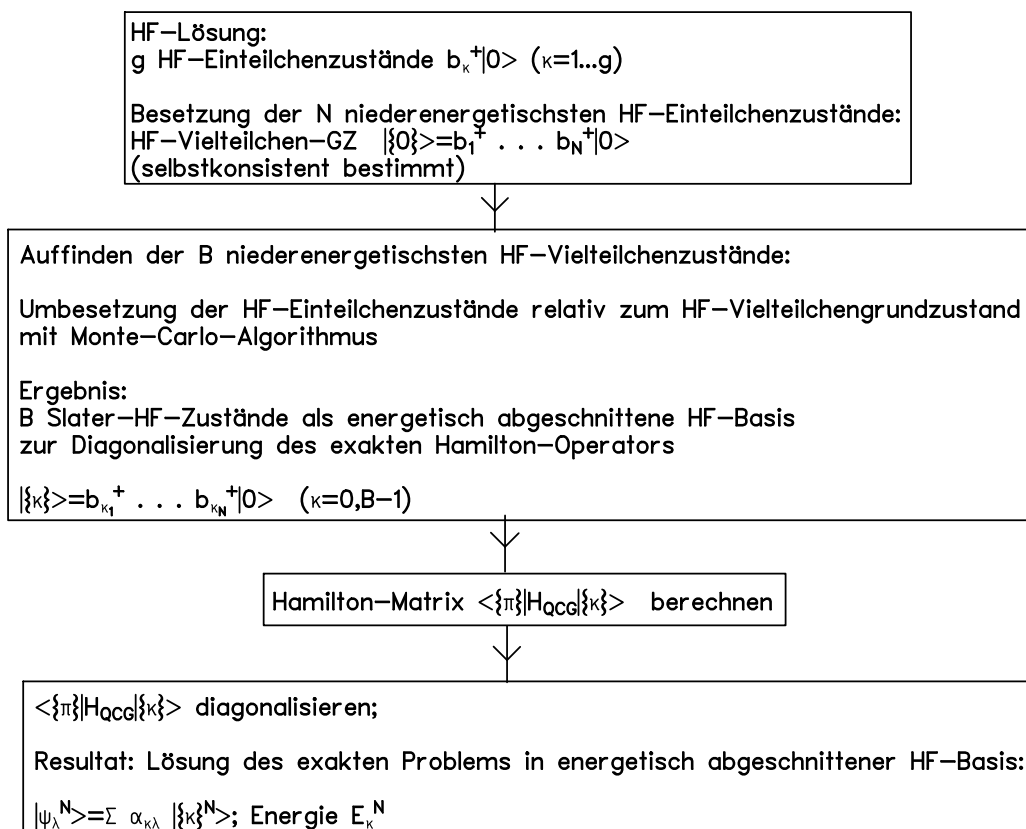


Abb. 4.1 HFD: Teilschritte

1. Hartree-Fock-Lösung

Zunächst muß der HF-Grundzustand des Systems ermittelt werden. Das geschieht auf die bekannte Weise (siehe Abschnitt 2.2.): Der HF-Hamiltonoperator (2.3) wird über eine Selbstkonsistenzschleife numerisch diagonalisiert. Resultat ist der selbstkonsistente HF-Grundzustand, der als Slater-Determinante $\hat{b}_1^{\dagger} \dots \hat{b}_N^{\dagger}|0\rangle$ der niederenergetischsten N HF-Einteilchenzustände $\hat{b}_{\kappa}^{\dagger}|0\rangle$ mit Einteilchenenergien ϵ_{κ} geschrieben werden kann und die Grundzustandsenergie $E_0^N \text{ HF} = \sum_{\mu=1}^N \epsilon_{\mu}$ aufweist.

Zeitbestimmend in dieser Routine ist die Diagonalisierung der HF-Hamilton-Matrix H_{ik} (2.3), die eine Größe von $g \times g$ hat. Die Zeit für die vollständige Diagonalisierung einer Matrix mit allen Eigenvektoren und Eigenwerten ist proportional zu g^3 , so daß g^3 als Richtwert für das Anwachsen der Rechenzeit mit der Systemgröße für diesen Teil des Verfahrens gelten kann.

2. Auffinden der B niederenergetischsten HF-Vielteilchenzustände

Das Auffinden der B niederenergetischsten HF-Slaterzustände steht kaum dem Problem des Auffindens der niederenergetischen angeregten Zustände eines klassischen Coulomb-Glases nach, auch wenn wegen der wechselwirkungsfreien Einteilchenzustände keine Frustration vorliegt. Als einfache und „robuste“ Methode zum Auffinden niederenergetischer Anregungen hat sich im klassischen Coulomb-Glas die Monte-Carlo-Methode erwiesen

[TS94], die hier ebenfalls angewendet werden soll.

Grundidee [M53] dieses Monte-Carlo-Verfahrens ist ein Markov-Prozeß im Raum der angeregten Zustände mit gewichteten Wahrscheinlichkeiten. Die Wahrscheinlichkeit für den nächsten Schritt ist davon abhängig, ob der Zielzustand eine geringere Energie hat als der Startzustand oder eine höhere. Ist die Energie geringer, wird der Sprung zum Zielzustand immer ausgeführt. Ist sie höher, wird er nur mit einer Wahrscheinlichkeit ausgeführt, die proportional zur Wahrscheinlichkeit eines Systems mit der Energie $E_{\text{Ziel}} - E_{\text{Start}}$ im kanonischen Ensemble der Temperatur β und der mittleren Energie 0 ist:

$$P(|\psi_{\text{Start}}\rangle \rightarrow |\psi_{\text{Ziel}}\rangle) = \begin{cases} 1, & \text{falls } E_{\text{Ziel}} < E_{\text{Start}} \\ \exp[-\beta (E_{\text{Ziel}} - E_{\text{Start}})], & \text{falls } E_{\text{Ziel}} \geq E_{\text{Start}} \end{cases} .$$

Der Markov-Prozeß durchquert auf diese Weise den gesamten Bereich der niederenergetischen Anregungen. Der Exponentialfaktor sorgt dafür, daß immer wieder auch höherenergetische Anregungen erfaßt werden, von denen es aus wieder zu einem neuen „Abstieg“ zu niederenergetischeren Anregungen kommen kann.

Die Zustandsdichte aller angeregten Zustände wächst exponentiell mit der Energie der Zustände. Wesentlich für die HFD ist, die B niederenergetischsten HF-Vielteilchenzustände möglichst lückenlos zu finden. Das erfordert eine sorgfältige Optimierung des Monte-Carlo-Verfahrens. Es gelang, eine Variante des Monte-Carlo-Verfahrens zu entwickeln, die mit einem festen Satz von β für alle Systeme mit $g = 12$ bis $g = 25$ für $B = 2$ bis $B = 1500$ zuverlässig arbeitet. Dies wurde auch explizit für einzelne Realisierungen des Systems mit $g = 25$ geprüft. Einzelheiten dieses Verfahrens sind in Abschnitt 4.3. dargelegt.

Solange man im Bereich $B \ll \binom{g}{N}$ bleibt und die Systemgröße g nicht zu groß wird ($g \leq 100$), ist der Zeitaufwand für ein Monte-Carlo-Verfahren der geschilderten Form proportional zu B .

3. Aufstellen und Diagonalisieren der Hamilton-Matrix in der abgeschnittenen HF-Basis:

Das in der abgeschnittenen Basis zu lösende Eigenwertproblem (3.3) wird mit dem HFD-Ansatz $|\psi_\lambda\rangle = \sum_{\kappa=0}^{B-1} \alpha_{\kappa\lambda} |\{\kappa\}\rangle$ nach Multiplikation mit dem HF-Slaterzustand $\langle\{\pi\}|$ zu einem Eigenwertproblem für die Hamilton-Matrix $\langle\{\pi\}|\hat{H}_{\text{QCG}}|\{\kappa\}\rangle$:

$$\sum_{\kappa=0}^{B-1} \alpha_{\kappa\lambda} \langle\{\pi\}|\hat{H}_{\text{QCG}}|\{\kappa\}\rangle = \alpha_{\pi\lambda} E_\lambda .$$

Die Hamilton-Matrix hat eine Größe von $B \times B$, der Zeitaufwand für ihre Diagonalisierung skaliert also mit wachsender Basisgröße B wie B^3 .

Im Unterschied zur exakten Lösung in Platz-Basis muß der Hamilton-Operator diesmal auf eine andere Basis transformiert werden. Mit

$$\begin{aligned} H_{mn} &= -t \zeta_{mn} + \delta_{mn} \phi_m - \delta_{mn} \sum_{l \neq m} \frac{K}{r_{ml}} \quad \text{und} \\ H_{mmnn} &= \frac{1}{2r_{mn}} \end{aligned} \quad (4.1)$$

als Ein- und Zweiteilchenanteil der Hamilton-Matrix des exakten Hamilton-Operators (1.2) haben wir jetzt

$$\begin{aligned}
\langle \{\pi\} | \hat{H}_{\text{QCG}} | \{\kappa\} \rangle &= \langle \{\pi\} | \left[\sum_{m,n=1}^g H_{mn} \hat{c}_m^\dagger \hat{c}_n + \sum_{m,n=1}^g H_{mmnn} \hat{c}_m^\dagger \hat{c}_m \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n \right] | \{\kappa\} \rangle \\
&= \langle \{\pi\} | \left[\sum_{\mu,\nu=1}^g \underbrace{\sum_{m,n=1}^g H_{mn} k_{m\mu} k_{n\nu}}_{A_{\mu\nu}} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\mu,\nu=1}^g \sum_{\lambda,\rho=1}^g \underbrace{\sum_{m,n=1}^g H_{mmnn} k_{m\mu} k_{m\nu} k_{n\lambda} k_{n\rho}}_{A_{\mu\nu\lambda\rho}} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_\rho \right] | \{\kappa\} \rangle \quad (4.2) \\
&= \sum_{\mu,\nu=1}^g A_{\mu\nu} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\kappa_N}^\dagger | 0 \rangle \\
&\quad + \sum_{\mu,\nu=1}^g \sum_{\lambda,\rho=1}^g A_{\mu\nu\lambda\rho} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_\rho \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\kappa_N}^\dagger | 0 \rangle .
\end{aligned}$$

Das ist eine wesentlich umfangreichere Rechnung als bei der exakten Diagonalisierung in Platz-Basis - im Zweiteilchenanteil muß jetzt z.B. ein Matrixelement von zwei Basiszuständen mit vier verschiedenen Erzeugern bzw. Vernichtern berechnet werden anstelle mit lediglich zwei verschiedenen Erzeugern und Vernichtern bei einer Platz-Basis. Das führt zu weitaus umfangreicheren Schleifenstrukturen. Wenn man die Formeln ohne weitere Überlegungen umsetzt, ergeben sich Rechenzeiten für $A_{\mu\nu}$ proportional zu g^2 und für $A_{\mu\nu\lambda\rho}$ proportional zu g^4 . Der Zeitaufwand für das Aufstellen der Hamilton-Matrix ist dann im Einteilchenanteil proportional zu $B^2 g^2$ und im Zweiteilchenanteil proportional zu $B^2 g^4$. Das ist ein zusätzlicher Faktor g^2 im Zeitaufwand für den Zweiteilchenanteil im Verhältnis zur Platz-Basis. Während bei der exakten Lösung in Platz-Basis der $B^2 g^2$ -Faktor von Ein- und Zweiteilchenanteil wegen der Größe der Basis im Vergleich zum Zeitaufwand für die Diagonalisierung der Hamilton-Matrix nur eine untergeordnete Rolle spielt, zeigen Tests, daß bei sinnvollen Basisgrößen und Systemgrößen² in der HFD nicht mehr die eigentliche Diagonalisierung der Hamilton-Matrix die meiste Zeit in Anspruch nimmt, sondern daß die Berechnung ihres Zweiteilchenanteils weitaus länger dauert. Ein Schlüssel zur Realisierung der HFD ist daher, diesen Teil des Verfahrens so umzuformen, daß nur die wirklich notwendigen Schritte realisiert werden müssen. Einzelheiten dieser Reduktion sind in Abschnitt 4.3. dargelegt.

Vergleich mit anderen Verfahren:

Ein ähnliches Verfahren wie die HFD wird in der Chemie unter dem Namen „configuration interaction“ zur Berechnung der Zustände von Molekülen verwendet [F95]. Der Unterschied besteht in der Konstruktion der abgeschnittenen Basis. Bei der ursprünglichen „configuration interaction“ werden alle Zustände mitgenommen, die durch Ein- und Zweiteilchenumbesetzungen aus dem HF-Grundzustand gebildet werden können. Die HFD-Basis aus den niederenergetischen HF-Vielteilchenzuständen ist im Vergleich dazu bei Unordnung besser, weil dann viele der Zustände, die in der „configuration interaction“ mitgenommen werden, hohe Energien haben.

²z.B. $g = 12, B = 50$ oder $g = 16, B = 300$ und $g = 25, B = 1500$; siehe Abschnitt 4.4.

Ebenfalls in Gebrauch ist eine Diagonalisierung im Unterraum der niederenergetischen klassischen Vielteilchenbasis [EP95, TPE96]. Von Nachteil bei diesem Verfahren ist, daß sich die Projektion der exakten Lösung auf die Basis mit wachsendem t bereits für den Grundzustand sehr schnell gleichmäßig über den ganzen Fock-Raum verteilt, so daß die Näherung schon bei sehr kleinen Transfermatrixelementen zusammenbricht. Das HFD-Näherungsverfahren funktioniert dagegen für sehr große t ebensogut wie für sehr kleine, weil die HF-Näherung im Mean-Field Grenzfall wieder exakt wird. Das könnte insbesondere die Chance geben, die Systemgrößenabhängigkeit der gefundenen wechselwirkungsinduzierten Lokalisierung im Bereich schwacher Unordnung, also gerade für größere t , zu prüfen.

4.2 Konvergenz physikalischer Größen mit wachsender Basisgröße B

Welche Vermutungen für die Konvergenz von Grundzustand, Grundzustandsenergie, angeregten Zuständen, Energien der angeregten Zustände sowie der physikalischen Größen Einteilchenzustandsdichte, Rückkehrwahrscheinlichkeit und Gleichstromleitwert kann man aus den bekannten Fakten ableiten? Wir betrachten dazu zunächst den klassischen Grenzfall, den Grenzfall $B = 1$ und den Mean-Field-Grenzfall:

Klassischer Grenzfall:

Im klassischen Grenzfall besteht die abgeschnittene HF-Vielteilchenbasis $|\{\pi\}\rangle$ aus den niederenergetischsten B Platz-Basis-Slaterzuständen: $|\{\pi\}\rangle = |\{i\}\rangle = \hat{c}_{i_1}^\dagger \dots \hat{c}_{i_N}^\dagger |0\rangle$. Bei unseren Systemgrößen stimmen HF-Grundzustand und angeregte HF-Zustände im klassischen Grenzfall mit den exakten Zuständen überein (siehe Kapitel 2). Das Eigenwertproblem ist hier trivial, da der Hamilton-Operator (1.2.) bereits Diagonalform aufweist. Die Basiszustände $|\{i\}\rangle$ stellen damit unabhängig von der Basisgröße Eigenzustände des exakten Hamilton-Operators dar. Eigenwerte sind die Diagonalelemente der Hamilton-Matrix. Für die Energien kann man damit feststellen: Während bei der HF-Näherung im klassischen Grenzfall nur die Zustände und die Energien von Einteilchenanregungen aus dem Grundzustand richtig kalkuliert werden (und damit physikalische Größen wie Einteilchenzustandsdichte und Rückkehrwahrscheinlichkeit), liefert die HFD im klassischen Grenzfall alle Energien und Zustände bis $B - 1$ bzw. E_{B-1} richtig. Grund dafür ist einfach, daß die HFD-Energieerwartungswerte mit dem exakten Hamilton-Operator berechnet werden und nicht mit einem Einteilchen-Näherungsoperator.

Das trifft speziell auch bei einer Basis nur aus dem HF-Grundzustand zu und wirft die Frage auf, wie der Grenzfall $B = 1$ der HFD mit der HF-Näherung zusammenhängt.

Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung mit $B = 1$:

Wenn die Basis nur aus dem HF-Grundzustand besteht, reduziert sich das Eigenwertproblem (3.3) auf $\langle\{\kappa\}|\hat{H}_{\text{QCG}}|\{\kappa\}\rangle = E_0^N$, wenn $|\{\kappa\}\rangle$ der HF-Grundzustand ist. Der HF-Grundzustand ist damit auch HFD-Grundzustand. Während die HFD-Grundzustandsenergie jetzt gleich der korrigierten HF-Grundzustandsenergie $\langle\hat{H}\rangle_0$ (siehe Abschnitt 2.2.) und damit kleiner als die HF-Grundzustandsenergie ist, stimmen die HF- und HFD-Energien $E_0^{N+1} - E_0^N$ bzw. $E_0^N - E_0^{N-1}$ der Einteilchenanregungen aus dem Grundzustand

wieder wegen der Nichtselbstkonsistenz in der HF-Näherung überein:

$$\begin{aligned}
 E_{0 \text{ HF}}^{N+1} - E_{0 \text{ HF}}^N &= \Delta E'' + \sum_{n,m \neq n} \sum_{\lambda=1}^N \left[k_{m0_{N+1}}^2 k_{n\lambda}^2 - k_{m0_{N+1}} k_{m\lambda} k_{n0_{N+1}} k_{n\lambda} \right] \frac{1}{r_{mn}} \\
 E_{0 \text{ HFD}}^{N+1} - E_{0 \text{ HFD}}^N &= \Delta E'' + \sum_{n,m \neq n} \sum_{\mu=1}^N \left[k_{m\mu}^2 k_{n0_{N+1}}^2 - k_{m\mu} k_{m0_{N+1}} k_{n\mu} k_{n0_{N+1}} \right] \frac{1}{2r_{mn}} \\
 &\quad + \sum_{n,m \neq n} \sum_{\nu=1}^N \left[k_{n0_{N+1}}^2 k_{m\nu}^2 - k_{m\nu} k_{m0_{N+1}} k_{n\nu} k_{n0_{N+1}} \right] \frac{1}{2r_{mn}} \\
 &= \sum_{n,m \neq n} \sum_{\mu=1}^N \left[k_{m0_{N+1}}^2 k_{n\mu}^2 - k_{m\mu} k_{m0_{N+1}} k_{n\mu} k_{n0_{N+1}} \right] \frac{1}{r_{mn}} .
 \end{aligned}$$

($\Delta E''$ bezeichnet wieder Energien, die unmittelbar gleich sind.) Damit liefert die HFD im Grenzfall $B = 1$ die HF-Ergebnisse für Einteilchenzustandsdichte und Rückkehrwahrscheinlichkeit an der Fermienergie.

Mean-Field-Grenzfall:

Der Mean-Field-Grenzfall ist einfach: Für völlig delokalisierte Zustände werden exakter Hamiltonoperator und HF-Hamiltonoperator gleich. Das heißt, daß die HF-Näherung sowohl die richtigen Zustände als auch die richtigen Energien liefert. Die Basiszustände der HFD sind damit unabhängig von der Basisgröße immer Eigenzustände zum exakten Hamilton-Operator. Weil der exakte Hamilton-Operator und der HF-Hamiltonoperator ineinander übergehen, stimmen im Mean-Field Grenzfall auch alle Energien überein. HF-Näherung, exakte Lösung und HFD liefern damit dieselben Zustände und Energien, die HFD allerdings nur bis zur Abschneideenergie E_{B-1} .

Konvergenz:

Was kann man aus den obigen Überlegungen für die Konvergenz folgern?

Grundzustand: Die HFD liefert mit $B = 1$ den HF-Grundzustand. Der HF-Grundzustand ist für $t = 0$ exakt, weicht mit wachsendem t vom exakten Grundzustand ab und nähert ihn erst zum Mean-Field Grenzfall hin wieder besser (siehe Abschnitt 3.6.). Je stärker der HF-Grundzustand vom exakten Grundzustand abweicht, umso mehr angeregte HF-Zustände müssen vom exakten Hamiltonoperator gemischt werden, umso größer muß also B sein, um eine gute Näherung zu erreichen. Der Grundzustand sollte damit für kleine t schneller konvergieren als für mittlere t . Für sehr große t muß die Konvergenz dann wieder besser werden (siehe Abb.4.2).

Grundzustandsenergie: Weil die HFD-Energieerwartungswerte mit dem exakten Hamiltonoperator berechnet werden und damit die Genauigkeit des Zustands die einzige Fehlerquelle für die Energie ist, erwarten wir für die Konvergenz der Grundzustandsenergie insgesamt ein ähnliches qualitatives Verhalten wie für die Konvergenz des Grundzustands selbst. Das ist insofern überraschend, als daß die Konvergenz für sehr kleine t , wo die unkorrigierte HF-Energie sehr schlecht ist, trotzdem sehr gut sein sollte (Abb. 4.2).

Angeregte Zustände: Weil das HF-Verfahren die angeregten Zustände wegen der Nichtselbstkonsistenz mit wachsender Ordnungszahl immer schlechter nähert (siehe Abschnitt 3.6.), sollte die HFD bei gleicher Basisgröße B die angeregten Zustände immer weniger gut beschreiben als den Grundzustand. Die Näherung muß dabei mit wachsender Ordnungszahl des angeregten Zustands schnell schlechter werden. Einen angeregten Zustand mit der Ordnungszahl größer B kann die HFD prinzipiell nicht mehr beschreiben.

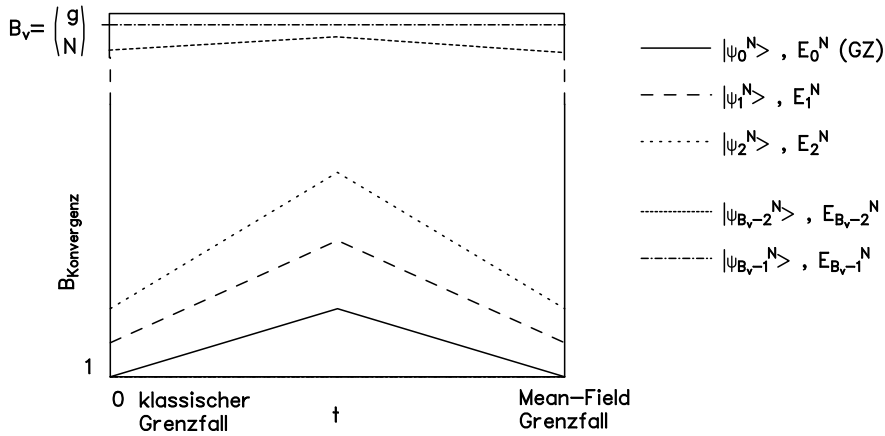


Abb. 4.2 Zur Abschätzung des Konvergenzverhaltens für Grundzustand und angeregte Zustände sowie Grundzustandsenergie und Energien der angeregten Zustände bei der HFD; qualitativ

In den Grenzfällen verhalten sich die angeregten Zustände wie der Grundzustand: Im klassischen Grenzfall sind alle angeregten Zustände bis zur Ordnungsnummer B exakte Eigenzustände, im Mean-Field-Grenzfall ebenso. Wir erwarten daher ein Konvergenzverhalten, das sich qualitativ am Grundzustand orientiert (gute Konvergenz für kleine t , schlechte Konvergenz für mittlere t und zum Mean-Field-Grenzfall hin wieder bessere Konvergenz), aber deutlich langsamer ist und sich mit zunehmender Energie des angeregten Zustands weiter verlangsamt (Abb 4.2).

Energien der angeregten Zustände und Teilchen-Loch-Anregungsenergien $E_\lambda^N - E_0^N$: Auch die Energien der angeregten HFD-Zustände und die Teilchen-Loch-Anregungsenergien sollten qualitativ so konvergieren wie die entsprechenden beteiligten angeregten Zustände, weil die HFD-Energieerwartungswerte mit dem exakten Hamilton-Operator gebildet werden. Wie bei der Grundzustandsenergie überrascht hier zunächst, daß die Konvergenz für kleine t gut sein müßte, wo doch die Teilchen-Loch-Anregungsenergien vom HF-Verfahren in diesem Bereich sehr schlecht genähert werden (siehe Abschnitt 3.1.).

Einteilchenzustandsdichte: Man sollte die Konvergenz der Einteilchenzustandsdichte (3.1) auf die Konvergenz von Zuständen und Energien der Systeme mit N Teilchen und $N \pm 1$ zurückführen können. Nun ist aber schwer abzuschätzen, inwiefern durch die Projektion zwischen Systemen mit verschiedenen Teilchenzahlen Fehler erhöht oder reduziert werden. Weiter hilft die Erinnerung an die HF-Näherung: Wie wir gesehen haben, ergibt die HFD für $B = 1$ dieselbe Einteilchenzustandsdichte an der Fermienergie wie die HF-Näherung. Das HF-Verfahren ist nun im ganzen Band und im gesamten t -Bereich eine äußerst gute Näherung für die Einteilchenzustandsdichte (siehe Abschnitt 3.3.). Da die Einteilchenzustandsdichte bereits vom HF-Verfahren überall sehr gut genähert wird, kann sie sich mit wachsender Basisgröße nicht mehr wesentlich verbessern. Der einzige Effekt der Basisgröße ist, daß höhere angeregte Zustände zur Verfügung stehen und die Einteilchenzustandsdichte immer weiter außen im Band berechnet werden kann.

Rückkehrwahrscheinlichkeit: Für die Rückkehrwahrscheinlichkeit (3.5) können wir ähnlich argumentieren wie für die Einteilchenzustandsdichte: HF-Näherung und HFD im Grenzfall $B = 1$ stimmen überein. Damit sind auch die Rückkehrwahrscheinlichkeiten an der Fermienergie gleich.

Aus dem Vergleich der exakten und HF-Rückkehrwahrscheinlichkeiten wissen wir, daß die exakte Lösung für festes t im gesamten Band zu kleineren Werten für die Rückkehrwahrscheinlichkeit führt als das HF-Verfahren, wobei es die geringste Abweichung an der Fermienergie gibt und zur Bandkante immer stärkere Abweichungen auftreten. Es zeigt sich weiter, daß der Fehler der HF-Rückkehrwahrscheinlichkeiten an der Fermienergie bei

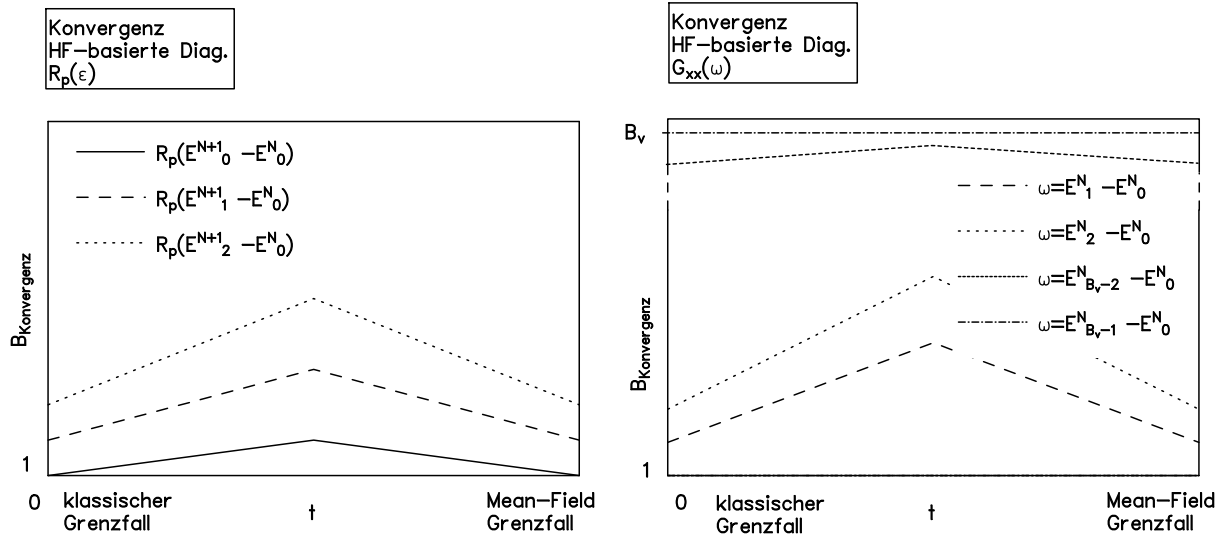


Abb. 4.3 Qualitative Abschätzung des Konvergenzverhaltens für die Rückkehrwahrscheinlichkeit $R_p(\epsilon)$ und für den Leitwert $G(\omega)$ bei der HFD.

$t = 0.1$ am größten ist und ab $t = 0.3$ fast verschwindet (siehe Abschnitt 3.4).

Die Optimierung der Zustände durch die HF-basierte Diagonalisierung spielt umso weniger eine Rolle, je besser bereits das HF-Verfahren allein die Rückkehrwahrscheinlichkeit nähert. Die Rückkehrwahrscheinlichkeit an der Fermienergie wird damit am schnellsten konvergieren. Je weiter man im Band nach außen geht, umso langsamer muß die Konvergenz werden (Abb. 4.3). Weiterhin erwarten wir eine bessere Konvergenz für kleine t und für $t \geq 0.3$ als für mittlere t .

Leitwerte: Die Konvergenz des Leitwerts $G_{xx}(\omega)$ (3.2) ergibt sich aus der Konvergenz der Zustände und aus der Konvergenz der Teilchen-Loch-Anregungsenergien $E_\lambda^N - E_0^N$. Kompensationen der Fehler wie bei der Einteilchenzustandsdichte bzw. teilweise bei der Rückkehrwahrscheinlichkeit gibt es beim Leitwert nicht, weil sich alle Größen auf das System mit N Teilchen beziehen. Die Konvergenz kann deshalb nur maximal genauso gut sein wie die die Konvergenz des Zustands $|\psi\rangle_\lambda^N$ bzw. der Energie E_λ^N . Damit sollte der Leitwert langsamer konvergieren als die Rückkehrwahrscheinlichkeit.

Weil die HFD-Zustände und Energiedifferenzen im klassischen Grenzfall exakt werden, heißt das insbesondere, daß die HFD im Bereich kleiner t , wo die HF-Näherung den Leitwert wegen der falschen Lücke in den Teilchen-Loch-Anregungsenergien drastisch unterschätzt, bereits mit kleinen Basisgrößen eine gute Näherung liefern sollte.

4.3 Technische Details

Monte-Carlo-Verfahren:

Wie bereits besprochen, ist das Problem beim Monte-Carlo-Verfahren die optimale Wahl der inversen Temperatur β und die Festlegung eines Abbruchkriteriums, nach dem man davon ausgehen kann, daß alle HF-Vielteilchenzustände mit einer Energie $E \leq E_{B-1}$ gefunden sind. Wählt man β zu groß, wird die Wahrscheinlichkeit für Sprünge auf höherenergetische Zustände sehr klein. Der Markov-Prozeß verläuft dann vorwiegend im Bereich $E \ll E_{B-1}$, und ein höherenergetischer Basiszustand wird nur selten gefunden. Damit

dauert es sehr lange, bis die vollständige Basis ermittelt ist. Außerdem ist die Festlegung eines Abbruchkriteriums wegen des langsamen Zuwachses der Basis schwierig. Mit einem zu kleinen β erreicht der Markov-Prozeß zwar öfters auch Bereiche höherer Energie. Hier ist es aber wiederum möglich, daß er den niederenergetischen Teil des Spektrums nicht dicht genug durchläuft, so daß das Auffinden dieser Zustände zu lange dauert.

Eine Variante des Monte-Carlo-Verfahrens, die diese Probleme weitgehend ausschaltet und für verschiedene Systemgrößen ohne weitere Anpassung funktioniert³, ist in Anhang 2 im Blockdiagramm dargestellt:

Zunächst wird eine vorläufige Basis mit B beliebigen HF-Vielteilchenzuständen aufgefüllt. Ein beliebiger Zustand daraus ist der erste Startzustand.

Im ersten Zyklus werden zunächst 1000 Monte-Carlo-Sprünge mit $\beta = 1$ versucht. Wenn ein Sprung ausgeführt wird und der erreichte Zielzustand niederenergetischer ist als der höchstenergetischste Zustand in der vorläufigen Basis, wird der erreichte Zielzustand an seiner Stelle in die vorläufige Basis eingetragen, falls er noch nicht zur Basis gehört. Der Zielzustand ist immer neuer Startzustand für den nächsten Sprungversuch. Nach Ablauf der 1000 Versuche wird vermerkt, wieviele neue Basiszustände für $\beta = 1$ gefunden wurden. Als nächstes erfolgt dieselbe Prozedur mit $\beta = 2$, $\beta = 3$, $\beta = 4$ und $\beta = 5$.

Im zweiten Zyklus werden jetzt immer 2000 Monte-Carlo-Sprünge versucht, wobei nur die β berücksichtigt werden, bei denen sich im ersten Zyklus neue Basiszustände ergeben haben. Wieder wird die Anzahl der neu ermittelten Basiszustände für jedes noch übrige β festgehalten.

Auf diese Weise geht es weiter: Im dritten Zyklus werden 3000 Monte-Carlo-Sprünge für die β versucht, die im zweiten Zyklus neue Basiszustände erbracht haben, usw.. Das Verfahren ist konvergiert, wenn sich für kein β mehr neue Basiszustände ergeben.⁴

Die Benutzung verschiedener inverser Temperaturen β mit dem Ausschluß all der β im nächsten Zyklus, für die keine neuen Basiszustände mehr gefunden werden, paßt die Energiebereiche, in denen sich der Markov-Prozeß am häufigsten bewegt, an die Bereiche an, in denen noch die meisten neuen Basiszustände gefunden werden müssen. Die Erhöhung der Anzahl der Versuche mit jedem neuen Zyklus trägt der abnehmenden Dichte der noch zu findenden Basiszustände auf dem Gebiet des Markov-Prozesses Rechnung und verhindert zu frühe Konvergenz.

Mit dem geschilderten Verfahren konnten in Tests von den niederenergetischsten 400 HF-Slaterzuständen bei $g = 25$ und $N = 12$, die für einzelne Realisierungen des Zufallspotentials durch Auswertung von Teilchen-Loch-Anregungen, Zwei-Teilchen-Loch-Anregungen und weiteren Anregungen explizit mit sehr viel Rechenaufwand abgeschätzt wurden, immer alle bis auf maximal 2 gefunden werden.

Transformation des Hamilton-Operators:

Ein zweites Problem war, wie wir in Abschnitt 4.2. besprochen hatten, der Zeitaufwand für die Aufstellung der Hamilton-Matrix $\langle\{\pi\}|\hat{H}|\{\kappa\}\rangle$, für den sich ohne weitere Maßnahmen eine Rechenzeit proportional zu B^2g^4 ergibt. Bei unseren System- und Basisgrößen ist dieser Teil des Verfahrens bei weitem der zeitaufwendigste. Um die HFD-Idee überhaupt umsetzen zu können, ist eine umfassende Optimierung notwendig.

Das Aufstellen der Hamilton-Matrix kann auf folgende Weise beschleunigt werden (siehe Anhang 2): Die Transformation des Hamilton-Operators (1.2) in die HF-Einteilchenbasis

³Die Parameterwahl in diesem Verfahrens ist das Ergebnis umfangreicher Tests.

⁴Die Methode ähnelt dem „thermal cycling“ bei [MNDH+97].

zu

$$\hat{H} = \underbrace{\sum_{\mu,\nu=1}^g A_{\mu\nu} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu}_{\hat{H}_{\text{Ein}}} + \underbrace{\sum_{\mu,\nu=1}^g \sum_{\lambda,\rho=1}^g A_{\mu\nu\lambda\rho} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_\rho}_{\hat{H}_{\text{Zwei}}}$$

(vgl. Gleichung (4.3)) wird von vornherein nur für die $A_{\mu\nu\lambda\rho}$ und $A_{\mu\nu}$ vollzogen, für die von Null verschiedene Anteile zur Hamilton-Matrix zu erwarten sind. Aus den Symmetrien $\hat{H}_{mmnn} = \hat{H}_{nnmm}$ und $\hat{H}_{mn} = \hat{H}_{nm}$ folgen die Beziehungen

$$A_{\mu\nu\lambda\rho} = A_{\nu\mu\lambda\rho} = A_{\mu\nu\rho\lambda} = A_{\nu\mu\rho\lambda} = A_{\lambda\rho\mu\nu} \quad \text{und} \quad A_{\mu\nu} = A_{\nu\mu} ,$$

die dabei Rechenaufwand sparen.

Welche $\langle \{\pi\} | \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_\rho | \{\kappa\} \rangle$ bzw. $\langle \{\pi\} | \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu | \{\kappa\} \rangle$ sind nun von Null verschieden? Betrachten wir zuerst die Diagonalelemente: Im Einteilchenteil ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \{\pi\} | \hat{H}_{\text{Ein}} | \{\pi\} \rangle &= \sum_{\mu,\nu} A_{\mu\nu} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_{\pi_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\pi_N}^\dagger | 0 \rangle \\ &= \sum_{\mu=\pi_1}^{\pi_N} A_{\mu\mu} = \sum_{l=1}^N A_{\pi_l \pi_l} , \end{aligned}$$

im Zweiteilchenteil

$$\begin{aligned} \langle \{\pi\} | \hat{H}_{\text{Zwei}} | \{\pi\} \rangle &= \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_1} \left(\sum_{\mu,\nu} \sum_{\lambda,\rho} A_{\mu\nu\lambda\rho} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_\rho \right) \hat{b}_{\pi_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\pi_N}^\dagger | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_1} \left(\sum_{\mu} A_{\mu\mu\mu\mu} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\mu \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\mu + \sum_{\mu \neq \lambda} \sum_{\lambda} A_{\mu\mu\lambda\lambda} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\mu \hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_\lambda \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\mu \neq \nu} \sum_{\nu} A_{\mu\nu\nu\mu} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_\nu^\dagger \hat{b}_\mu \right) \hat{b}_{\pi_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\pi_N}^\dagger | 0 \rangle \\ &= \sum_{l=1}^N A_{\pi_l \pi_l \pi_l \pi_l} + \sum_{l=1}^N \sum_{k=l+1}^N (A_{\pi_l \pi_l \pi_k \pi_k} + A_{\pi_k \pi_k \pi_l \pi_l}) \\ &\quad + \sum_{l=1}^N \sum_{m \neq \pi_1 \dots \pi_N} (A_{\pi_l m m \pi_l} + A_{m \pi_l \pi_l m}) . \end{aligned}$$

D.h., anstelle einer Schleife der Mächtigkeit Bg^2 beim Einteilchenanteil bzw. Bg^4 beim Zweiteilchenanteil sind nur noch Schleifen der Mächtigkeit BN bzw. $BN(N-1)$ und $BN(g-N)$ zu durchlaufen.

Die Schleifen für die Nichtdiagonalanteile lassen sich noch stärker reduzieren: Da der Zweiteilchenanteil des Hamilton-Operators nur eine oder zwei Teilchen-Loch-Anregungen vermitteln kann, sind von Null verschiedene Beiträge bei den Nichtdiagonalelementen der Hamilton-Matrix im Zweiteilchenanteil von vornherein nur möglich, wenn sich die Basiszustände $\langle \{\pi\} |$ und $|\{\kappa\}\rangle$ in einem Einteilchenzustand oder in zwei Einteilchenzuständen unterscheiden. Analog kann es im Einteilchenanteil nur einen Beitrag geben, wenn die Basiszustände $\langle \{\pi\} |$ und $|\{\kappa\}\rangle$ in einem Einteilchenzustand verschieden sind.

Wir suchen deshalb zunächst alle Basiszustände $\langle \{\pi\} |$ und $|\{\kappa\}\rangle$ die sich in zwei Einteilchenzuständen unterscheiden:

$$\langle \{\pi\} | = \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_l} \dots \hat{b}_{\pi_1} \quad , \quad |\{\kappa\}\rangle = \hat{b}_{\pi_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\pi_m}^\dagger \dots \hat{b}_{\pi_n}^\dagger \dots \hat{b}_{\pi_N}^\dagger | 0 \rangle .$$

Da alle Beiträge vom Einteilchenteil des Hamiltonoperators verschwinden, ergibt sich für das entsprechende Matrixelement $\langle \{\pi\} | \hat{H} | \{\kappa\} \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \{\pi\} | \hat{H} | \{\kappa\} \rangle &= \sum_{\mu, \nu} \sum_{\lambda, \rho} A_{\mu\nu\lambda\rho} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_l} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\lambda}^{\dagger} \hat{b}_{\rho}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_m}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_n}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle \\
&= A_{\pi_k \pi_m \pi_l \pi_n} \underbrace{\langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_l} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\pi_k}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_m}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_n}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_m}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_n}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle}_{\text{Vorzeichen}} \\
&\quad + A_{\pi_k \pi_n \pi_l \pi_m} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_l} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\pi_k}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_n}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_m}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_m}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_n}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle \\
&\quad + A_{\pi_l \pi_m \pi_k \pi_n} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_l} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_m}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_k}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_n}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_m}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_n}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle \\
&\quad + A_{\pi_l \pi_n \pi_k \pi_m} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_l} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_n}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_k}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_m}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_m}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_n}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle \\
&= \text{Vorzeichen} \times (A_{\pi_k \pi_m \pi_l \pi_n} - A_{\pi_k \pi_n \pi_l \pi_m} - A_{\pi_l \pi_m \pi_k \pi_n} + A_{\pi_l \pi_n \pi_k \pi_m}) .
\end{aligned}$$

In der Hamilton-Matrix verbleiben jetzt lediglich Beiträge von den Basiszuständen $\langle \{\pi\} |$ und $|\{\kappa\}\rangle$, die sich in einem Einteilchenzustand unterscheiden:

$$\langle \{\pi\} | = \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_1} \quad , \quad |\{\kappa\}\rangle = \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle .$$

Für den Einteilchenanteil $\langle \{\pi\} | \hat{H}_{\text{Ein}} | \{\kappa\} \rangle$ des entsprechenden Matrixelements erhalten wir

$$\begin{aligned}
\langle \{\pi\} | \hat{H}_{\text{Ein}} | \{\kappa\} \rangle &= \sum_{\mu, \nu} A_{\mu\nu} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle \\
&= A_{\pi_k \pi_l} \underbrace{\langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\pi_k}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle}_{\text{Vorzeichen}} \\
&= \text{Vorzeichen} \times (A_{\pi_k \pi_l}) ,
\end{aligned}$$

was wegen $A_{\pi_k \pi_l} = A_{\pi_l \pi_k}$ auch der Einteilchenanteil des Matrixelements $\langle \{\kappa\} | \hat{H}_{\text{Ein}} | \{\pi\} \rangle$ ist:

$$\langle \{\kappa\} | \hat{H}_{\text{Ein}} | \{\pi\} \rangle = \text{Vorzeichen} \times (A_{\pi_k \pi_l}) .$$

Für den Zweiteilchenanteil $\langle \{\pi\} | \hat{H}_{\text{Zwei}} | \{\kappa\} \rangle$ des Matrixelements dieser Basiszustände ergibt sich

$$\begin{aligned}
\langle \{\pi\} | \hat{H}_{\text{Zwei}} | \{\kappa\} \rangle &= \sum_{\mu, \nu} \sum_{\lambda, \rho} A_{\mu\nu\lambda\rho} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\lambda}^{\dagger} \hat{b}_{\rho}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle \\
&= \underbrace{\sum_{\mu=\pi_1 \neq \pi_l}^{\pi_N} A_{\mu\nu\pi_k \pi_l} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_k}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle}_{\text{Vorzeichen} \times (\sum_{m \neq k, l} A_{\pi_m \pi_m \pi_k \pi_l} + A_{\pi_k \pi_k \pi_l \pi_l})} \\
&\quad + \underbrace{\sum_{\lambda=\pi_1 \neq \pi_k}^{\pi_N} A_{\pi_k \pi_l \lambda \lambda} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\pi_k}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \hat{b}_{\lambda}^{\dagger} \hat{b}_{\lambda}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle}_{\text{Vorzeichen} \times (\sum_{m \neq k, l} A_{\pi_k \pi_l \pi_m \pi_m} + A_{\pi_k \pi_l \pi_l \pi_l})} \\
&\quad + \underbrace{\sum_{\nu \neq \pi_1 \dots \pi_N} A_{\pi_k \nu \nu \pi_l} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\pi_k}^{\dagger} \hat{b}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle}_{\text{Vorzeichen} \times (\sum_{\nu \neq \pi_1 \dots \pi_k \dots \pi_l \pi_N} A_{\pi_k \nu \nu \pi_l} + A_{\pi_k \pi_k \pi_k \pi_l} + A_{\pi_k \pi_l \pi_l \pi_l})}
\end{aligned}$$

$$+ \underbrace{\sum_{\mu=\pi_1 \neq \pi_l, \pi_k}^{\pi_N} A_{\mu\pi_1\pi_k\mu} \langle 0 | \hat{b}_{\pi_N} \dots \hat{b}_{\pi_k} \dots \hat{b}_{\pi_1} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_k}^{\dagger} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\pi_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_l}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\pi_N}^{\dagger} | 0 \rangle}_{-\text{Vorzeichen} \times (\sum_{m \neq k, l} A_{\pi_m \pi_l \pi_k \pi_m})} .$$

Die Ermittlung der Vorzeichen erfordert pro Erzeuger bzw. Vernichter jeweils maximal eine Schleife über die N besetzten HF-Zustände. Die Anzahl der Basiszustände, die sich in einem Einteilchenzustand unterscheiden, sei B_1 , und die Anzahl der Basiszustände, die sich in zwei Einteilchenzuständen unterscheiden, sei B_2 . Aus der Schleife mit der Mächtigkeit $B(B-1)g^2$ für die Nichtdiagonalanteile der Hamilton-Matrix aus dem Einteilchenanteil wird jetzt eine der Mächtigkeit $B_1 2N$. Aus der $B(B-1)g^4$ -Schleife für die Nichtdiagonalanteile der Hamilton-Matrix aus dem Zweiteilchenanteil werden eine $B_2 4N$ -Schleife und eine $B_1(N-1)$ bzw. $B_1(g-N)$ -Schleife. Das sind drastische Reduzierungen, die die HFD für größere Systeme überhaupt erst durchführbar machen.

4.4 Vergleich exakte Lösung – Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung

Test des Verfahrens für $g = 12, K = 0.5$:

Eine erste Vorstellung von der Leistungsfähigkeit der HFD vermittelt ein direkter Vergleich mit der exakten Rechnung für das System mit $g = 12$ und halber Bandfüllung. Die volle HF-Basis hat für das System mit $g = 12$ und $N = 6$ Teilchen 924 Zustände, für die Systeme mit $N + 1$ und $N - 1$ Teilchen jeweils 792 Zustände.

Weil das HF-Verfahren die Einteilchenzustandsdichte sehr gut annähert, ist eine Einschätzung der Leistungsfähigkeit der HFD an Hand der Einteilchenzustandsdichte nicht möglich.

Instruktiver ist es, die Rückkehrwahrscheinlichkeiten zu vergleichen: Nach unseren Konvergenzüberlegungen in Abschnitt 4.2. würden wir erwarten, daß sich bei einer festen Basisgröße B der größte Fehler der HFD-Rückkehrwahrscheinlichkeit an den Bandkanten ergibt und der kleinste Fehler an der Fermienergie. Außerdem sollte die Näherung über das gesamte Band am schlechtesten im Bereich von $t = 0.1$ sein.

Abb. 4.4 zeigt die exakten und HFD-Rückkehrwahrscheinlichkeiten unseres Systems mit $g = 12$ und $K = 0.5$ für $t = 0.03, t = 0.1, t = 0.3$ und $t = 0.5$, wobei die HFD mit einer Basis aus den 50 niederenergetischsten HF-Vielteilchenzuständen ausgeführt wurde. Die Ergebnisse sind über 630 – 1620 Realisierungen gemittelt, wobei die Zufallspotentiale bei der exakten Rechnung und der HFD-Rechnung jeweils identisch sind. Wir sehen, daß mit der Basisgröße von $B = 50$ für alle t fast bis an die Bandkanten eine sehr gute Näherung für die Rückkehrwahrscheinlichkeit erreicht wird. Abweichungen gibt es lediglich ganz außen im Band. Sie sind aber so gering, daß eine t -Abhängigkeit nur schwer eingeschätzt werden kann. Damit ist bei dem System mit $g = 12$ für die Berechnung der Rückkehrwahrscheinlichkeit eine Basisgröße von $B = 50$ bereits völlig ausreichend.

Nach Abschnitt 4.2. sollte der Leitwert die Größe sein, die am stärksten auf Fehler in den Zuständen und in den Energien der Zustände reagiert. Abb. 4.5 zeigt exakte und nach der HFD mit $B = 50$ ermittelte Leitwerte für das System mit $g = 12$ bei halber Bandfüllung für $t = 0.03, t = 0.1, t = 0.3$ und $t = 0.5$. Wieder wurde bei der exakten Lösung und der HFD jeweils über die gleichen Realisierungen des Zufallspotentials gemittelt. Wir sehen, daß auch der Leitwert mit einer Basisgröße von $B = 50$ bereits hervorragend beschrieben wird. Wie überlegt, nehmen die Abweichungen mit wachsendem t zunächst zu (bis $t = 0.3$)

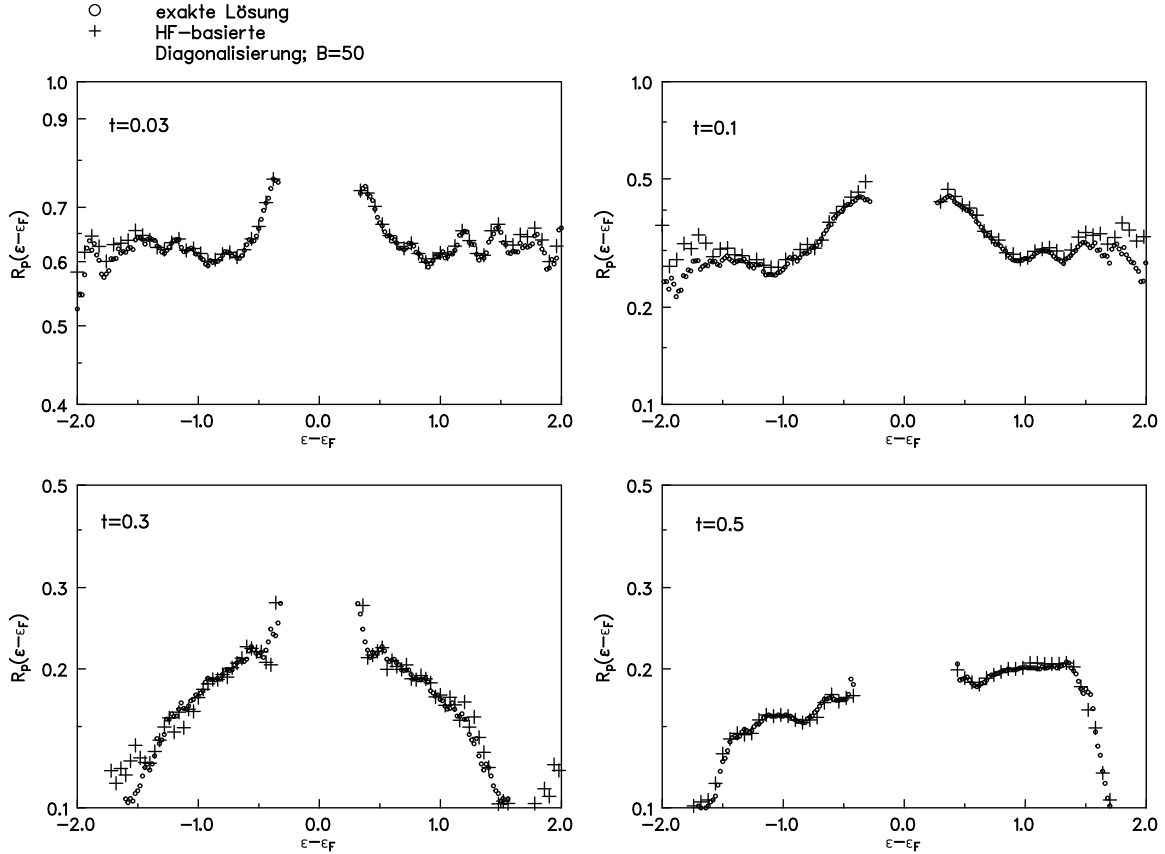


Abb. 4.4 Energieaufgelöste Rückkehrwahrscheinlichkeiten des Quanten-Coulomb-Glases ($g = 4 \times 3$, $K = 0.5$) für $t = 0.1$, $t = 0.3$ und $t = 0.5$ mit exakter Lösung und HFD bei einer Basisgröße von $B = 50$. Die Ergebnisse sind jeweils gemittelt über 1000 ($t = 0.03$), 630 ($t = 0.1$), 1620 ($t = 0.3$) bzw. 1200 ($t = 0.5$) Realisierungen.

und bleiben dann konstant ($t = 0.5$). Die Abweichungen sind auch tatsächlich bei allen t für die größeren Frequenzen ω am stärksten. Für den Gleichstromleitwert $G_{xx}(\omega = 0)$ ist die Näherung dagegen überall ausgezeichnet.

Eine Basiskomprimierung von 924 HF-Vielteilchenzuständen auf die niederenergetischsten 50 HF-Vielteilchenzustände entspricht einem Faktor von ungefähr 20. Mit diesem Faktor wären auch Rechnungen für ein System mit $g = 16$ bei Halbfüllung (die volle Basis der Systeme mit $N - 1$, N und $N + 1$ Teilchen umfaßt 11440, 12870 bzw. 11440 Zustände) noch gut realisierbar. Nicht mehr möglich sind mit dieser Basiskomprimierung dagegen Rechnungen zum System mit $g = 25$. Die Frage ist, ob der Basiskomprimierungsfaktor bei gleich guter Näherung mit wachsender Systemgröße nicht noch steigen kann. Ein weiterer Vergleich zwischen HFD und exakter Lösung für das System mit $g = 16$ bringt uns einer Antwort auf diese Frage näher.

Test des Verfahrens für $g = 16$, $K = 0.5$:

Für $g = 16$, $K = 0.5$ ist es noch möglich, die HFD-Ergebnisse für einzelne Realisierungen des Zufallspotentials direkt mit den exakten Ergebnissen zu vergleichen. Um die Überlegungen zur Konvergenz zu verifizieren, sollen dabei jeweils verschiedene Basisgrößen B von $B = 2$ bis $B = 500$ untersucht werden. Wir wollen im einzelnen die Konvergenz der

- a) Zustände,
- b) Grundzustandsenergie,

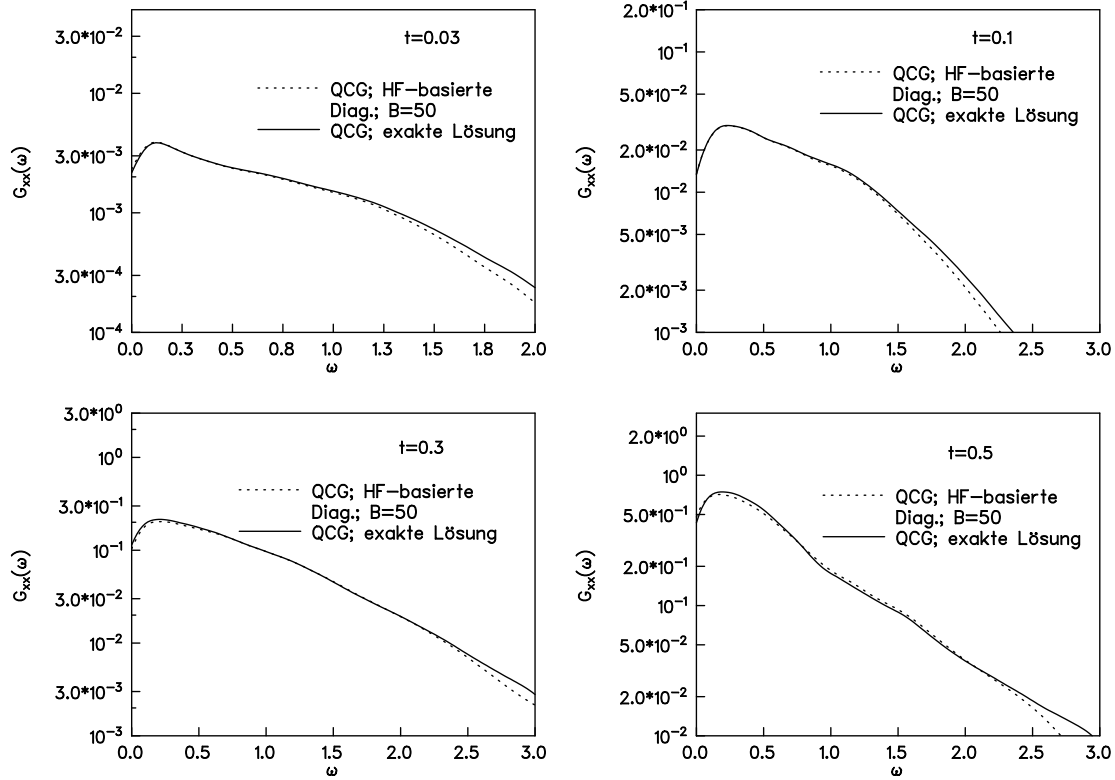


Abb. 4.5 Leitwerte $G_{xx}(\omega)$ für die Systeme aus Abb. 4.4. Die Verbreiterung γ beträgt $\gamma = 0.1$.

- c) Energien der angeregten Zustände,
- d) Besetzungszahlen,
- e) Rückkehrwahrscheinlichkeiten,
- f) Leitwerte

betrachten und mit den Vermutungen aus Abschnitt 4.2. vergleichen.

a) Zustände: Abb. 4.6 zeigt die Konvergenz von Grundzustand und einigen angeregten Zuständen im System mit $g = 16$, $K = 0.5$ für eine spezielle Realisierung des Zufallspotentials für verschiedene t . Dargestellt ist jeweils der Überlapp $|\langle \psi_\lambda^{\text{exakt}} | \psi_\lambda^{\text{HFD}} \rangle|^2$ verschiedener exakter Zustände $|\psi_\lambda^{\text{exakt}}\rangle = \sum_i \beta_{i\lambda}^{\text{ex}} \hat{c}_{i_1}^\dagger \dots \hat{c}_{i_N}^\dagger |0\rangle$ mit den entsprechenden HFD-Zuständen $|\psi_\lambda^{\text{HFD}}\rangle = \sum_{\pi=0}^{B-1} \alpha_{\pi\lambda}^{\text{HFD}} \hat{b}_{\pi_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\pi_N}^\dagger |0\rangle$, der sich analog (3.4) zu

$$|\langle \psi_\lambda^{\text{exakt}} | \psi_\lambda^{\text{HFD}} \rangle|^2 = \left| \sum_i \sum_\pi \alpha_{\pi\lambda} \beta_{i\lambda} \sum_k V(P_k) \prod_{t=1}^N \sum_{P_k(\pi_t)} k_{i_t P_k(\pi_t)} \right|^2$$

ergibt. Da der Rechenaufwand durch die Permutationen sehr hoch ist, war es nicht möglich, bei der Projektion über eine Basisgröße von $B = 100$ hinauszugehen.

Die Abbildung zeigt erstens, daß der Grundzustand immer schneller konvergiert als alle angeregten Zustände und daß die angeregten Zustände umso langsamer konvergieren, je höher ihre Energie ist. Genau das hatten wir auch in Abschnitt 4.2. erwartet.

Zweitens ist zu erkennen, daß Grundzustand und angeregte Zustände für sehr kleine t schneller konvergieren als für mittlere t . Weiter in Richtung Mean-Field Grenzfall verschlechtert sich die Konvergenz nicht mehr bzw. wird sogar wieder besser. Auch das entspricht unseren Erwartungen.

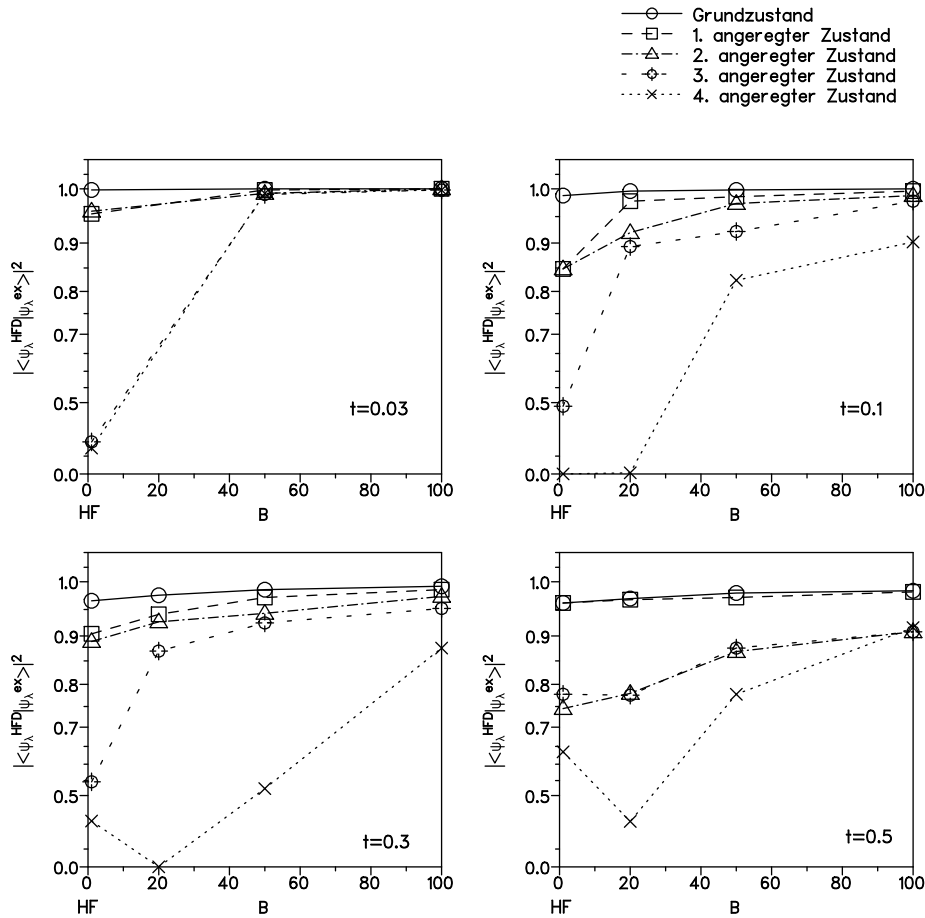


Abb. 4.6 Konvergenzverhalten von Grundzustand und angeregten Zuständen für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$ bei Halbfüllung in Abhängigkeit vom Transfermatrixelement t und Basisgröße B bei der HFD. Bei $B = 1$ sind die entsprechenden angeregten HF-Zustände eingetragen. Die quadratische Skala an der Ordinate wurde wegen der besseren Übersichtlichkeit gewählt, die Linien sind nur Hilfslinien für das Auge.

Drittens sieht man (bei $t = 0.1$ und $t = 0.3$ für den 4. angeregten Zustand klar zu erkennen), daß es bei jeder Basisgröße B eine Anregungsenergie E_λ gibt, oberhalb der die Näherung für angeregte Zustände völlig zusammenbricht. Auch das verstehen wir: Bei mittleren t wird die Projektion der angeregten Zustände auf die HF-Basis mit wachsender Ordnungszahl schnell so breit, daß wesentliche Anteile außerhalb der Basis liegen. Bei einer Ordnungszahl $> B$ liegt dann der Hauptteil der Projektion außerhalb der HF-Basis, und die Näherung bricht auch für kleine t zusammen.

Nimmt man z.B. das Erreichen eines Überlapps von $|\langle \psi_\lambda^{\text{exakt}} | \psi_\lambda^{\text{HFD}} \rangle|^2 = 0.99$ als Maß für ausreichende Konvergenz und trägt für verschiedene angeregte Zustände die zur Konvergenz notwendige Basisgröße B gegen t auf (siehe Abb. 4.7), erhält man ein Diagramm in der Art von Abb. 4.2. Der Vergleich zeigt nochmals, daß die Überlegungen zur Konvergenz der Zustände zutreffen.

b) Grundzustandsenergien: Die HFD-Grundzustandsenergie sollte nach unseren Überlegungen in Abschnitt 4.2. qualitativ ähnlich konvergieren wie der Grundzustand selbst. In Abb. 4.8 ist der relative Fehler der Grundzustandsenergie für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$ bei verschiedenen Basisgrößen B und Transfermatrixelementen t dargestellt. Wie man sieht, konvergiert die Grundzustandsenergie tatsächlich für kleine t schneller als für mittlere t . Wie beim Grundzustand selbst ist die Verbesserung der Kon-

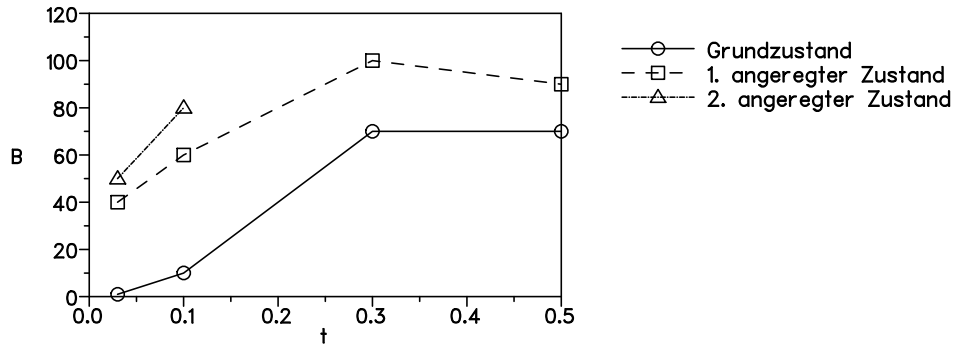


Abb. 4.7 Notwendige Basisgröße für die Konvergenz (Überlapp mit exaktem Zustand $> 99\%$) von Grundzustand und angeregten Zuständen in Abhängigkeit vom Transferelement t für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$ bei Halbfüllung. Die Linien sind nur Hilfslinien für das Auge.

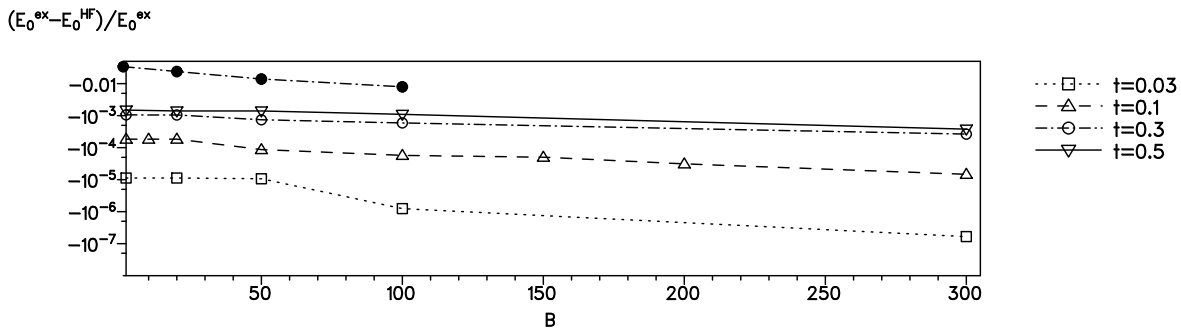


Abb. 4.8 Relativer Fehler der HFD-Grundzustandsenergie für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$, $U = 1$ und Halbfüllung in Abhängigkeit von der Basisgröße B und vom Transferelement t . Die ausgefüllten Symbole zeigen den Fehler des Grundzustands $1 - |\langle \psi_\lambda^{\text{exakt}} | \psi_\lambda^{\text{HFD}} \rangle|^2$ für $t = 0.3$.

vergenz für größere t hier noch nicht zu sehen, weil für diese spezielle Realisierung $t = 0.5$ offensichtlich noch nicht nahe genug am Mean-Field-Grenzfall ist. Vergleicht man an einem Beispiel mit dem Fehler des Grundzustands, zeigt sich allerdings quantitativ, daß der Fehler der Grundzustandsenergie bei gleicher Basisgröße B eine Größenordnung kleiner ist als der Fehler des Grundzustands. Auch das können wir mit einer Verfeinerung unserer Argumentation verstehen: Die Zustände, die den Fehler der HFD-Energie bedingen, sind im Erwartungswert $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ bei $\hat{A} = \hat{H}$, anders als bei beliebigen Operatoren, nicht unabhängig vom Operator, mit dem der Erwartungswert gebildet wird. Folge davon ist, daß die Energiekorrektur bei einem Fehler der Zustände wesentlich kleiner ist als dieser.⁵

c) Energien der angeregten Zustände: Auch die Energien der angeregten Zustände verhalten sich wie in Abschnitt 4.2. diskutiert. Das zeigen die Abb. 4.9 und 4.10. Hier sind die Energien ausgewählter angeregter Zustände für verschiedene Basisgrößen B und verschiedene Transferelemente t dargestellt. Man sieht deutlich, daß sich für festes t die Grundzustandsenergie mit wachsender Basisgröße am wenigsten verändert. Die Energien der angeregten Zustände ändern sich dagegen immer stärker, je höher ihre Ordnungszahl ist. Für kleine t sind die Änderungen kleiner als für mittlere t . Zum Mean-Field Grenzfall zu wird die Konvergenz wieder schneller.

⁵Das ist eine Variation des bekannten Ergebnisses aus der Störungstheorie, daß zur Berechnung der Näherung erster Ordnung der Energie die nullte Näherung der Zustände ausreicht.

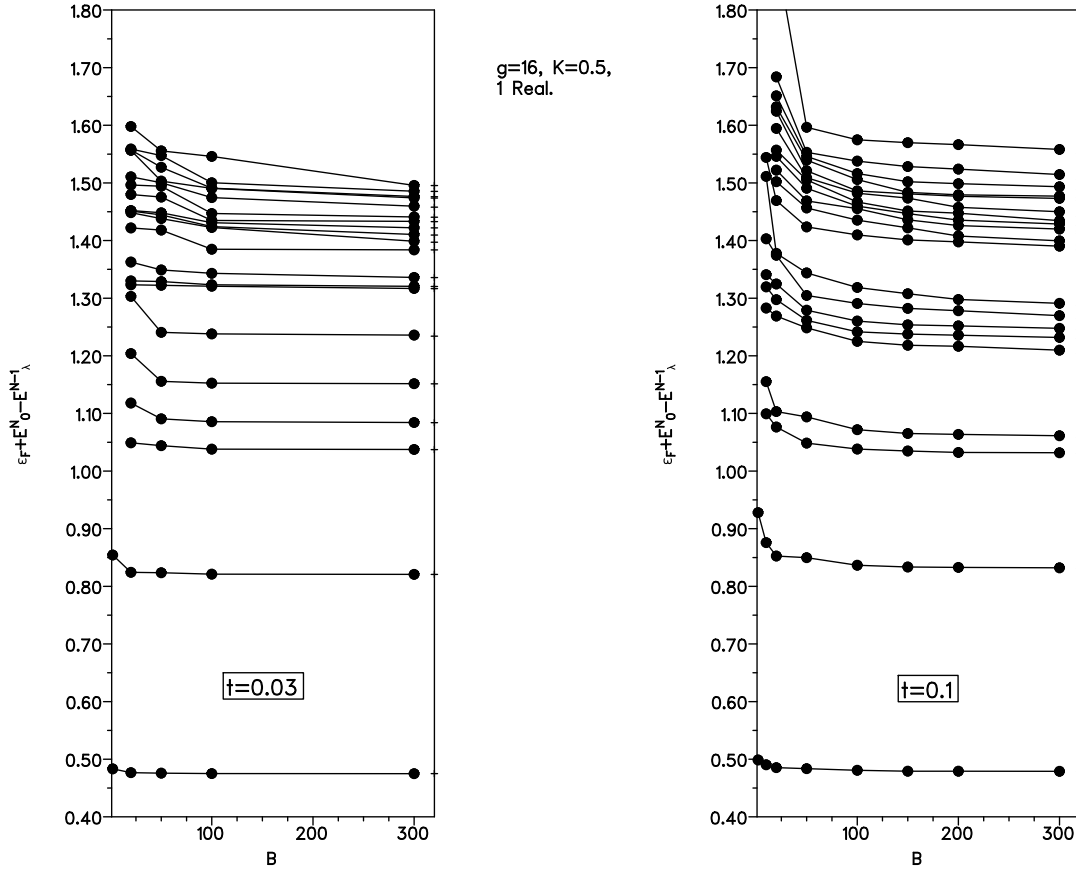


Abb. 4.9 Konvergenz der Energien der angeregten HFD-Zustände für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$ und Halfüllung in Abhängigkeit von der Basisgröße B für $t = 0.03$ und $t = 0.1$. Die Markierungen am rechten Bildrand zeigen die exakten Energien.

d) Besetzungszahlen: Die Besetzungszahl n_i des Gitterplatzes i im Zustand $|\psi_\lambda^N\rangle$ ergibt sich als Erwartungswert des Besetzungszahloperators $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$, in der HFD also zu

$$\begin{aligned} n_i &= \langle \psi_\lambda^N | \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i | \psi_\lambda^N \rangle \\ &= \sum_\pi \sum_\kappa \alpha_{\pi\lambda} \alpha_{\kappa\lambda} \sum_\mu \sum_\nu k_{i\mu} k_{i\nu} \langle \{\pi\} | \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu | \{\kappa\} \rangle. \end{aligned}$$

Wie beim Einteilchenanteil des Hamilton-Operators liefern damit nur die Basiszustände $\langle \{\pi\} |, | \{\kappa\} \rangle$ einen Anteil zur Besetzungszahl, die sich in einem Einteilchenzustand unterscheiden. Der resultierende Fehler entspricht damit maximal dem Fehler des Quadrats der Zustände $|\psi_\lambda^N\rangle$. Speziell die Grundzustandsbesetzungszahl sollte also etwas schlechter konvergieren als der Grundzustand, aber wesentlich schneller als die Leitwerte, in die Zustände und Energien auch für höhere λ direkt eingehen. Wenn man die Konvergenz der Besetzungszahlen in Abb. 4.11 mit den anderen Konvergenzbildern vergleicht, findet man dieses Verhalten bestätigt.

e) Rückkehrwahrscheinlichkeiten: In Abb. 4.12 sind die relativen Fehler der Beiträge $G_\lambda'^-$ verschiedener Zustände $|\psi_\lambda^{N-1}\rangle$ zur HFD-Rückkehrwahrscheinlichkeit für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$ für verschiedene B und t aufgetragen. Aus Platzgründen erfolgte dabei die Beschränkung auf zwei Schnitte:

a) Die obere Reihe gibt einen Schnitt im Band nach außen für die verschiedenen Beiträge $G_\lambda'^-$ bei Einteilchenenergien $\epsilon = E_\lambda^{N-1} - E_0^N$ für ein festes Transfermatrixelement $t = 0.1$ wieder,

b) die untere Reihe zeigt den Beitrag des Grundzustands $G_0'^-$ bei der Einteilchenenergie

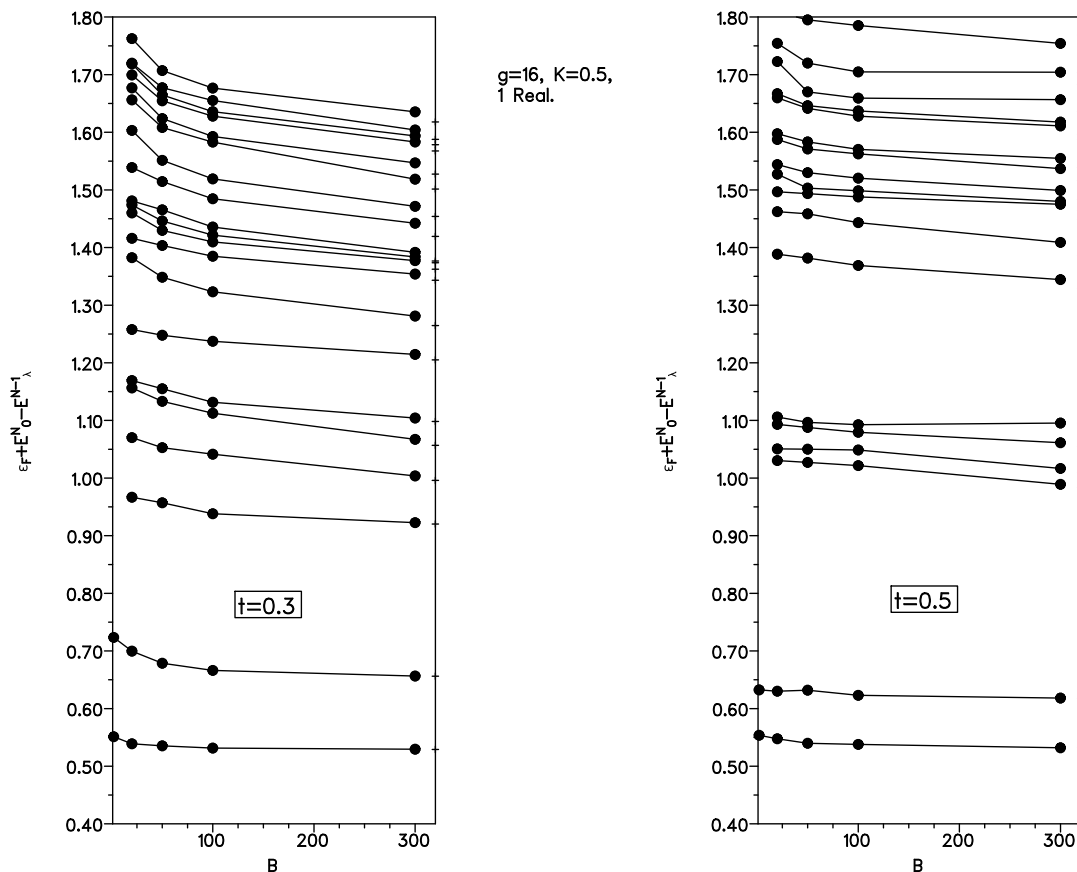


Abb. 4.10 Wie Abb. 4.9, aber für $t = 0.3$ und $t = 0.5$

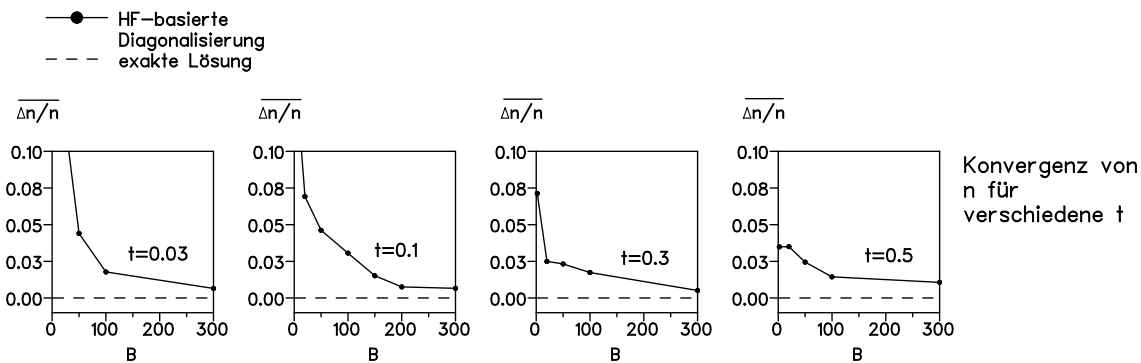


Abb. 4.11 Mittlerer relativer Fehler der HFD-Grundzustandsbesetzungszahlen $\overline{\Delta n/n} = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^g \frac{|n_i^{\text{HFD}} - n_i^{\text{exakt}}|}{n_i^{\text{exakt}}}$ für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$ und Halbfüllung in Abhängigkeit von der Basisgröße B und vom Transfermatrizelement t

$\epsilon = E_0^{N-1} - E_0^N$ für wachsende t .

Je weiter man nach außen im Band geht, umso größer ist die Wahrscheinlichkeit, daß es Sprünge in den so verdeutlichten Konvergenzkurven gibt, weil sich die höher angeregten Zustände mit wachsender Basisgröße stärker verändern und sich ihre Energien verschieben (siehe Abb. 4.9, 4.10). Erst bei erreichter Konvergenz im Energiekanal werden die Kurven glatt. ⁶

⁶Eine andere Art der Darstellung der Konvergenz der Rückkehrwahrscheinlichkeit für eine Realisie-

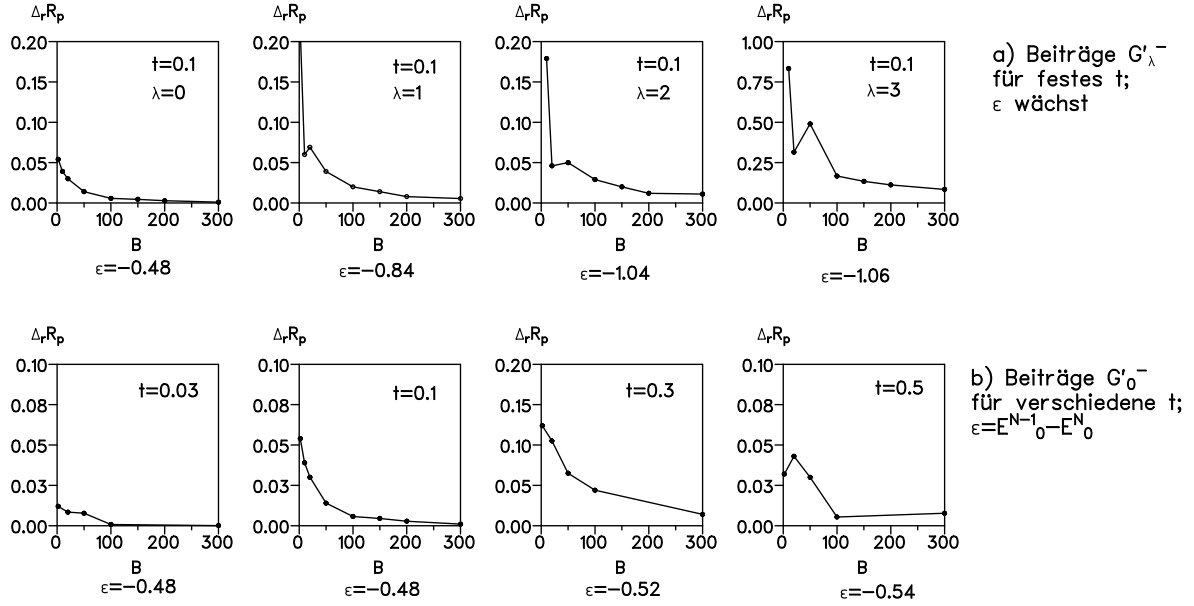


Abb. 4.12 Mittlerer relativer Fehler der Beiträge G'_{λ}^{-} verschiedener Zustände $|\psi_{\lambda}^{N-1}\rangle$ zur HFD-Rückkehrwahrscheinlichkeit $\Delta_r R_p(\epsilon) = \frac{|G'_{\lambda}^{- \text{exakt}} - G'_{\lambda}^{- \text{HFD}}|}{G'_{\lambda}^{- \text{exakt}}}$ für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$ und Halbfüllung in Abhängigkeit von der Basisgröße B und vom Transfermatrixelement t . Die obere Reihe a) gibt $\Delta_r R_p(\epsilon)$ für verschiedene G'_{λ}^{-} bei festem t , die untere Reihe b) zeigt, wie sich $\Delta_r R_p(\epsilon)$ für den Beitrag G'_0^{-} von $|\psi_0^{N-1}\rangle$ mit wachsendem t verhält. Die Zahlenangabe für die Einteilchenenergie ϵ entspricht der Energie für den jeweiligen Kanal bei der exakten Lösung.

Man sieht deutlich,

1. daß die Konvergenz des Beitrags G'_{λ}^{-} zur Rückkehrwahrscheinlichkeit für ein festes t langsamer wird, je weiter man zu höheren λ , d.h. im Band nach außen, geht (a)), und
2. daß die Konvergenz für festes λ mit wachsendem t bis $t = 0.3$ langsamer wird, dann aber nicht mehr (b)), sowie
3. daß die Rückkehrwahrscheinlichkeit langsamer konvergiert als alle bisher betrachteten Größen.

Entspricht das unseren Erwartungen? Die HF-Rückkehrwahrscheinlichkeit weicht nicht so stark von der exakten Rückkehrwahrscheinlichkeit ab, wie man das auf Grund der Fehler der Einteilchenenergien und Zustände erwarten würde, weil sich ein Teil des Fehlers durch einen ähnlichen Kompensationsmechanismus wie bei der Einteilchenzustandsdichte (siehe Abschnitt 3.4.) *im Mittel* wieder ausgleicht, am besten an der Fermienergie, schlechter zu den Bandkanten. Variiert man t , ergibt sich so die schlechteste Näherung für die Rückkehrwahrscheinlichkeit und damit die schlechteste Konvergenz bei $t = 0.1$. Beschränkt man sich jetzt aber auf die *einzelnen* Beiträge G'_{λ}^{-} eines Zustands des $N - 1$ -Systems zur Rückkehrwahrscheinlichkeit, spielt der teilweise Fehlerausgleich im Mittel keine Rolle mehr. Das Konvergenzverhalten der G'_{λ}^{-} sollte sich sich damit direkt aus dem der Zustände und Energien ergeben. Insbesondere sollte es jetzt nicht mehr für $t = 0.1$ am schlechtesten sein, sondern, wie das der Zustände, im Bereich von $t = 0.3$ bis $t = 0.5$. Quantitativ erwartet man eine langsamere Konvergenz als die der entsprechenden Zustände und Energien,

rung des Zufallspotentials zeigt Abb. 4.13 für ein ausgewähltes t und ausgewählte Basisgrößen B . Hier sind jeweils direkt die Einteilchenenergien *und* die Beiträge für die Rückkehrwahrscheinlichkeit bei diesen Energien eingezeichnet. Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist aber so immer nur der Vergleich zwischen wenigen Basisgrößen möglich.

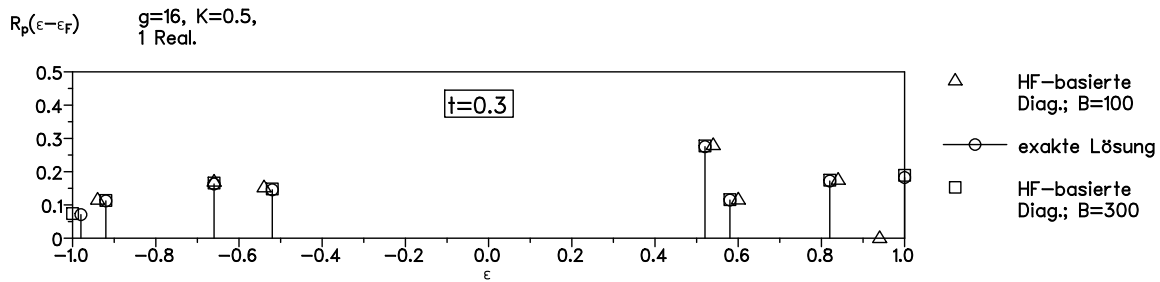


Abb. 4.13 Vergleich der exakten Rückkehrwahrscheinlichkeiten $R_p(\epsilon)$ für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$, $t = 0.3$ und Halbfüllung mit den HFD-Rückkehrwahrscheinlichkeiten bei einer Basisgröße von $B = 100$ und $B = 300$. Die Konvergenz bei allen anderen t ist besser oder gleichgut.

weil diese in verschiedenen Potenzen in die $G_\lambda^{\prime-}$ eingehen. All das entspricht etwa unserem Befund.

f) Leitwerte: In Abb. 4.14 ist das Konvergenzverhalten der Beiträge verschiedener angeregter Zustände $|\psi_\lambda^N\rangle$ zum HFD-Leitwert $G_{xx}(\omega)$ für eine Realisierung des Zufallspotentials im System mit $g = 16$ bei verschiedenen B und t dargestellt. Wieder haben wir uns auf zwei Schnitte beschränkt:

- Die obere Reihe zeigt den relativen Fehler der Beiträge verschiedener angeregter Zustände $|\psi_\lambda^N\rangle$ bei Frequenzen $\omega = E_\lambda^N - E_0^N$ für ein festes Transferelement $t = 0.1$,
- die untere die relativen Abweichungen des Beitrags vom ersten angeregten Zustand $|\psi_1^N\rangle$ bei $\omega = E_1^N - E_0^N$ mit wachsenden t .

Wie bei den Rückkehrwahrscheinlichkeiten kommt es auch hier zu Sprüngen in den Konvergenzkurven, weil sich die höher angeregten Zustände und ihre Energien vor allem bei kleinen Basisgrößen noch stark verändern.⁷

Ein Blick auf die Abbildungen bestätigt unsere Vermutungen (siehe Abschnitt 4.2.): Für festes t wird die Konvergenz im Mittel langsamer, je höher die Frequenz ist. Mit steigendem t verschlechtert sich die Konvergenz bis $t = 0.3$, dann aber bis $t = 0.5$ nicht mehr. Ein Blick auf die Skalierung der relativen Fehler macht auch klar, daß der Leitwert von allen hier betrachteten Größen tatsächlich am langsamsten konvergiert.

Je größer das System ist, umso dichter liegen die angeregten Zustände, umso schmaler wird bei gleichen Anschlußbedingungen aber auch die Lorentz-Verbreiterung der einzelnen Delta-Peaks (siehe Anhang 1), so daß auch bei größeren Systemen die Gleichstromleitfähigkeit hauptsächlich von den Beiträgen bei sehr niedrigen Frequenzen bestimmt wird. Das eröffnet die Möglichkeit, trotz ungünstigen Konvergenzverhaltens des Leitwertes $G_{xx}(\omega)$ für größere ω den Gleichstromleitwert bereits mit relativ kleinen Basisgrößen sicher zu bestimmen.

Fazit:

Die am langsamsten konvergierende Größe ist der Leitwert. Wenn der Leitwert bei mehreren unabhängigen Realisierungen im Bereich niedriger Frequenzen $\omega = E_\lambda^N - E_0^N$ konvergiert ist, sind Grundzustand und angeregte Zustände bis $|\psi_\lambda\rangle$ sowie die entsprechenden Energien als auch die Rückkehrwahrscheinlichkeit bis zu Einteilchenenergien von $\epsilon = E_\lambda^{N\pm 1} - E_0^N$ mit Sicherheit ebenfalls konvergiert. Bei größeren Systemen, wo kein Vergleich mit exakten Ergebnissen mehr möglich ist, muß man also lediglich für verschie-

⁷Abb. 4.15 gibt die volle Information über $G(\omega)$ für eine Realisierung wieder; aus Gründen der Übersichtlichkeit kann man hier aber wieder nur wenige Basisgrößen vergleichen.

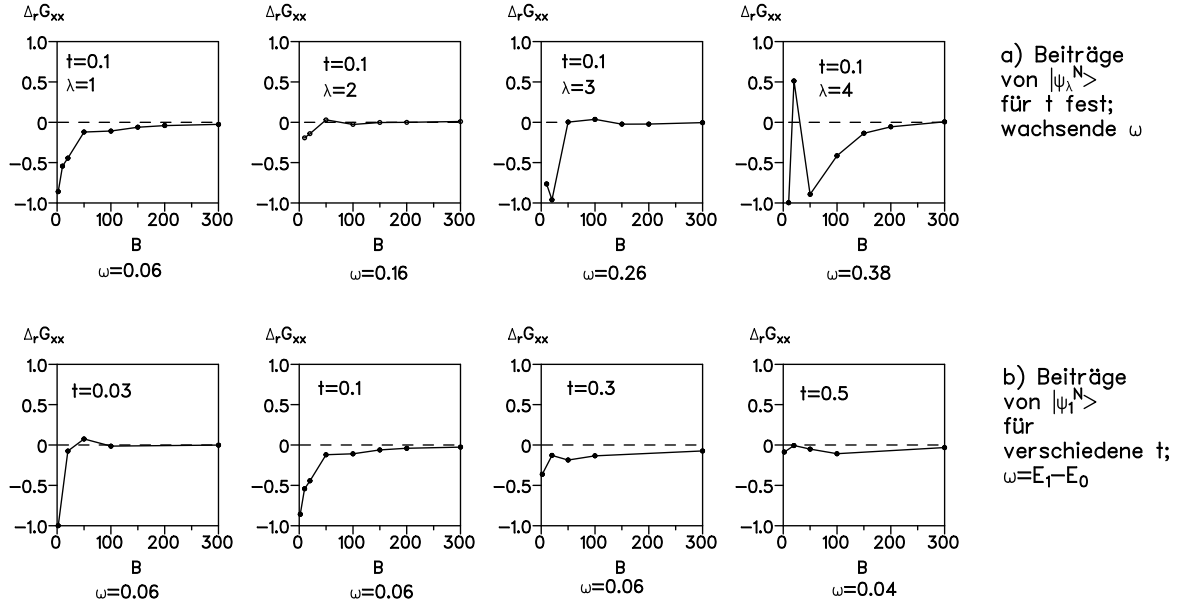


Abb. 4.14 Mittlerer relativer Fehler $\Delta_r G_{xx}(\omega) = \frac{|G_{xx}(\omega)^{\text{exakt}} - G_{xx}(\omega)^{\text{HFD}}|}{G_{xx}(\omega)^{\text{exakt}}}$ der Beiträge verschiedener angeregter Zustände $|\psi_\lambda^N\rangle$ zum HFD-Leitwerte für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$ und Halbfüllung in Abhängigkeit von der Basisgröße B und vom Transfermatrizelement t . Die obere Reihe a) gibt den relativen Fehler der Beiträge verschiedener angeregter Zustände $|\psi_\lambda^N\rangle$ bei festem t wieder; die untere Reihe b) zeigt, wie sich der Beitrag vom ersten angeregten Zustand $|\psi_1^N\rangle$ mit wachsendem t verhält. Die Zahlenangabe für die Frequenz ω entspricht der Frequenz für den jeweiligen Kanal bei der exakten Lösung.

dene Realisierungen die Leitwerte nach Art von Abb. 4.15 bei verschiedenen Basisgrößen vergleichen: Ergeben sich bei z.B. Verdoppelung oder Verdreifachung der Basisgröße in einem bestimmten ω -Bereich kaum noch Änderungen, ist der Leitwert dort konvergiert. Man sieht aus unserer Analyse, daß für das System mit $g = 16$ bei Halbfüllung eine Basisgröße von $B = 300$ bereits ausreicht, um im gesamten t -Bereich relevante Aussagen zur Rückkehrwahrscheinlichkeit an der Fermienergie und zum Gleichstromleitwert zu machen (siehe Abb. 4.15). Dem entspricht ein Basis-Komprimierungsfaktor von etwa 40. Im System mit $g = 16$ ist damit eine deutlich größere Basisreduktion möglich als im System mit $g = 12$. Das macht es sehr sinnvoll, die Konvergenz auch in größeren Systemen zu untersuchen.

4.5 Test der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung für $g = 25$

Die Konvergenzbilder 4.16 zeigen die Beiträge für den HFD-Leitwert $G_{xx}(\omega)$ in den einzelnen Frequenzkanälen ω für eine Realisierung eines Systems mit $g = 25$ und $N = 12$ im Bereich niedriger bis mittlerer Frequenzen bei verschiedenen Basisgrößen B .

Man sieht, daß sich für diese spezielle Realisierung bei $t = 0.03$ bereits ab einer Basisgröße von $B = 500$ im Bereich niedriger Frequenzen nicht mehr viel verändert. Für $t = 0.1$ und den ungünstigsten Fall $t = 0.3$ ist eine Konvergenz etwa ab $B = 1000$ erreicht. Ähnliche Darstellungen für andere Realisierungen bestätigen dieses Ergebnis.⁸

Wenn eine Basisgröße von $B = 1400$ für den niederfrequenten Anteil des Leitwerts bei

⁸Untersuchungen des Lorentz-verbreiterten Leitwerts eines kontaktierten Systems vermitteln den Eindruck, daß die Konvergenz der verbreiterten Größe eher noch schneller ist als ohne Verbreiterung.

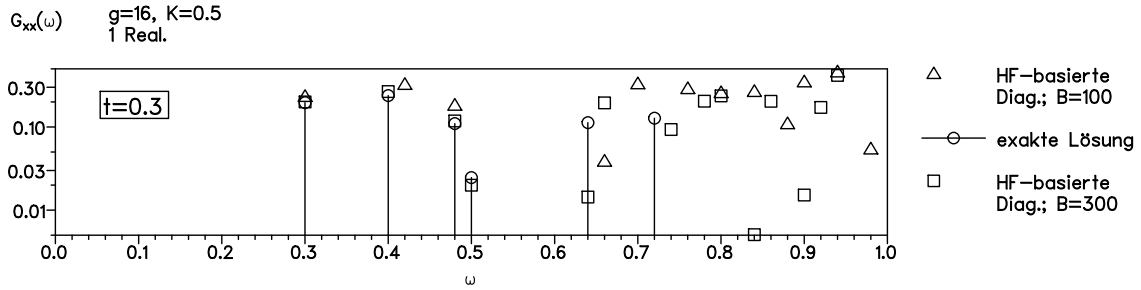


Abb. 4.15 Vergleich der exakten Leitwerte $G_{xx}(\omega)$ für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$, $t = 0.3$ und Halbfüllung mit den HFD-Leitwerten bei einer Basisgröße von $B = 100$ und $B = 300$. Die Konvergenz bei allen anderen t ist besser oder gleichgut.

$t = 0.3$ eine gute Näherung liefert, trifft das erst recht bei allen anderen t zu.

Die Basisgröße von $B = 1400$ reicht damit zur richtigen Beschreibung der wesentlichen Eigenschaften eines Systems mit $g = 5 * 5$ bei Halbfüllung in der Nähe der Fermienergie bzw. im niederfrequenten Bereich aus. Dem entspricht eine Basiskomprimierung von ungefähr 3500. Das zeigt das Potential der Methode und läßt darauf hoffen, weitere Schritte zu größeren Systemen realisieren zu können.

Mit den Ergebnissen für die Systeme mit $g = 16$ und $g = 25$ können wir die zentrale Frage, ob die gefundene Lokalisierung nicht ein Randeffect sein könnte, der sich mit wachsender Systemgröße zu immer größeren t verschiebt und im thermodynamischen Grenzfall verschwindet, die nach der exakten Rechnung für das System mit $g = 12$ in Kapitel 3 verblieb, ein Stück weiter beantworten:

Ein Vergleich der Leitwerte $G_{xx}(\omega)$ des Systems mit $g = 12$ und $N = 6$ (siehe Abb. 3.9) mit den Leitwerten $G_{xx}(\omega)$ für die Systeme mit $g = 16$, $N = 8$ und $g = 25$, $N = 12$ (Abb. 4.17) zeigt, daß die Differenzen zwischen den Leitwerten mit und ohne Wechselwirkung mit wachsender Systemgröße für alle t eher zunehmen. Das verdeutlicht auch Abb. 4.18, in der eine erste Auftragung der Systemgrößenabhängigkeit des Gleichstromleitwertes für verschiedene t versucht wurde: Obwohl das Bild wegen der geraden und ungeraden Teilchenzahlen der verglichenen Systeme mit einigen Vorbehalten betrachtet werden muß⁹, sieht es so aus, als ob sowohl der delokalisierende Einfluß der Wechselwirkung für $t = 0.03$ als auch der lokalisierende Einfluß für $t = 0.3$ mit wachsender Systemgröße größer werden. Für Systeme mit einem Verhältnis Unordnung/Wechselwirkung $\frac{W_0}{U} = 1$ zeichnet sich damit das allgemeine Ergebnis ab, daß die Coulomb-Wechselwirkung für kleine t die Transporteigenschaften verbessert, für größere t jedoch verschlechtert.

Ein physikalischer Grund dafür kann leider noch nicht angegeben werden:

a) Wir verstehen zwar, wieso der HF-Leitwert bei kleinen t den exakten Leitwert und auch

⁹Daß hier Sorgfalt angebracht ist, sieht man, wenn man die Kubo-Greenwood Formel auf ein mesoskopisches System freier Elektronen in einer Dimension anwendet: Für ungerade Teilchenzahlen lassen sich die Sinus- und Kosinusanteile der Zustände so besetzen, daß man die Zustände als ebene Wellen schreiben kann. Ebene Wellen sind Eigenzustände des Stromoperators, so daß man die Eigenwerte im Strom-Strom-Korrelator aus dem Erwartungswert herausnehmen kann. Weil die verbleibenden Eigenzustände orthogonal zueinander sind, ergibt sich für den Gleichstromleitwert $G_{xx}(0)$ der richtige Wert von Null. (Der Drude-Peak ist in unserer Form der Kubo-Greenwood Formel nicht enthalten.) Hat man eine gerade Teilchenzahl, verbleibt immer ein einzelner Sinus- oder Kosinusanteil, der mit den Stromoperatoren einen endlichen Beitrag liefert. Durch die $\omega \rightarrow 0$ -Extrapolation ergibt sich ein unendlicher Beitrag zum Gleichstromleitwert. Genügend starke Unordnung hebt die Entartung des Grundzustands auf, so daß der Unterschied teilweise wieder verschwindet; dennoch sollte man vor einer genauen Untersuchung der Differenzen im Gleichstromleitwert zwischen Systemen mit geraden und ungeraden Teilchenzahlen mit einem Vergleich vor allem bei großen t vorsichtig sein.

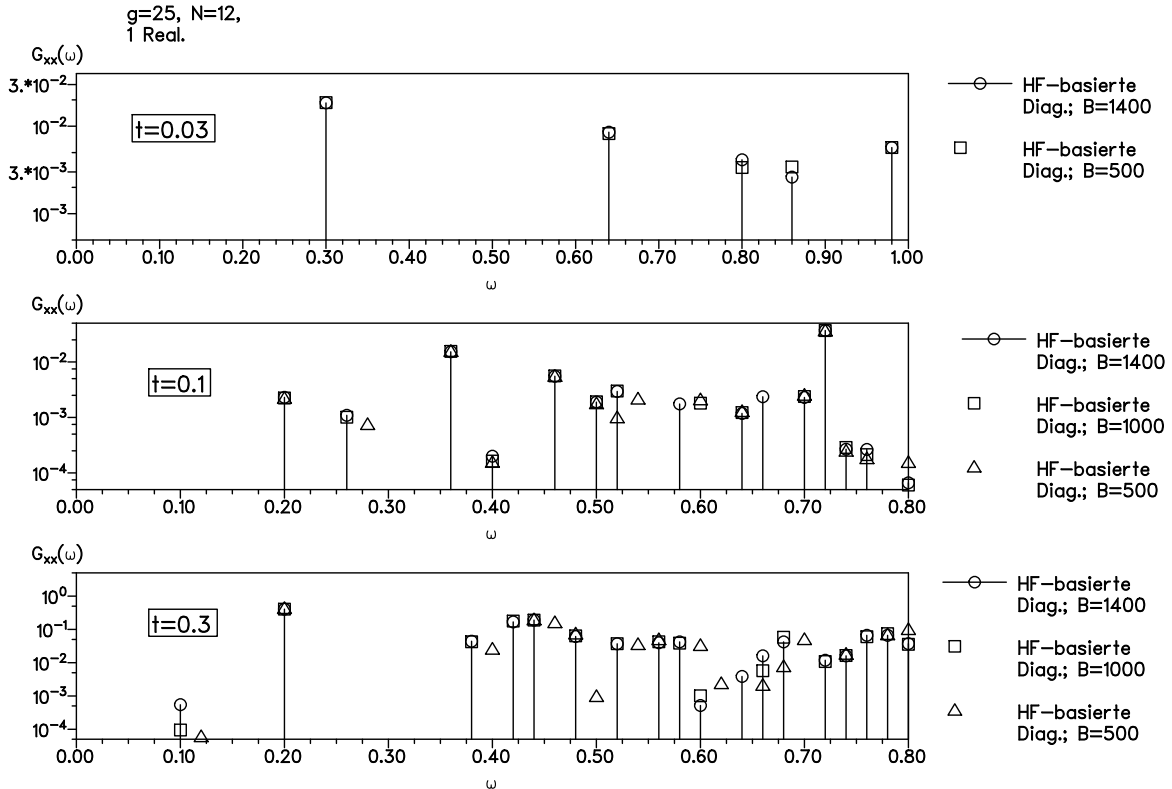


Abb. 4.16 Vergleich der HFD-Leitwerte $G(\omega)$ im Bereich kleiner Frequenzen für verschiedene Basisgrößen B für eine Realisierung des Systems mit $g = 25$ und $N = 12$ bei $t = 0.03$, $t = 0.1$ und $t = 0.3$.

den Anderson-Leitwert stark unterschätzt (siehe Abschnitt 2.7. und 3.5.), es gibt aber keinen plausiblen Grund dafür, daß die Differenz zwischen exaktem Leitwert und HF-Leitwert für kleine t größer sein sollte als die zwischen Anderson-Leitwert und HF-Leitwert.

b) Plausibler ist, daß sich für $t \rightarrow \infty$ die exakten Leitwerte schneller den HF-Leitwerten nähern als diese sich den Anderson-Werten, so daß es für größere t immer einen Übergang zu lokalisierenden Tendenzen durch Wechselwirkung gibt.¹⁰

Die neue Frage, die sich ergibt, ist, ob man durch Wahl eines entsprechen kleinen t immer in einen delokalisierenden Bereich gelangen kann, egal, welchen Wert das Verhältnis $\frac{W_0}{U}$ hat, oder ob der delokalisierende Bereich nicht vielleicht eine Folge unserer bisherigen Wahl $\frac{W_0}{U} = 1$ ist und für andere U möglicherweise verschwindet.

Kann man dazu mit einfachen Überlegungen etwas sagen? Wir wollen kurz überlegen, wie die bisherige Argumentation von der Wechselwirkungsstärke abhängt:

Einerseits unterschätzt die HF-Näherung die exakten Leitwerte umso mehr, je stärker bereits im klassischen Grenzfall eine falsche Lücke in den Teilchen-Loch-Energien vorliegt, d.h., je stärker die Wechselwirkung relativ zur Unordnung ist. Andererseits wird aber auch die Lücke in der Einteilchenzustandsdichte bei der HF-Näherung gegenüber dem Anderson-Modell mit größerer Wechselwirkungsstärke breiter, und der HF-Leitwert liegt auch immer weiter unter dem Anderson-Leitwert.

Da die genaue U -Abhängigkeit beider Verschiebungen nicht bekannt ist, kann man dar-

¹⁰Das ist aber auch nicht trivial: Das HF-Verfahren sollte natürlich ein wechselwirkendes System besser nähern als einfaches Weglassen der Wechselwirkung, aber gerade beim Leitwert stimmt das eben bei kleinen t so nicht. Erst für größere t wird der HF-Hamiltonoperator offensichtlich schneller dem exakten Hamiltonoperator ähnlich, als dieser im Mean-Field-Grenzfall auch dem Anderson-Hamiltonoperator gleich wird.

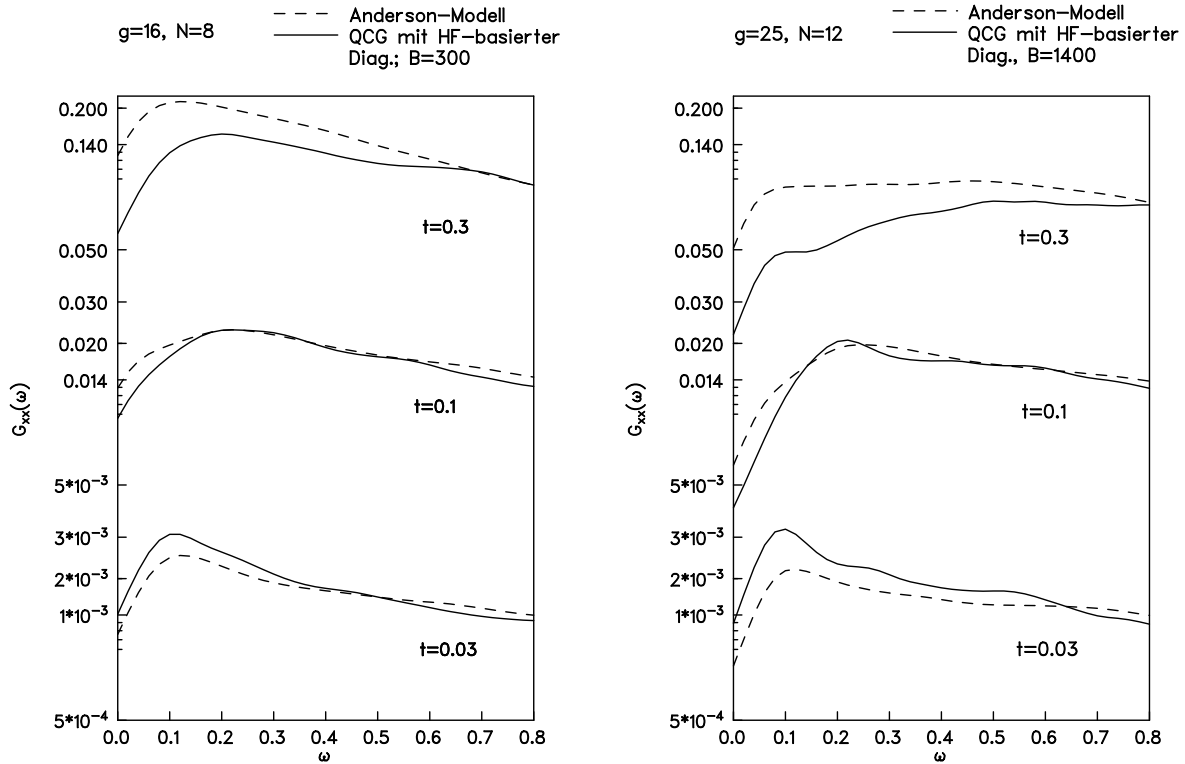


Abb. 4.17 Leitwerte $G(\omega)$ für ein System mit $g = 16, N = 8$ und $g = 25, N = 12$ bei $t = 0.03, t = 0.1$ und $t = 0.3$ im Vergleich. Die Breite der Lorentzverteilung γ beträgt $\gamma = 0.1$ für $g = 16$ und $\gamma = 0.08$ für $g = 25$.

aus nicht einschätzen, ob es für kleine t bei beliebigen U eine Delokalisierung gibt. Für große t zeigt sich das unter b) aufgeführte Verhalten sicher auch bei anderen Wechselwirkungsstärken. Außerdem wissen wir noch, daß im (neuen) Grenzfall $U \rightarrow \infty$ bei endlichem t der exakte Leitwert und der HF-Leitwert Null werden müssen, weil das System ein Wigner-Kristall wird. Daraus folgt, daß es für jedes t möglich sein sollte, durch Wahl eines hinreichend großen U lokalisierende Tendenzen der Wechselwirkung zu erreichen, sowie daß es für jedes U möglich sein sollte, durch Wahl eines hinreichend großen t lokalisierende Tendenzen der Wechselwirkung zu erreichen.

Nicht mehr klar ist, ob das entsprechende U bzw. t mit wachsendem t bzw. U größer oder kleiner werden muß.

4.6 Erste Nutzrechnungen und Ausblick

Für größere Serien von Nutzrechnungen mit verschiedenen Wechselwirkungsstärken wurde das Verfahren nochmals im Detail verbessert. Insbesondere fanden zwei Veränderungen Eingang:

1. Empirisch zeigt sich, daß sich die Qualität des Basissatzes erhöhen und damit seine zur Konvergenz notwendige Größe B reduzieren läßt, wenn man zur Aufstellung der energie-

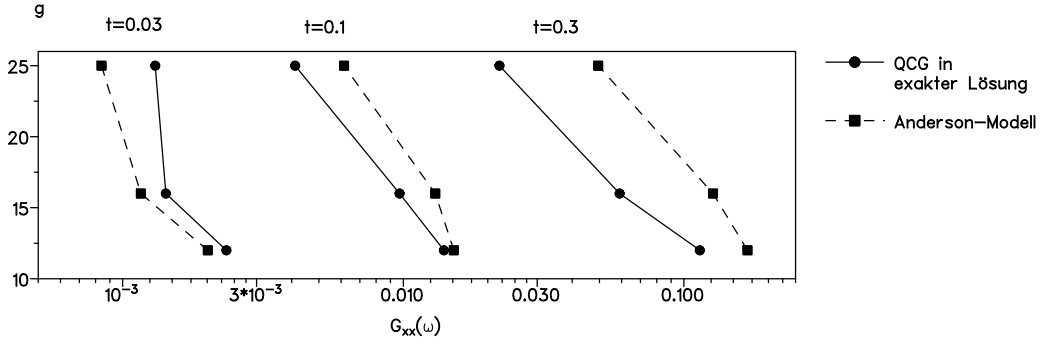


Abb. 4.18 Gleichstromleitwerte $G_{xx}(0)$ für ein System mit $g = 12, N = 6$, $g = 16, N = 8$ und $g = 25, N = 12$ bei $t = 0.03$, $t = 0.1$ und $t = 0.3$ im Vergleich. Die Breite der Lorentzverteilung γ beträgt für $g = 12$ $\gamma = 0.1$, für $g = 16$ $\gamma = 0.1$ und für $g = 25$ $\gamma = 0.08$.

tisch geordneten HF-Vielteilchenbasis nicht die HF-Energie eines HF-Slaterzustands $|\{\kappa\}\rangle$

$$E_{\kappa}^{\text{HF}} = \sum_{k=1}^N \epsilon_{\kappa_k} = \langle \{\kappa\} | \left[\sum_{m,n} \hat{c}_m^{\dagger} \hat{c}_n H_{mn} + \sum_{n,m \neq n} \frac{1}{r_{mn}} \left(\hat{c}_m^{\dagger} \hat{c}_m \langle \hat{c}_n^{\dagger} \hat{c}_n \rangle_0 - \hat{c}_m^{\dagger} \hat{c}_n \langle \hat{c}_n^{\dagger} \hat{c}_m \rangle_0 \right) \right] | \{\kappa\} \rangle$$

heranzieht, sondern den Erwartungswert mit einem HF-Hamilton-Operator, der anstelle der Grundzustands-Effektivpotentiale die effektiven Potentiale mit dem jeweiligen Zustands selbst enthält:¹¹.

$$\langle \{\kappa\} | \hat{H}'_{\text{HF}} | \{\kappa\} \rangle = \langle \{\kappa\} | \left[\sum_{m,n} \hat{c}_m^{\dagger} \hat{c}_n H_{mn} + \sum_{n,m \neq n} \frac{1}{r_{mn}} \left(\hat{c}_m^{\dagger} \hat{c}_m \langle \{\kappa\} | \hat{c}_n^{\dagger} \hat{c}_n | \{\kappa\} \rangle - \hat{c}_m^{\dagger} \hat{c}_n \langle \{\kappa\} | \hat{c}_n^{\dagger} \hat{c}_m | \{\kappa\} \rangle \right) \right] | \{\kappa\} \rangle .$$

Eine direkte Ausführung des Monte-Carlo-Algorithmus mit diesen Erwartungswerten anstelle der HF-Energien kostet aber sehr viel mehr Zeit, weil die Berechnung des Erwartungswertes wesentlich länger dauert als die der HF-Energie. Man erzielt aber fast denselben Effekt, wenn man den Monte-Carlo Algorithmus durch ein zweistufiges Verfahren ersetzt: In der ersten Stufe werden in der bisherigen Weise $3 \dots 5B$ Basiszustände gesucht. Diese zu große Basis wird dann nach den Erwartungswerten $\langle \{\kappa\} | \hat{H}'_{\text{HF}} | \{\kappa\} \rangle'$ geordnet. Die niederenergetischsten B Zustände verbleiben als Basissatz.

2. Eine Analyse der Verteilung der Leitwerte $G_{xx}(\omega)$ zeigt, daß für kleine t nicht $G_{xx}(\omega)$ selbst gaußverteilt ist, sondern der Logarithmus von $G_{xx}(\omega)$.¹² Entsprechend wird jetzt nicht mehr der Leitwert selbst gemittelt, sondern sein Logarithmus, was eine erheblich bessere numerische Stabilität gegenüber der Anzahl der Realisierungen bringt und erheblich geringere Schwankungsquadrate („typischer Leitwert“).

Die Abb. 4.19, 4.20 und 4.21 zeigen Rechnungen mit diesem verbesserten Verfahren in 3d, 2d und 1d für Systeme mit $g = 3 \times 3 \times 3$, $g = 5 \times 5$ und $g = 25 \times 1$ Gitterplätzen für

¹¹Für den HF-Grundzustand stimmen beide Energien überein, bei den angeregten HF-Slaterzuständen nicht, weil diese nicht selbstkonsistent sind.

¹²Das ist nicht überraschend, ist es doch im wechselwirkungsfreien Fall beim Anderson-Modell der Lokalisierung auf der isolierenden Seite ähnlich, wie z.B. numerische Rechnungen zeigen [KM93].

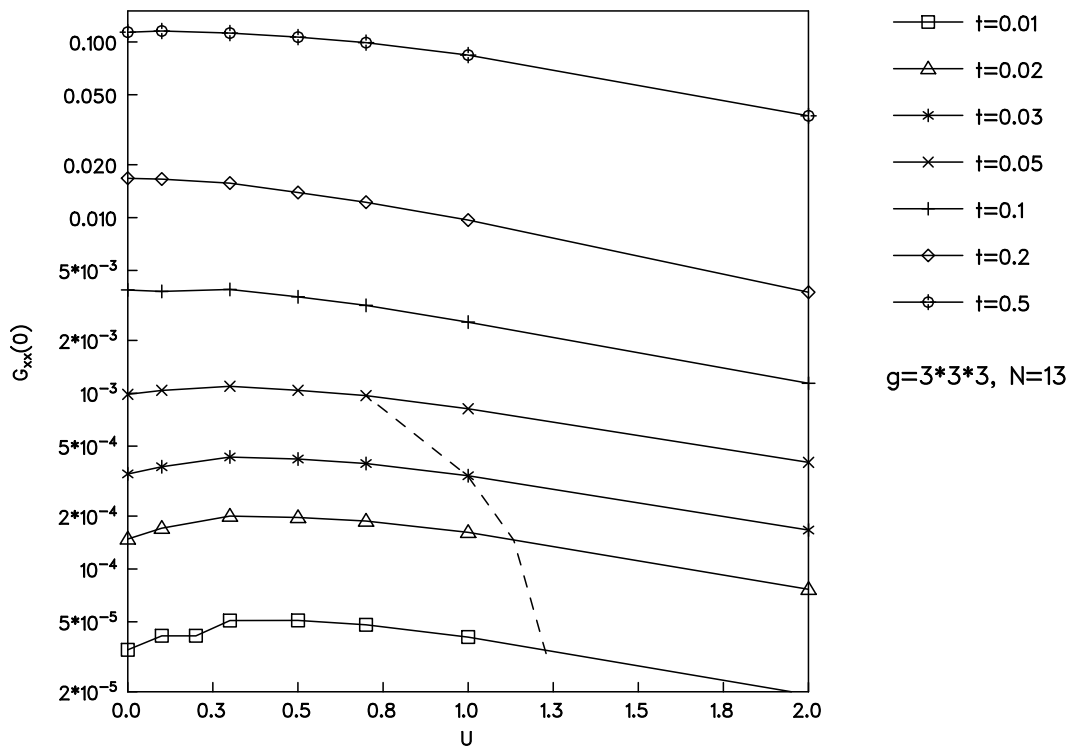


Abb. 4.19 Gleichstromleitwerte $G_{xx}(0)$ für ein System in 3d mit $g = 3 \times 3 \times 3$, $N = 13$ und $W_0 = 1$ bei verschiedenen Transfermatrixelementen t und Stärken der Wechselwirkung U . Die Breite der Lorentzverteilung γ beträgt $\gamma = 0.05$. Die gestrichelte Linie trennt die Bereiche, in denen die Wechselwirkung einen delokalierenden Einfluß hat (links von der Linie), von den Bereichen, in denen sie einen lokalierenden Einfluß hat (rechts von der Linie). Für größere t liegen zu wenig Daten vor, so daß hier der Verlauf der Trennlinie im Bereich kleiner Wechselwirkungsstärken U noch unklar ist.

verschiedene Transfermatrixelemente t und Stärken der Wechselwirkung U .

Allen Systemen gemeinsam ist, daß sich der Bereich, in dem es Delokalisierung gibt, mit wachsender Stärke der Wechselwirkung zu immer kleineren t verlagert:

Für ein bestimmtes t führt eine genügend starke Wechselwirkung immer zu Lokalisierungseffekten. Je kleiner t dabei ist, umso größer muß diese Wechselwirkungsstärke sein.

Ebenso läßt sich für ein bestimmtes U immer eine lokalisierende Tendenz der Wechselwirkung erreichen, wenn man t groß genug wählt. Je kleiner die Wechselwirkungsstärke dabei ist, umso größer muß t sein.

Das Verhalten in 3d und 1d läßt sich in erster Näherung wie folgt beschreiben: Es sieht so aus, als ob die Kurvenschar für 3d gegenüber der für 2d zu niedrigeren t verschoben ist. Ebenso erscheint die Kurvenschar für 1d gegenüber der für 2d zu höheren t verschoben. Das überrascht zumindest qualitativ nicht: Ein bestimmter Überlapp entspricht in 3d effektiv einem höheren t als in 2d, weil es mehr Nachbarn gibt. Die Kurve für ein bestimmtes t in 3d sollte damit wie die für ein größeres t in 2d aussehen. Ebenso ist es bei 1d: Hier gibt es weniger Nachbarn; die Kurve für ein bestimmtes t in 1d sollte damit wie die für ein kleineres t in 2d aussehen.

Nicht klar wird aus den Kurven, ob es für beliebige t möglich ist, mit hinreichend kleinem U in den delokalierenden Bereich zu kommen. Hier bedarf es weiterer Simulationen und Überlegungen.

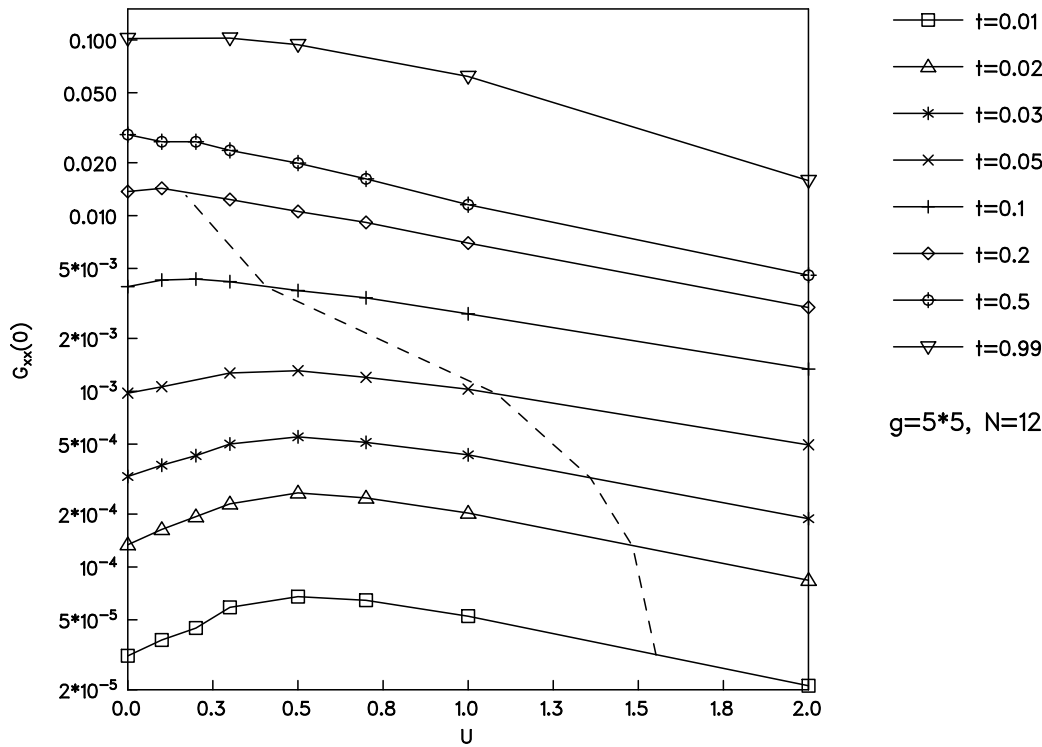


Abb. 4.20 Wie Abb. 4.19, aber für ein System in 2d mit $g = 5 \times 5$ und $N = 12$

Ebenfalls erscheint es wünschenswert, statt der komplizierten Größe Gleichstromleitwert, die im Kubo-Greenwood Formalismus den diffizilen Grenzübergang $\omega \rightarrow 0$ beinhaltet, eine „robustere“ Größe zur Verfügung zu haben. (Eine Möglichkeit für eine besser berechenbare Größe wäre z.B., einen Landauer-Büttiker-artigen Ansatz, der nach der Tunnelwahrscheinlichkeit eines Elektrons fragt, für wechselwirkende Teilchen zu verallgemeinern. Hier könnte es wiederum Berührungspunkte mit der Rückkehrwahrscheinlichkeit geben, die auch eine Art Tunnelwahrscheinlichkeit darstellt, wenn auch nicht von einem Rand des Systems zum anderen.) Während der Leitwert im Makroskopischen eine klare Größe ist, scheint es, daß es im mesoskopischen Bereich ganz verschiedene Möglichkeiten gibt, Leitwerte zu definieren [D97, M95, KF92]. Die Untersuchung dieser verschiedenen Möglichkeiten und ihres Zusammenhangs mit den anderen Maßen für Lokalisierung (siehe Kapitel 3), insbesondere mit der Rückkehrwahrscheinlichkeit, könnte bereits mit den bis jetzt beherrschbaren Systemgrößen vorgenommen werden.

Eine weitere Herausforderung besteht darin, die HFD weiter auszubauen und zu Systemgrößen von mindestens $g = 64$ vorzustoßen, was eine bessere Behandlung dreidimensionaler Systeme erlauben würde. Schwerpunkt müßte dabei eine weitere Optimierung der Basis auf Grund physikalischer Überlegungen sein.

Ebenfalls wünschenswert wäre es, den Übergang von delokalisierender Tendenz der Wechselwirkung zu lokalisierender Tendenz mit einer physikalischen Modellvorstellung verstehen zu können. Delokalisierende Tendenzen sind zumindest für kurzreichweitige Wechselwirkungen und lokalisierte Elektronen plausibel, wenn man sich überlegt, daß sich dann die Wechselwirkung auf einen lokalen inelastischen Streuprozeß der Elektronen reduzieren läßt, der ihre Phasenkorrelation stört und damit die durch Interferenz an den Störstellen

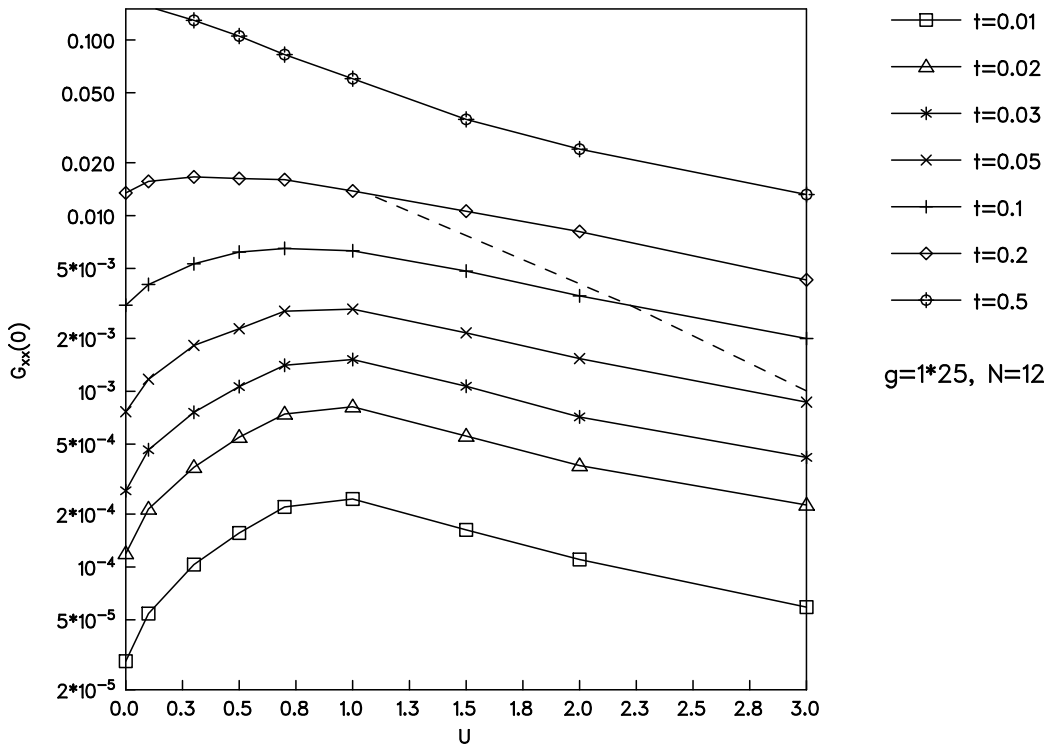


Abb. 4.21 Wie Abb. 4.19, aber für ein System in 1d mit $g = 25 \times 1$ und $N = 12$

induzierte Anderson-Lokalisierung schwächt. Wie solche Vorstellungen aber auf langreichweitige Wechselwirkungen und beliebige t ausgeweitet werden können, ist nicht klar. Am Ende dieses Kapitels sei nochmals, wie bisher immer, eine kurze Zusammenfassung des Hauptresultats in einer These gegeben:

- Wechselwirkung induziert für $\frac{W_0}{U} = 1$ im Bereich kleiner t immer eine stärkere Delokalisierung, im Bereich großer t dagegen immer eine stärkere Lokalisierung. Für ein bestimmtes t führt eine genügend starke Wechselwirkung immer zu Lokalisierungseffekten. Je kleiner t dabei ist, umso größer muß diese Wechselwirkungsstärke sein. Ebenso läßt sich für ein bestimmtes U immer eine lokalisierende Tendenz der Wechselwirkung erreichen, wenn man t groß genug wählt. Je kleiner die Wechselwirkungsstärke dabei ist, umso größer muß t sein.

Zusammenfassung

Gegenstand der Arbeit ist das Quanten-Coulomb-Glas, ein verallgemeinertes Coulomb-Glas-Modell mit Transfermatrixelementen zwischen benachbarten Gitterplätzen. Im Mittelpunkt steht die Untersuchung der Lokalisierungs- und Transporteigenschaften auf der isolierenden Seite des MIT, insbesondere die Frage, ob die Elektron-Elektron-Wechselwirkung zu einer Verbesserung oder zu einer Verschlechterung der Transporteigenschaften im Verhältnis zum nichtwechselwirkenden System führt.

Das Modell wird dazu mit der HF-Näherung untersucht, für kleine Gitter (4×3 Gitterplätze) exakt gelöst und für zweidimensionale Systeme mit 12, 16 und 25 Gitterplätzen sowie für Systeme mit 25×1 , 5×5 und $3 \times 3 \times 3$ Gitterplätzen bei verschiedenen Wechselwirkungsstärken mit der neuen Methode der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung (HFD) behandelt. Dabei ergeben sich folgende Erkenntnisse:

Hartree-Fock-Näherung: Weil eine Einteilchentheorie vorliegt, können hier die aus dem Anderson-Modell bekannten Maße zur Beurteilung der Lokalisierungseigenschaften herangezogen werden. Einteilchenzustandsdichte, Lokalisierung von Einteilchenzuständen und Transporteigenschaften hängen direkt miteinander zusammen. Die Einteilchenzustandsdichte, die inversen Partizipationszahlen der Einteilchenzustände und die Lage des MIT werden numerisch untersucht.

Alle Ergebnisse lassen sich dabei physikalisch von einer Grundüberlegung her verstehen: Das Quanten-Coulomb-Glas kann in Einteilchennäherung im gesamten isolierenden Bereich für wachsende Transfermatrixelemente wie ein klassisches Coulomb-Glas auf immer größeren Längenskalen betrachtet werden.

Die Einteilchenzustandsdichte zeigt daher eine Coulomb-Lücke, die erst am Phasenübergangspunkt verschwindet und sich zu einer Coulomb-Anomalie umwandelt. Die Coulomb-Lücke ist dabei Resultat des Hartree-Terms, während die Coulomb-Anomalie vom Austauschterm hervorgerufen wird.

Weil die Einteilchenzustandsdichte bei ϵ_F im gesamten isolierenden Bereich kleiner ist als weiter zur Bandkante, sind die HF-Einteilchenzustände bei ϵ_F immer stärker lokalisiert als die Zustände weiter im Band. Da die Einteilchenzustandsdichte bei ϵ_F auch immer kleiner ist als im nichtwechselwirkenden System, sind die HF-Einteilchenzustände bei ϵ_F im isolierenden Bereich auch immer stärker lokalisiert als die Zustände des nichtwechselwirkenden Systems für dasselbe Transfermatrixelement. Der Unterschied ist am größten, wenn ϵ_F in der Bandmitte liegt und wird für ϵ_F weiter an der Bandkante kleiner.

Der MIT tritt deshalb unabhängig von ϵ_F immer bei größeren Transfermatrixelementen auf als im nichtwechselwirkenden System. Die Differenz ist wieder maximal in der Bandmitte und wird zur Bandkante geringer. In HF-Näherung führt die Wechselwirkung damit immer zu einer Verschlechterung des Transports.

Exakte Diagonalisierung kleiner Gitter: Die HF-Näherung mittelt Korrelationen her-

aus, die für den Transport wichtig sind. Eine Kontrolle der Güte dieser Näherung ist daher gerade für Transportprobleme wünschenswert.

Die exakte Diagonalisierung kleiner Gitter zeigt, daß die HF-Näherung die Einteilchenzustandsdichte im gesamten Band sehr gut beschreibt.

Ein Vergleich der Lokalisierungseigenschaften zwischen wechselwirkendem und nichtwechselwirkendem System ist zunächst nicht möglich, da Lokalisierungsmaße von Einteilchenzuständen im Vielteilchenfall nicht definiert sind. Es wird deshalb nach Untersuchung verschiedener Möglichkeiten die Rückkehrwahrscheinlichkeit für Einteilchenanregungen eingeführt. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß ein an einem bestimmten Platz in das System injiziertes Teilchen oder Loch nach unendlicher Zeit wieder auf diesen Platz zurückkehrt. Alle Ausdrücke mit Rückkehrwahrscheinlichkeiten gehen im Grenzfall des nichtwechselwirkenden Systems in die entsprechenden Ausdrücke mit inversen Partizipationszahlen über. Der Vergleich der exakten Rückkehrwahrscheinlichkeiten mit den inversen HF-Partizipationszahlen des entsprechenden Systems zeigt, daß die HF-Näherung die Rückkehrwahrscheinlichkeit überschätzt, nur sehr wenig bei ϵ_F , zu den Bandkanten immer stärker. Vergleicht man die Rückkehrwahrscheinlichkeiten bei ϵ_F mit den inversen Partizipationszahlen des nichtwechselwirkenden Systems, ergibt sich für mittlere und große Transfermatrizelemente eine größere Rückkehrwahrscheinlichkeit als beim nichtwechselwirkenden System, für kleine Transfermatrizelemente dagegen eine gleiche oder möglicherweise eine kleinere.

Der HF-Gleichstromleitwert ist immer deutlich kleiner als in der exakten Lösung. Die Abweichung ist dabei für starke Unordnung am größten und nimmt mit sinkender Unordnung ab. Das läßt sich mit einer Argumentation aus dem klassischen Grenzfall verstehen, die zeigt, daß die HF-Näherung zu einer zusätzlichen Lücke in der Teilchen-Loch-Anregungszustandsdichte führt, die sich mit abnehmender Unordnung schließt. Wegen der sehr guten Näherung der HF-Einteilchenzustandsdichte kann diese Argumentation auch auf den Bereich endlicher Transfermatrizelemente erweitert werden. Vergleicht man mit dem nichtwechselwirkenden System, führt die Wechselwirkung bei schwacher Unordnung zu einer Verringerung des Transportes und bei großer Unordnung zu einer Erhöhung des Transportes.

Die Projektion der exakten Zustände auf eine Basis aus den energetisch geordneten HF-Slaterzuständen zeigt, daß niederenergetische exakte Zustände bereits durch die Überlagerung weniger niederenergetischer HF-Slaterzustände beschrieben werden können und weist damit einen Weg zur neuen HFD-Näherung, die die Behandlung wesentlich größerer Systeme erlaubt.

Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung: Idee der HFD ist, das exakte Problem in einer Basis aus den niederenergetischen HF-Slaterzuständen desselben Systems zu diagonalisieren. Die Konvergenz von Grundzustandsenergie, Energie der angeregten Zustände, Einteilchenzustandsdichte, Rückkehrwahrscheinlichkeit und Leitwert mit wachsender Basisgröße wird untersucht. Alle Größen konvergieren umso langsamer, je schlechter sie von den HF-Resultaten genähert werden. Die Konvergenz ist damit generell für kleine und sehr große Transfermatrizelemente schneller als für mittlere. Die Rückkehrwahrscheinlichkeit konvergiert bei ϵ_F schneller als weiter im Band, angeregte Zustände und Energien der angeregten Zustände konvergieren umso langsamer, je höherenergetischer sie sind. Am langsamsten konvergiert der Leitwert.

Die Optimierung technischer Details wird diskutiert. Die Konvergenz der HFD-Ergebnisse für die betrachteten Systemgrößen wird nachgewiesen.

Schließlich werden auch verschiedene Wechselwirkungsstärken untersucht. Die Resultate aus dem zweiten Teil bestätigen sich: Für genügend starke Unordnung induziert Wechselwirkung eine stärkere Delokalisierung, für genügend kleine Unordnung eine stärkere Lokalisierung.

Anhang 1: Physikalische Größen

A Einteilchenzustandsdichte

Im klassischen Coulombglas mit N Teilchen, g Gitterplätzen und der Kompensation K kann man die Energie eines Loches im Grundzustand am Platz i dadurch erhalten, daß man ein Loch an diesem Platz erzeugt, die Gesamtenergie des neuen Systems mit $N - 1$ Teilchen (aber gleichem K) berechnet und von der alten Gesamtenergie abzieht:

$$\epsilon_i = E_0^N(\text{Teilchen bei } i) - E_i^{N-1}(\text{Loch bei } i).$$

Analog ergibt sich die Energie eines Teilchens am Platz j , wenn man ein Teilchen am Platz j erzeugt und wieder die Differenz der Gesamtenergien vom System mit $N+1$ und N Teilchen bildet:

$$\epsilon_j = E_j^{N+1}(\text{Teilchen bei } j) - E_0^N(\text{Loch bei } j).$$

Führt man das für alle besetzten Plätze i und leeren Plätze j aus und bildet die Wahrscheinlichkeitsverteilung, so erhält man die Einteilchenzustandsdichte $g(\epsilon)$:

$$g(\epsilon) = \frac{1}{g} \left[\sum_j \delta(E_j^{N+1} - E_0^N - \epsilon) + \sum_i \delta(E_0^N - E_i^{N-1} - \epsilon) \right].$$

Gemäß der üblichen Konvention bezeichnet man dabei den ersten Teil (bei Energien $\epsilon > \epsilon_F$) als Teilchenbeitrag und den zweiten Teil (bei Energien $\epsilon < \epsilon_F$) als Lochbeitrag.

Die Beziehung ist in dieser Form auf quantenmechanische Vielteilchensysteme nicht anwendbar: Es ist dort i.a. weder möglich, leere und besetzte Plätze anzugeben, noch machen die Energien E_i^{N-1} bzw. E_j^{N+1} einen Sinn, da nach der Erzeugung oder Vernichtung eines Teilchens an einem bestimmten Platz das System nicht mehr in einem Eigenzustand ist. Es ist jedoch möglich, die klassische Formel so umzuschreiben, daß sie auch auf quantenmechanische Vielteilchensysteme anwendbar wird:

$\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_i$ seien Erzeuger bzw. Vernichter am Platz i in der Platz-Basis, $|\psi_0^N\rangle$ sei der Vielteilchengrundzustand des Systems mit N Teilchen, und $|\psi_\lambda^{N+1}\rangle, |\psi_\lambda^{N-1}\rangle$ seien λ te angeregte Vielteilchenzustände des Systems mit $N + 1$ bzw. $N - 1$ Teilchen.

Man kann jetzt die Summen über die unbesetzten Plätze j des Systems mit N Teilchen durch eine Summe über alle Plätze i und alle Vielteilchenzustände λ des Systems mit $N + 1$ Teilchen ersetzen, jeweils gewichtet mit dem Anteil $|\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^2$, den ein Zustand $\hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle$ mit einem zusätzlichen Teilchen bei i am λ ten angeregten Zustand des Systems mit $N + 1$ Teilchen hat.

(Dieser Anteil ist im Klassischen gleich Eins für alle Plätze j des Systems mit N Teilchen,

auf denen sich noch kein Teilchen befindet, und für alle Zustände λ des Systems mit $N + 1$ Teilchen, die bis auf ein zusätzliches Teilchen am Platz j mit dem System mit N Teilchen übereinstimmen. Für alle anderen i und λ ist er Null).

Analog kann mit der Summe über die besetzten Plätze i des Systems mit N Teilchen verfahren werden, und man erhält für die Zustandsdichte:

$$\begin{aligned} g(\epsilon) &= \frac{1}{g} \sum_i^g \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^2 \delta(E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \epsilon) \\ &+ \frac{1}{g} \sum_i^g \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle|^2 \delta(E_0^N - E_\lambda^{N-1} - \epsilon). \end{aligned}$$

Diese Beziehung ist auf beliebige quantenmechanische Vielteilchenzustände anwendbar. Der einzige Unterschied zu klassischen Systemen ist, daß die Anteile der Zustände $\hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle$ bzw. $\hat{c}_i | \psi_0^N \rangle$ an den Zuständen $|\psi_\lambda^{N+1}\rangle$ bzw. $|\psi_\lambda^{N-1}\rangle$ der Systeme mit $N + 1$ bzw. $N - 1$ Teilchen nicht mehr nur Eins oder Null sind, sondern jeden beliebigen Wert zwischen -1 und $+1$ annehmen können.

Die so definierte Zustandsdichte kann auch durch die retardierte zeitliche Einteilchengreensfunktion $G^R(i, t; i, t') = -i\theta(t - t') \langle \psi_0^N | [\hat{c}_i(t), \hat{c}_i^\dagger(t')]_+ | \psi_0^N \rangle$ und ihre Fouriertransformierte

$$G_{ii}^R(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega(t-t')} G^R(i, t; i, t') d(t - t')$$

ausgedrückt werden:

$$G_{ii}^R(\omega) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') \theta(t - t') e^{i\omega(t-t')} \langle \psi_0^N | [\hat{c}_i(t), \hat{c}_i^\dagger(t')]_+ | \psi_0^N \rangle. \quad (\text{A.1})$$

Einschieben einer vollständigen Basis ergibt

$$\begin{aligned} G_{ii}^R(\omega) &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') \theta(t - t') e^{i\omega(t-t')} \\ &\left(\sum_\lambda \langle \psi_0^N | \hat{c}_i(t) | \psi_\lambda^{N+1} \rangle \langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger(t') | \psi_0^N \rangle + \sum_\lambda \langle \psi_0^N | \hat{c}_i^\dagger(t') | \psi_\lambda^{N-1} \rangle \langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i(t) | \psi_0^N \rangle \right). \end{aligned}$$

Drückt man nun mittels $\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}(0) \hat{U}(t)$ und $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}$ die Erzeuger und Vernichter zur Zeit t bzw. t' durch die Erzeuger und Vernichter zur Zeit $t = 0$ aus, folgt

$$\begin{aligned} G_{ii}^R(\omega) &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') \theta(t - t') e^{i\omega(t-t')} \\ &\left(\sum_\lambda \langle \psi_0^N | e^{i\hat{H}t} \hat{c}_i(0) e^{-i\hat{H}t} | \psi_\lambda^{N+1} \rangle \langle \psi_\lambda^{N+1} | e^{i\hat{H}t'} \hat{c}_i^\dagger(0) e^{-i\hat{H}t'} | \psi_0^N \rangle \right. \\ &\left. + \sum_\lambda \langle \psi_0^N | e^{i\hat{H}t'} \hat{c}_i^\dagger(0) e^{-i\hat{H}t'} | \psi_\lambda^{N-1} \rangle \langle \psi_\lambda^{N-1} | e^{i\hat{H}t} \hat{c}_i(0) e^{-i\hat{H}t} | \psi_0^N \rangle \right) \\ &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') \theta(t - t') e^{i\omega(t-t')} \\ &\left(\sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger(0) | \psi_0^N \rangle|^2 e^{iE_0^N t} e^{-iE_\lambda^{N+1} t} e^{iE_\lambda^{N+1} t'} e^{-iE_0^N t'} \right. \\ &\left. + \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i(0) | \psi_0^N \rangle|^2 e^{iE_0^N t'} e^{-iE_\lambda^{N-1} t'} e^{iE_\lambda^{N-1} t} e^{-iE_0^N t} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\lambda} -i \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \theta(t-t') e^{i(t'-t)(E_{\lambda}^{N+1}-E_0^N-\omega)} |\langle \psi_{\lambda}^{N+1} | \hat{c}_i^{\dagger}(0) | \psi_0^N \rangle|^2 \\
&\quad + \sum_{\lambda} -i \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \theta(t-t') e^{i(t'-t)(E_0^N-E_{\lambda}^{N-1}-\omega)} |\langle \psi_{\lambda}^{N-1} | \hat{c}_i(0) | \psi_0^N \rangle|^2 .
\end{aligned}$$

Mit $t'' = t' - t$ wird das zu

$$\begin{aligned}
G_{ii}^R(\omega) &= \sum_{\lambda} -i \int_{-\infty}^{+\infty} d(t'') \theta(-t'') e^{i(t'')(E_{\lambda}^{N+1}-E_0^N-\omega)} |\langle \psi_{\lambda}^{N+1} | \hat{c}_i^{\dagger}(0) | \psi_0^N \rangle|^2 \\
&\quad + \sum_{\lambda} -i \int_{-\infty}^{+\infty} d(t'') \theta(-t'') e^{i(t'')(E_0^N-E_{\lambda}^{N-1}-\omega)} |\langle \psi_{\lambda}^{N-1} | \hat{c}_i(0) | \psi_0^N \rangle|^2 .
\end{aligned}$$

Wendet man jetzt die Identität ¹³

$$-i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \theta(\pm t) e^{it(\omega-\bar{\omega})} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \pm \frac{1}{\omega - \bar{\omega} \pm i\delta} \quad (\text{A.2})$$

auf diese Beziehung an, ergibt sich

$$G_{ii}^R(\omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\lambda} \frac{-|\langle \psi_{\lambda}^{N+1} | \hat{c}_i^{\dagger}(0) | \psi_0^N \rangle|^2}{E_{\lambda}^{N+1} - E_0^N - \omega - i\delta} + \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_{\lambda} \frac{-|\langle \psi_{\lambda}^{N-1} | \hat{c}_i(0) | \psi_0^N \rangle|^2}{E_0^N - E_{\lambda}^{N-1} - \omega - i\delta} . \quad (\text{A.3})$$

Mit Hilfe einer weiteren Identität

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\omega \pm i\delta} = \mp i\pi\delta(\omega) + P\left(\frac{1}{\omega}\right) \quad (\text{A.4})$$

wird das schließlich zu

$$\begin{aligned}
\Im G_{ii}^R(\omega) &= -\pi \sum_{\lambda} |\langle \psi_{\lambda}^{N+1} | \hat{c}_i^{\dagger}(0) | \psi_0^N \rangle|^2 \delta(E_{\lambda}^{N+1} - E_0^N - \omega) \\
&\quad -\pi \sum_{\lambda} |\langle \psi_{\lambda}^{N-1} | \hat{c}_i(0) | \psi_0^N \rangle|^2 \delta(E_0^N - E_{\lambda}^{N-1} - \omega) .
\end{aligned}$$

¹³Mit

$$\theta(\pm t) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{\mp ixt}}{x + i\delta}$$

gilt:

$$-i \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(\pm t) e^{i(\omega-\bar{\omega})t} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{i(\omega-\bar{\omega})t} e^{\mp ixt}}{x + i\delta} .$$

Wegen

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega-\bar{\omega} \mp x)t} = \delta(\omega - \bar{\omega} \mp x)$$

wird das zu

$$\begin{aligned}
-i \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(\pm t) e^{i(\omega-\bar{\omega})t} &= \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\delta(\omega - \bar{\omega} \mp x)}{x + i\delta} \\
&= \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\pm 1}{(\omega - \bar{\omega} \pm i\delta)} .
\end{aligned}$$

Also kann man die Einteilchenzustandsdichte auch als

$$g(\epsilon) = -\frac{1}{g} \frac{1}{\pi} \Im \text{Sp } G_{ii}^R(\epsilon)$$

verstehen, wenn die Spur die Summe über alle Plätze i des Systems ist.

Schließlich soll noch der Übergang zum wechselwirkungsfreien Fall betrachtet werden. Für den wechselwirkungsfreien Fall können die Vielteilchenzustände eines Quantensystems aus Einteilchenzuständen zusammengesetzt werden. Mit \hat{b}_μ^\dagger als Erzeuger eines Einteilchenzustandes, der mit dem Erzeuger in der Platz-Basis \hat{c}_i^\dagger über $\hat{c}_i^\dagger = \sum_\mu k_{i\mu} \hat{b}_\mu^\dagger$ zusammenhängt, sowie

$$|\psi_0^N\rangle = \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger |0\rangle; \quad |\psi_\lambda^{N+1}\rangle = \hat{b}_{\lambda_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\lambda_N}^\dagger \hat{b}_\nu^\dagger |0\rangle; \quad |\psi_\lambda^{N-1}\rangle = \hat{b}_{\lambda_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\lambda_{N-1}}^\dagger |0\rangle$$

bzw.

$$E_0^N = \epsilon_1 + \dots + \epsilon_N; \quad E_\lambda^{N+1} = \epsilon_{\lambda_1} + \dots + \epsilon_{\lambda_N} + \epsilon_\nu; \quad E_\lambda^{N-1} = \epsilon_{\lambda_1} + \dots + \epsilon_{\lambda_{N-1}}$$

ergibt sich:

$$\begin{aligned} g(\epsilon) &= \frac{1}{g} \sum_i^g \sum_\lambda \left| \sum_\mu k_{i\mu} \langle 0 | \hat{b}_\nu \hat{b}_{\lambda_N} \dots \hat{b}_{\lambda_1} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle \right|^2 \delta(E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \epsilon) \\ &+ \frac{1}{g} \sum_i^g \sum_\lambda \left| \sum_\mu k_{i\mu} \langle 0 | \hat{b}_{\lambda_{N-1}} \dots \hat{b}_{\lambda_1} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle \right|^2 \delta(E_0^N - E_\lambda^{N-1} - \epsilon). \end{aligned}$$

Nun ist aber

$$\langle 0 | \hat{b}_\nu \hat{b}_{\lambda_N} \dots \hat{b}_{\lambda_1} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle = \begin{cases} 0 & \text{für } \lambda_1 \dots \lambda_N \neq 1 \dots N \\ \pm 1 & \text{für } \lambda_1 \dots \lambda_N = 1 \dots N \text{ und } \mu = \nu \end{cases} \epsilon(N+1, g). \quad (\text{A.5})$$

Die Summe über λ für den Teilchenanteil geht damit über in eine Summe über alle die Zustände ν des Systems mit $N+1$ Teilchen, für die genau $\lambda_1 \dots \lambda_N = 1 \dots N$ und $\mu = \nu \in (N+1, g)$ gilt. Der Energieterm für diese Zustände wird zu

$$E_\nu^{N+1} - E_0^N = \epsilon_1 + \dots + \epsilon_N + \epsilon_\nu - (\epsilon_1 + \dots + \epsilon_N) = \epsilon_\nu.$$

Insgesamt ergibt sich also für den Teilchenanteil $g(\epsilon)_T$

$$g(\epsilon)_T = \frac{1}{g} \sum_{\nu=N+1}^g \sum_i |k_{i\nu}|^2 \delta(\epsilon_\nu - \epsilon).$$

Analoge Überlegungen für den Lochanteil $g(\epsilon)_L$ liefern

$$g(\epsilon)_L = \frac{1}{g} \sum_{\nu=1}^N \sum_i |k_{i\nu}|^2 \delta(\epsilon_\nu - \epsilon),$$

so daß man mit $\sum_i k_{i\mu}^2 = 1$ den bekannten Ausdruck

$$g(\epsilon) = \frac{1}{g} \sum_{\nu=1}^g \delta(\epsilon_\nu - \epsilon),$$

für die Einteilchenzustandsdichte eines wechselwirkungsfreien Vielteilchensystems erhält.

B Rückkehrwahrscheinlichkeit

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, ein zur Zeit $t = 0$ am Platz i erzeugtes Teilchen im Vielteilchensystem zur Zeit t am Platz j vorzufinden, ist

$$A(j, t; i, 0)_T = \langle \psi_0^N | \hat{c}_j(t) \hat{c}_i^\dagger(0) | \psi_0^N \rangle .$$

Analog ist die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, ein zur Zeit $t = 0$ am Platz i erzeugtes Loch zur Zeit t am Platz j vorzufinden,

$$A(j, t; i, 0)_L = \langle \psi_0^N | \hat{c}_j^\dagger(t) \hat{c}_i(0) | \psi_0^N \rangle .$$

Da wir uns später nur für $|A|^2$ interessieren werden, kann man die Zeiten t und 0 auch vertauschen. Setzt man nun $i = j$, so kann man für die zeitabhängige Rückkehrwahrscheinlichkeit eines Quasiteilchens im Fermionen-Vielteilchensystem schreiben:

$$R(i, t) = |\langle \psi_0^N | [\hat{c}_i^\dagger(t), \hat{c}_i(0)]_+ | \psi_0^N \rangle|^2 .$$

Die Langzeitrückkehrwahrscheinlichkeit ergibt sich damit zu:¹⁴

$$\begin{aligned} R(i) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^\infty e^{-\frac{t}{T}} R(i, t) dt \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^\infty e^{-\frac{t}{T}} |\langle \psi_0^N | [\hat{c}_i^\dagger(t), \hat{c}_i(0)]_+ | \psi_0^N \rangle|^2 dt . \end{aligned}$$

Die über alle Plätze gemittelte Rückkehrwahrscheinlichkeit erhält man dann als:

$$R_p = \frac{1}{g} \sum_i \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^\infty e^{-\frac{t}{T}} |\langle \psi_0^N | [\hat{c}_i^\dagger(t), \hat{c}_i(0)]_+ | \psi_0^N \rangle|^2 dt .$$

Analog zu den Rechnungen bei der Einteilchenzustandsdichte kann man das in einen Ausdruck mit Erzeugern und Vernichtern zur Zeit $t = 0$ und den Eigenwerten und Eigenfunktionen eines Systems mit $N + 1$ und $N - 1$ Teilchen umformen. Wir führen diese Umformung hier für den Teilchenanteil $R_{p \ T}$ vor:

$$\begin{aligned} R_{p \ T} &= \frac{1}{g} \sum_i \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^\infty e^{-\frac{t}{T}} |\langle \psi_0^N | \hat{c}_i(t) \hat{c}_i^\dagger(0) | \psi_0^N \rangle|^2 dt \\ &= \frac{1}{g} \sum_i \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^\infty e^{-\frac{t}{T}} \left| \sum_\lambda e^{-i(E_\lambda^{N+1} - E_0^N)t} |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^2 \right|^2 dt \\ &= \frac{1}{g} \sum_i \sum_\lambda \sum_{\lambda'} |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^2 |\langle \psi_{\lambda'}^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^2 \\ &\quad \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^\infty e^{-\frac{t}{T}} e^{-i(E_\lambda^{N+1} - E_{\lambda'}^{N+1})t} dt . \end{aligned}$$

Der Grenzwert des Integralausdrucks liefert:

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^\infty e^{-\frac{t}{T}} e^{-i(E_\lambda^{N+1} - E_{\lambda'}^{N+1})t} dt &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \frac{1}{i(E_\lambda^{N+1} - E_{\lambda'}^{N+1}) + \frac{1}{T}} \\ &= \begin{cases} \lambda \neq \lambda' : \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T a + 1} = 0 \\ \lambda = \lambda' : \frac{1/T}{1/T} = 1 \end{cases} . \end{aligned}$$

¹⁴Aus Gründen der einfacheren Handhabung wählen wir anstelle eines „harten“ Abschneidens von $R(i, t)$ bei $t = T$ ein „weiches“ Abschneiden mit dem Exponentialfaktor $e^{-\frac{t}{T}}$, was im Grenzfall $T \rightarrow \infty$ dasselbe ist.

Zusammen mit dem Lochanteil ergibt sich somit für die Rückkehrwahrscheinlichkeit

$$R_p = \frac{1}{g} \sum_i \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^4 + \frac{1}{g} \sum_i \sum_\lambda |\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle|^4 .$$

Zerlegt man R_p bezüglich der Energien der beteiligten Zustände und teilt durch die Einteilchendichtezustände $g(\epsilon)$, so erhält man die energieaufgelöste Rückkehrwahrscheinlichkeit:

$$\begin{aligned} R_p(\epsilon) &= \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \sum_i \sum_\lambda \left| \langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle \right|^4 \delta(E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \epsilon) \\ &\quad + \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \sum_i \sum_\lambda \left| \langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle \right|^4 \delta(E_0^N - E_\lambda^{N-1} - \epsilon) . \end{aligned}$$

Diese Größe gibt dabei nicht etwa die Rückkehrwahrscheinlichkeit eines Quasiteilchens mit der Energie ϵ an (das ist kein wohldefinierter Begriff, denn ein Quasiteilchen hat entweder eine feste Energie oder einen definierten Platz, an dem es erzeugt wird), sondern die Beiträge zur mittleren Rückkehrwahrscheinlichkeit von den Zuständen mit verschiedenen Energien.

Auch die Rückkehrwahrscheinlichkeit kann man mit Hilfe von Greensfunktionen angeben. Die fouriertransformierte retardierte Einteilchengreensfunktion (A.3) und die entsprechende avancierte Einteilchengreensfunktion

$$G_{ii}^A(\omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_\lambda \frac{-|\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger(0) | \psi_0^N \rangle|^2}{E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \omega + i\delta} + \lim_{\delta \rightarrow 0} \sum_\lambda \frac{-|\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i(0) | \psi_0^N \rangle|^2}{E_0^N - E_\lambda^{N-1} - \omega + i\delta} .$$

kann man zu einer komplexen Einteilchengreensfunktion $G_{ii}(\bar{\omega})$ ($\bar{\omega}$ komplex) verallgemeinern:

$$G_{ii}(\bar{\omega}) = \sum_\lambda \frac{-|\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger(0) | \psi_0^N \rangle|^2}{E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \bar{\omega}} + \sum_\lambda \frac{-|\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i(0) | \psi_0^N \rangle|^2}{E_0^N - E_\lambda^{N-1} - \bar{\omega}} ,$$

wobei jetzt

$$G_{ii}^R(\omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0} G_{ii}(\omega + i\delta) \quad ; \quad G_{ii}^A(\omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0} G_{ii}(\omega - i\delta)$$

ist.

Wenn wir jetzt

$$\begin{aligned} &\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta \left(\frac{1}{E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \omega + i\delta} \frac{1}{E_{\lambda'}^{N+1} - E_0^N - \omega - i\delta} \right) \\ &= \pi \delta(E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \omega) \delta_{\lambda\lambda'} + \text{diskrete endl. Beiträge} \end{aligned}$$

¹⁵ bzw. analog

$$\begin{aligned} &\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta \left(\frac{1}{E_0^N - E_\lambda^{N-1} - \omega + i\delta} \frac{1}{E_0^N - E_{\lambda'}^{N-1} - \omega - i\delta} \right) \\ &= \pi \delta(E_0^N - E_\lambda^{N-1} - \omega) \delta_{\lambda\lambda'} + \text{diskrete endl. Beiträge} \end{aligned}$$

¹⁵Für $\lambda \neq \lambda'$ ergeben sich immer diskrete endliche Beiträge; für $\lambda = \lambda'$ erhält man

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\delta}{(E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \omega)^2 + \delta^2} = \pi \delta(E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \omega) .$$

sowie

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \delta \left(\frac{1}{E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \omega + i\delta} \frac{1}{E_0^N - E_{\lambda'}^{N-1} - \omega - i\delta} \right) \\ = \text{diskrete endl. Beiträge}$$

beachten, sehen wir, daß wir die energieaufgelöste Rückkehrwahrscheinlichkeit $R_p(\epsilon)$ (bis auf diskrete endliche Beiträge, die bei der Integration über $d\epsilon$ zu R_p verschwinden) auch als

$$R_p(\epsilon) = \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \lim_{\delta \rightarrow \infty} \frac{\delta}{\pi} \sum_i^g G_{ii}(\omega - i\delta) G_{ii}(\omega + i\delta)$$

schreiben können.

Schließlich sei auch hier noch der Fall eines wechselwirkungsfreien Vielteilchensystems betrachtet. Mit denselben Bezeichnungen wie bei der Zustandsdichte erhalten wir für die energieaufgelöste Rückkehrwahrscheinlichkeit nun:

$$R_p(\epsilon) = \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \sum_i^g \sum_\lambda | \sum_\mu k_{i\mu} \langle 0 | \hat{b}_\nu \hat{b}_{\lambda_N} \dots \hat{b}_{\lambda_1} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle |^4 \delta(E_\lambda^{N+1} - E_0^N - \epsilon) \\ + \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \sum_i^g \sum_\lambda | \sum_\mu k_{i\mu} \langle 0 | \hat{b}_{\lambda_{N-1}} \dots \hat{b}_{\lambda_1} \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_1^\dagger \dots \hat{b}_N^\dagger | 0 \rangle |^4 \delta(E_0^N - E_\lambda^{N-1} - \epsilon).$$

Wieder gilt (A.5), und wir können auch in diesem Fall die Summe über alle Zustände des Systems mit $N+1$ Teilchen durch eine Summe über die Zustände ν des Systems mit $N+1$ Teilchen, für die genau $\lambda_1 \dots \lambda_N = 1 \dots N$ und $\mu = \nu$ $\epsilon(N+1, g)$ gilt, ersetzen. Führen wir dieselben Betrachtungen auch für den Lochanteil aus, erhalten wir:

$$R_p(\epsilon) = \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \sum_{\nu=N+1}^g \sum_i |k_{i\nu}|^4 \delta(\epsilon_\nu - \epsilon) + \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \sum_{\nu=1}^N \sum_i |k_{i\nu}|^4 \delta(\epsilon_\nu - \epsilon) \\ = \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \sum_{\nu=1}^g \sum_i |k_{i\nu}|^4 \delta(\epsilon_\nu - \epsilon).$$

Nun ist

$$R_p = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\epsilon) R_p(\epsilon) d\epsilon = \frac{1}{g} \sum_{\nu=1}^g \sum_i |k_{i\nu}|^4.$$

Andererseits gilt für die mittlere inverse Partizipationszahl der Einteilchenzustände in bezug auf eine Platz-Basis, die die Verteilung der Einteilchenwellenfunktionen auf der Platz-Basis über alle Zustände gemittelt angibt:

$$P^{-1} = \frac{1}{g} \sum_{\nu=1}^g P_\nu^{-1} = \frac{1}{g} \sum_{\nu=1}^g \sum_i |k_{i\nu}|^4,$$

so daß man im Einteilchenfall sagen kann:

$$P^{-1} = R_p,$$

sowie, mit

$$P^{-1}(\epsilon) = \frac{1}{g(\epsilon)} \frac{1}{g} \sum_\nu P^{-1} \delta(\epsilon - \epsilon_\nu),$$

auch

$$P^{-1}(\epsilon) = R_p(\epsilon).$$

D.h., alle Ausdrücke mit Rückkehrwahrscheinlichkeiten gehen im wechselwirkungsfreien Fall in die entsprechenden Ausdrücke für die inversen Partizipationszahlen in bezug auf eine Ortsbasis über.

C: Leitwert

1. Kubo-Formalismus

Zur Berechnung des Leitwertes müssen wir uns zuerst den Stromoperator für unser spezielles System verschaffen. Aus der Kontinuitätsgleichung $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla j = 0$ folgt mit $\hat{\rho}_i = e \hat{n}_i$ und $i \frac{d\hat{A}}{dt} = [\hat{A}, \hat{H}]_-$ für Strom- und Teilchenzahloperator am Gitterpunkt i :

$$\frac{\partial \hat{\rho}_i}{\partial t} + \nabla \hat{j}_i = e \frac{d\hat{n}_i}{dt} + \nabla \hat{j}_i = e (-i)[\hat{n}_i, \hat{H}]_- + \nabla \hat{j}_i = 0 .$$

Von der Vertauschung $[\hat{n}_i, \hat{H}]_-$ mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,k \rangle} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k + \sum_i \hat{n}_i \phi_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \sum_{r_{ik}} \frac{(\hat{n}_i - K)(\hat{n}_k - K)}{r_{ik}}$$

bleibt wegen $[\hat{n}_i, \hat{n}_k]_- = 0$ nur eine Vertauschung mit dem kinetischen Anteil:

$$[\hat{n}_i, \hat{H}]_- = -t \sum_{\langle l,k \rangle} [\hat{c}_l^\dagger \hat{c}_i, \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_k]_- ,$$

was weiter liefert:

$$-t \sum_{\langle l,k \rangle} [\hat{c}_l^\dagger \hat{c}_i, \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_k]_- = \begin{cases} 0 & \text{für } k \neq i \neq l \\ -t(\sum_{\langle i,k \rangle} [\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i, \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k]_- + \sum_{\langle l,i \rangle} [\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i, \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_i]_-) & \end{cases} .$$

Nun haben wir

$$\begin{aligned} [\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i, \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k]_- &= \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k - \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i = \hat{c}_i^\dagger (1 - \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i) \hat{c}_k + \underbrace{\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_i}_0 \\ &= \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k - \underbrace{\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_k}_0 = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \end{aligned}$$

und

$$[\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i, \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_i]_- = -\hat{c}_l^\dagger \hat{c}_i .$$

Wegen der Isotropie des Problems reicht es, nur den Strom in x -Richtung zu betrachten. Damit ergibt sich insgesamt für den Kommutator

$$[\hat{n}_i, \hat{H}]_- = -t[\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i-\xi} + \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+\xi} - (\hat{c}_{i-\xi}^\dagger \hat{c}_i + \hat{c}_{i+\xi}^\dagger \hat{c}_i)] ,$$

wobei ξ der Abstand zweier benachbarter Gitterplätze in x -Richtung ist. Mit

$$\nabla \hat{j}_i^x = \frac{\hat{j}_{i+\xi}^x - \hat{j}_i^x}{\xi}$$

folgt sofort

$$\hat{j}_i^x = \xi e it(\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i-\xi} - \hat{c}_{i-\xi}^\dagger \hat{c}_i) ,$$

was auch anschaulich klar ist: Der Übergang eines Teilchens vom Platz $i - \xi$ nach i liefert einen positiven Beitrag zum Stromoperator in x -Richtung am Punkt i , der Übergang eines Teilchens von i nach $i - \xi$ einen negativen. Der mittlere Strom in x -Richtung, im folgenden kurz Strom genannt, ist damit

$$\hat{j}_x = \frac{1}{g} \sum_i \hat{j}_i^x = i \frac{\xi e t}{g} \sum_i (\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i-\xi} - \hat{c}_{i-\xi}^\dagger \hat{c}_i) ,$$

womit der gesuchte Stromoperator für unser System abgeleitet ist. (Da nur der kinetische Anteil des Hamilton-Operators in dieser Betrachtung eine Rolle gespielt hat, gilt dieser Stromoperator sowohl für das Quanten-Coulomb-Glas als auch für das Anderson-Modell.) Als nächstes müssen wir wissen, wie die Störung des Systems, die den Stromfluß bewirken soll, mit dem Hamilton-Operator \hat{H}_0 des Systems zusammenhängt. Der Einfachheit willen wir hier annehmen, daß der Strom durch ein räumlich konstantes elektrisches Feld $E_x \mathbf{e}_x$ in x -Richtung hervorgerufen wird. Mit $W = \int_C \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$ und $\mathbf{F} = q \mathbf{E}$ gilt für die zusätzliche Energie einer Ladungsverteilung von Punktladungen $e n_i$ an Plätzen x_i

$$W = \sum_i \int_0^{x_i} e n_i E_x \mathbf{e}_x \cdot d\mathbf{x} = E_x e \sum_i n_i \int_0^{x_i} dx = E_x e \sum_i n_i x_i ,$$

also

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W} = \hat{H}_0 + E_x \hat{P}_x .$$

Das elektrische Feld als Störung hängt damit über den Polarisationsoperator

$$\hat{P}_x = e \sum_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i x_i$$

mit dem Hamilton-Operator zusammen.

Im folgenden nutzen wir die in der linearen Antworttheorie abgeleitete Kubo-Formel [K57][G58]: Wenn eine Störung $S(t)$ eines Systems über den Operator \hat{O} an den Hamilton-Operator \hat{H}_0 des ungestörten Systems koppelt, also

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{O}S(t)$$

gilt, dann ergibt sich der Erwartungswert eines beliebigen Operators \hat{A} zur Zeit t zu

$$\langle \hat{A}(t) \rangle = \langle \hat{A} \rangle_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} G^R(\hat{A}, t; \hat{O}, t') S(t') dt' ,$$

wobei $G^R(\hat{A}, t; \hat{O}, t')$ die retardierte Greensche Funktion der Observablen \hat{A} und \hat{O} ist, die sich als

$$G^R(\hat{A}, t; \hat{O}, t') = -i\theta(t - t') \langle [\hat{A}(t), \hat{O}(t')]_- \rangle$$

schreiben läßt.¹⁶ Für unseren speziellen Fall gilt $\langle \hat{j}_x \rangle_0 = 0$, d.h., im ungestörten System fließt kein Strom. Die Kubo-Formel erhält damit für unser Problem die Gestalt

$$\langle \hat{j}_x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} G^R(\hat{j}_x, t; \hat{P}_x, t') E_x(t') dt' .$$

Wir erhalten anstelle der obigen Faltung eine Produktbeziehung zwischen $\langle \hat{j}_x \rangle$ und E_x , wenn wir eine Fouriertransformation vornehmen und in den Frequenzraum übergehen (wegen der Zeitinvarianz können wir dabei die Greensche Funktion $G(\hat{j}_x, t; \hat{P}_x, t')$ als Funktion der Zeitdifferenz $(t - t')$ schreiben):

$$\begin{aligned} \langle \hat{j}_x(\omega) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle \hat{j}_x(t) \rangle dt \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} G^R(\hat{j}_x, \hat{P}_x; t - t') E_x(t') dt dt' . \end{aligned}$$

¹⁶Im Unterschied zur fermionischen Einteilchengreensfunktion (A.1) wird hierbei der Kommutator verwendet.

Mit $t - t' = t''$ wird das zu

$$\begin{aligned}\langle \hat{j}_x(\omega) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t'} E_x(t') dt' \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t''} G^R(\hat{j}_x, \hat{P}_x; t'') dt'' \\ &= E_x(\omega) G^R(\omega),\end{aligned}$$

wobei

$$G^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t-t')} G^R(\hat{j}_x, \hat{P}_x; t-t') d(t-t')$$

die fouriertransformierte retardierte Greensche Funktion von \hat{j}_x und \hat{P}_x ist.

Wir definieren jetzt die Leitfähigkeit als Quotient aus dem Stromerwartungswert und dem angelegten elektrischen Feld:

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{\langle \hat{j}_x(\omega) \rangle}{E_x(\omega)} = G^R(\omega)$$

Man kann nun ohne Einschränkung der Allgemeinheit in der Greensfunktion $t = 0$ setzen und erhält schließlich für die Leitfähigkeit

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}(\omega) &= i \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(-t') \langle [\hat{j}_x(0), \hat{P}_x(t')]_- \rangle e^{-i\omega t'} dt' \\ &= i \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t) \langle [\hat{j}_x(0), \hat{P}_x(-t)]_- \rangle e^{i\omega t} dt.\end{aligned}$$

Die weitere Auswertung dieses Ausdrucks erfolgt unter Benutzung der sogenannten Kubo-Identität¹⁷

$$i[\hat{A}(t), \hat{\rho}] = \hat{\rho} \int_0^\beta \dot{\hat{A}}(t - i\lambda) d\lambda,$$

wobei $\hat{\rho}$ der statistische Operator ist und $\beta = \frac{1}{kT}$. Mit $\langle \hat{A} \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{A})$ folgt für die Leitfähigkeit:

$$\sigma_{xx}(\omega) = i \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t) \text{Sp}(\hat{\rho} [\hat{j}_x(0), \hat{P}_x(-t)]_-) e^{i\omega t} dt,$$

¹⁷Die Kubo-Identität kann man folgendermaßen beweisen:

$$\begin{aligned}\int_0^\beta d\lambda \frac{d}{d\lambda} \hat{A}(t - i\lambda) &= \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda \hat{H}} \frac{d}{d\lambda} \hat{A} e^{-\lambda \hat{H}} \\ &= -i \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda \hat{H}} [\hat{A}(t), \hat{H}]_- e^{-\lambda \hat{H}} \\ &= -i \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda \hat{H}} \{ \hat{A}(t) \hat{H} e^{-\lambda \hat{H}} - \hat{H} \hat{A}(t) e^{-\lambda \hat{H}} + \hat{H} e^{-\lambda \hat{H}} \hat{A}(t) - \hat{H} e^{-\lambda \hat{H}} \hat{A}(t) \} \\ &= i \int_0^\beta d\lambda e^{\lambda \hat{H}} \{ \hat{H} [\hat{A}(t), e^{-\lambda \hat{H}}]_- - [\hat{A}(t), \hat{H} e^{-\lambda \hat{H}}]_- \} \\ &= i \int_0^\beta d\lambda \frac{\delta}{\delta \lambda} \{ e^{\lambda \hat{H}} [\hat{A}(t), e^{-\lambda \hat{H}}]_- \} \\ &= i e^{\beta \hat{H}} [\hat{A}(t), e^{-\beta \hat{H}}]_-,\end{aligned}$$

was mit $\rho = \frac{e^{\beta \hat{H}}}{\text{Sp} e^{-\beta \hat{H}}}$ sofort die Identität liefert.

was unter Anwendung der Invarianz der Spur gegenüber zyklischer Vertauschung,

$$\begin{aligned}
\mathrm{Sp}(\hat{\rho}[\hat{j}_x(0), \hat{P}_x(-t)]_-) &= \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{j}_x(0)\hat{P}_x(-t)) - \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{P}_x(-t)\hat{j}_x(0)) \\
&= \mathrm{Sp}(\hat{P}_x(-t)\hat{\rho}\hat{j}_x(0)) - \mathrm{Sp}(\hat{j}_x(0)\hat{\rho}\hat{P}_x(-t)) \\
&= \mathrm{Sp}(\hat{j}_x(0)\hat{P}_x(-t)\hat{\rho}) - \mathrm{Sp}(\hat{j}_x(0)\hat{\rho}\hat{P}_x(-t)) \\
&= \mathrm{Sp}(\hat{j}_x(0)[\hat{P}_x(-t), \hat{\rho}]_-) ,
\end{aligned}$$

zu

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}(\omega) &= i \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t) \mathrm{Sp}(\hat{j}_x(0)[\hat{P}_x(-t), \hat{\rho}]_-) e^{i\omega t} dt \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t) \int_0^\beta \mathrm{Sp}(\hat{j}_x(0)\hat{\rho}\hat{P}_x(-t-i\lambda)) e^{i\omega t} d\lambda dt \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t) \int_0^\beta \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\hat{P}_x(-t-i\lambda)\hat{j}_x(0)) e^{i\omega t} d\lambda dt \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t) \int_0^\beta \langle \hat{P}_x(-t-i\lambda)\hat{j}_x(0) \rangle e^{i\omega t} d\lambda dt
\end{aligned}$$

wird. Die Zeitableitung des Polarisationsoperators können wir ausrechnen:

$$\begin{aligned}
\dot{\hat{P}}_x &= (-i)[\hat{P}_x, \hat{H}]_- \\
&= (-i) e \sum_l [\hat{n}_l x_l, \hat{H}]_- \\
&= i t e \sum_{\langle i,k \rangle} \sum_l x_l \hat{n}_l \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k - \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \hat{n}_l x_l \\
&= i t e \sum_{\langle i,k \rangle} (x_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i + x_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k) \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k - \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k (x_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i + x_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k) \\
&= i t e \sum_{\langle i,k \rangle} x_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k + \underbrace{x_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k}_0 - \underbrace{x_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i}_0 - x_k \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k \\
&= i t e \sum_{\langle i,k \rangle} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k (x_i - x_k) \\
&= i t e \sum_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i-\xi} (x_i - x_{i-\xi}) + \hat{c}_{i-\xi}^\dagger \hat{c}_i (x_{i-\xi} - x_i) ,
\end{aligned}$$

woraus sofort

$$\dot{\hat{P}}_x = g \hat{j}_x$$

folgt. Insgesamt erhält man also für die Leitfähigkeit

$$\sigma_{xx}(\omega) = g \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t) \int_0^\beta \langle \hat{j}_x(-t-i\lambda)\hat{j}_x(0) \rangle e^{i\omega t} d\lambda dt .$$

Den Übergang zur Spektraldarstellung vollziehen wir für $T=0$, d.h.,

$$\sigma_{xx}(\omega) = g \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t) \int_0^{+\infty} \langle \psi_0^N | \hat{j}_x(-t-i\lambda)\hat{j}_x(0) | \psi_0^N \rangle e^{i\omega t} d\lambda dt ,$$

auf die übliche Weise durch Einschieben einer vollständigen Basis und Anwendung des Zeitentwicklungsoperators:

$$\begin{aligned}
\sigma_{xx}(\omega) &= g \int_{-\infty}^{+\infty} dt \theta(t) \int_0^{+\infty} d\lambda \\
&\quad \sum_{\kappa} \langle \psi_0^N | e^{-i\hat{H}(t+i\lambda)} \hat{j}_x(0) e^{i\hat{H}(t+i\lambda)} | \psi_{\kappa}^N \rangle \langle \psi_{\kappa}^N | \hat{j}_x(0) | \psi_0^N \rangle e^{i\omega t} \\
&= g \sum_{\kappa} \langle \psi_0^N | \hat{j}_x(0) | \psi_{\kappa}^N \rangle \langle \psi_{\kappa}^N | \hat{j}_x(0) | \psi_0^N \rangle \\
&\quad \int_{-\infty}^{+\infty} dt \theta(t) \int_0^{+\infty} d\lambda e^{i(E_{\kappa}^N - E_0^N + \omega)t} e^{-(E_{\kappa}^N - E_0^N)\lambda}.
\end{aligned}$$

Mit ¹⁸

$$\begin{aligned}
&\int_0^{+\infty} e^{-(E_{\kappa}^N - E_0^N)\lambda} d\lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \theta(t) e^{i(E_{\kappa}^N - E_0^N + \omega)t} dt \\
&= \frac{1}{E_{\kappa}^N - E_0^N} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{i}{E_{\kappa}^N - E_0^N + \omega + i\delta} \\
&= \frac{1}{E_{\kappa}^N - E_0^N} \pi \left[\delta(E_{\kappa}^N - E_0^N + \omega) + iP \left(\frac{1}{E_{\kappa}^N - E_0^N + \omega} \right) \right]
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
\langle \psi_0^N | \hat{j}_x(0) | \psi_{\kappa}^N \rangle \langle \psi_{\kappa}^N | \hat{j}_x(0) | \psi_0^N \rangle &= -\frac{\xi^2 e^2 t^2}{g^2} \left(\sum_i \langle \psi_0^N | \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_{i-\xi} - \hat{c}_{i-\xi}^{\dagger} \hat{c}_i | \psi_{\kappa}^N \rangle \right) \\
&\quad \left(\sum_i \langle \psi_{\kappa}^N | \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_{i-\xi} - \hat{c}_{i-\xi}^{\dagger} \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle \right)
\end{aligned}$$

wird das zur Spektraldarstellung für den Realteil der Leitfähigkeit in x -Richtung ¹⁹

$$\Re \sigma_{xx}(\omega) = \sum_{\lambda} \frac{\pi t^2 e^2 \xi^2}{g \omega} \delta(E_{\lambda}^N - E_0^N + \omega) \left(\sum_i \langle \psi_0^N | \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_{i-\xi} | \psi_{\lambda}^N \rangle - \langle \psi_0^N | \hat{c}_{i-\xi}^{\dagger} \hat{c}_i | \psi_{\lambda}^N \rangle \right)^2.$$

Auch hier soll abschließend wieder der Fall wechselwirkungsfreier Teilchen betrachtet werden: Mit den in Teil A eingeführten Bezeichnungen erhält man

$$\begin{aligned}
&\left(\sum_i \langle \psi_0^N | \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_{i-\xi} - \hat{c}_{i-\xi}^{\dagger} \hat{c}_i | \psi_{\lambda}^N \rangle \right)^2 \\
&= \left(\sum_i \sum_{\mu=1}^N \sum_{\nu=N+1}^g (k_{i\mu} k_{i-\xi\nu} - k_{i-\xi\mu} k_{i\nu}) \langle 0 | \hat{b}_N \dots \hat{b}_1 \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\nu} \hat{b}_{\lambda_1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\lambda_N}^{\dagger} | 0 \rangle \right)^2 \\
&= \begin{cases} (\sum_i k_{i\mu} k_{i-\xi\nu} - k_{i-\xi\mu} k_{i\nu})^2, & \text{wenn } |\psi_{\lambda}^N\rangle = \hat{b}_1^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mu-1}^{\dagger} \dots \hat{b}_{\mu+1}^{\dagger} \dots \hat{b}_N^{\dagger} \dots \hat{b}_{\nu}^{\dagger} | 0 \rangle \\ 0 & \text{sonst} \end{cases},
\end{aligned}$$

d.h., die Summe über alle angeregten Zustände des Systems mit N Teilchen $|\psi_{\lambda}^N\rangle$ geht in eine Summe über die angeregten Zustände des Systems mit N Teilchen über, die genau durch eine Teilchen-Loch-Anregung aus dem Grundzustand entstanden sind. Für diese angeregten Zustände gilt aber gerade

$$\begin{aligned}
E_{\lambda}^N - E_0^N &= \epsilon_1 + \dots + \epsilon_{\mu-1} + \epsilon_{\mu+1} + \dots + \epsilon_N + \epsilon_{\nu} - \epsilon_1 - \dots - \epsilon_{\mu} - \dots - \epsilon_N \\
&= \epsilon_{\nu} - \epsilon_{\mu},
\end{aligned}$$

¹⁸Hier haben wir wieder die Identitäten (A.2) und (A.4) aus Teil A verwendet.

¹⁹Der Drude-Peak, der die unendliche Gleichstromleitfähigkeit eines Systems ohne Unordnung wiedergibt, die aus der Möglichkeit einer unbegrenzten Beschleunigung der Elektronen durch das elektrische Feld resultiert, ist in dieser Form der Kubo-Greenwood Formel nicht enthalten. Für alle Systeme mit Unordnung verschwindet er jedoch sowieso.

so daß sich der Realteil der Leitfähigkeit in x -Richtung für nichtwechselwirkende Teilchen insgesamt als

$$\Re\sigma_{xx}(\omega) = \frac{\pi t^2 e^2 \xi^2}{g \omega} \sum_{\mu=1}^N \sum_{\nu=N+1}^g \delta(\epsilon_\nu - \epsilon_\mu + \omega) \left(\sum_i k_{i\mu} k_{i-\xi\nu} - k_{i-\xi\mu} k_{i\nu} \right)^2$$

schreiben läßt. Der Realteil des Leitwerts des Systems in x -Richtung $G_{xx}(\omega)$ ergibt sich aus dem Realteil der Leitfähigkeit $\Re\sigma_{xx}(\omega)$, indem man einfach mit der Querschnittsfläche $L_y L_z$ des Systems senkrecht zur x -Richtung multipliziert und durch die Länge L_x des Systems teilt²⁰:

$$G_{xx}(\omega) = \Re\sigma_{xx}(\omega) \frac{L_y L_z}{L_x} .$$

2. Lorentz-Verbreiterung

Nach unseren obigen Beziehungen besteht der Leitwert eines endlichen Systems aus einer endlichen Anzahl von Deltapeaks bei den Frequenzen, bei denen die Störung $\hbar\omega$ das System genau in einen seiner angeregten Zustände $|\psi_\lambda^N\rangle$ heben kann, gewichtet mit dem Beitrag eines solchen Übergangs zum Stromoperator in x -Richtung. Im realen Experiment hat man es aber nun nicht mit einem isolierten endlichen System zu tun, sondern mit einem System, das über Kontakte an Leiter angekoppelt ist. Wie beeinflusst eine solche Ankopplung das System? Das soll im folgenden grob abgeschätzt werden:

Augenscheinlich ist, daß durch die Ankopplung Teilchen verloren gehen können oder in das System eintreten können. Man kann das im Hamilton-Operator des Systems durch einen imaginären Anteil berücksichtigen, der mit der Verlustrate γ verknüpft ist:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{Sys}} + i \gamma C .$$

Diagonalisiert man diesen Hamilton-Operator, so ergibt sich auch in den Eigenwerten wieder ein imaginärer Anteil, d.h. $E_\lambda^N \rightarrow E_\lambda^N + i \gamma C'$. Der Grenzübergang

$$\Re \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{i}{E_\lambda^N - E_0^N + \omega + i\delta} = \pi \delta(E_\lambda^N - E_0^N + \omega)$$

geht damit in einen Grenzübergang

$$\Re \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{i}{E_\lambda^N - E_0^N + \omega + i(\delta + \gamma C'')} = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma C''}{(\gamma C'')^2 + (E_\lambda^N - E_0^N + \omega)^2}$$

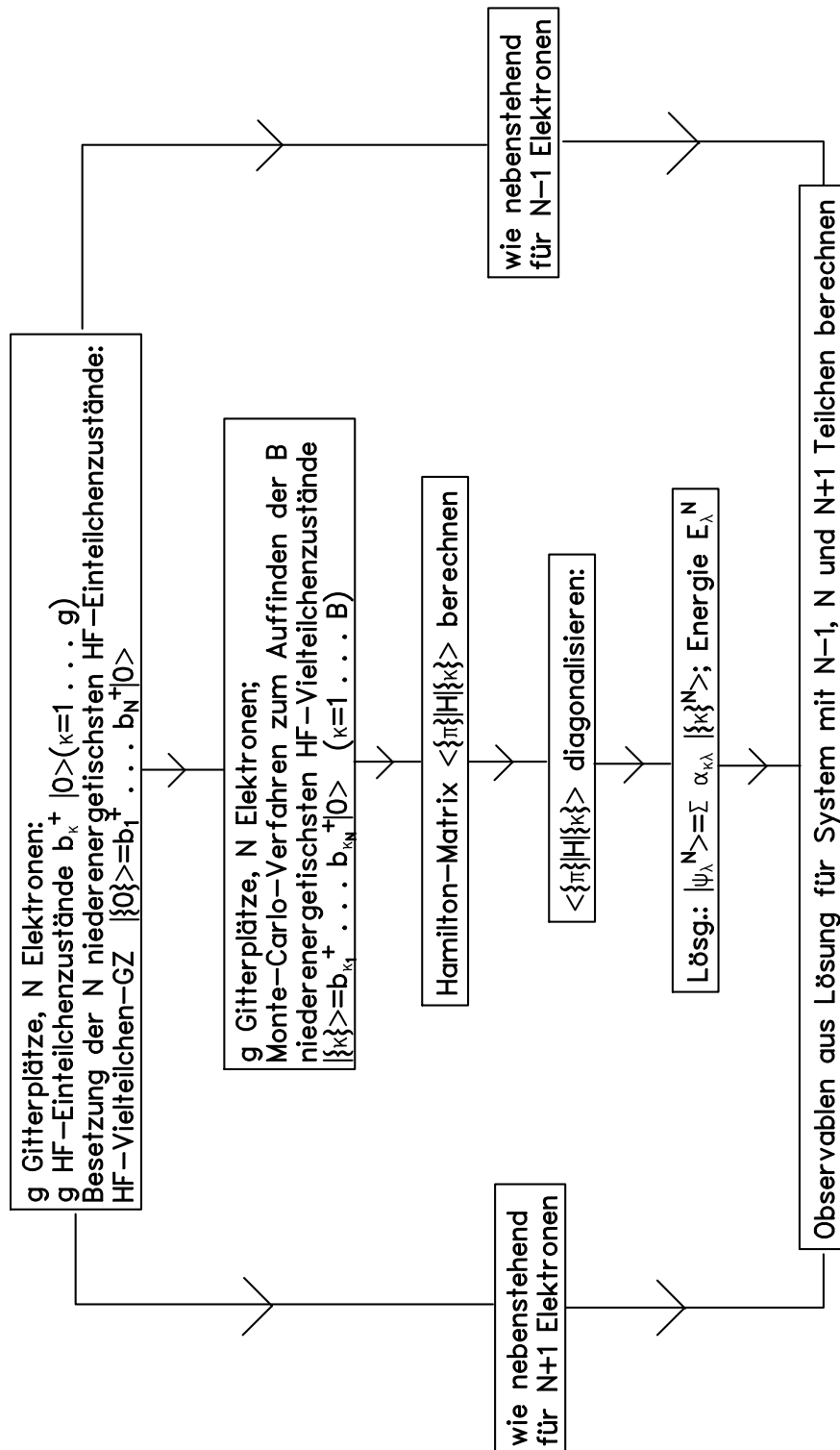
über. Aus der Deltafunktion für die Peakform wird damit eine Lorentzkurve der Breite γ .²¹ Die Verlustrate selbst ist dabei in gröbster Näherung proportional zur Anzahl der Gitterplätze des Systems in der Nähe der Kontakte g_{Kon} , multipliziert mit der mittleren Besetzungszahl dieser Gitterplätze $\langle \bar{n} \rangle$ und geteilt durch die Gesamtzahl der Elektronen N , grob abgeschätzt also

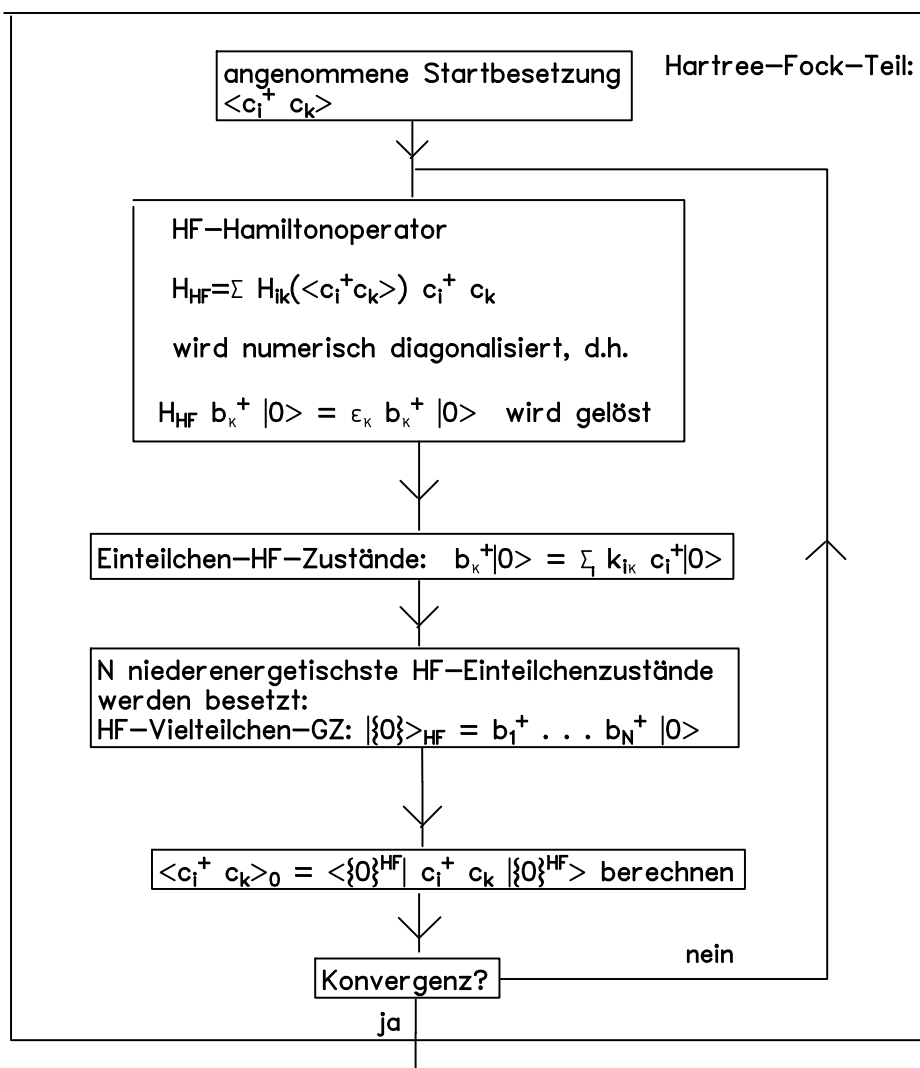
$$\gamma \sim g_{\text{Kon}} \frac{\langle \bar{n} \rangle}{N} \sim \frac{g_{\text{Kon}} N}{g N} \sim \frac{1}{L_x} .$$

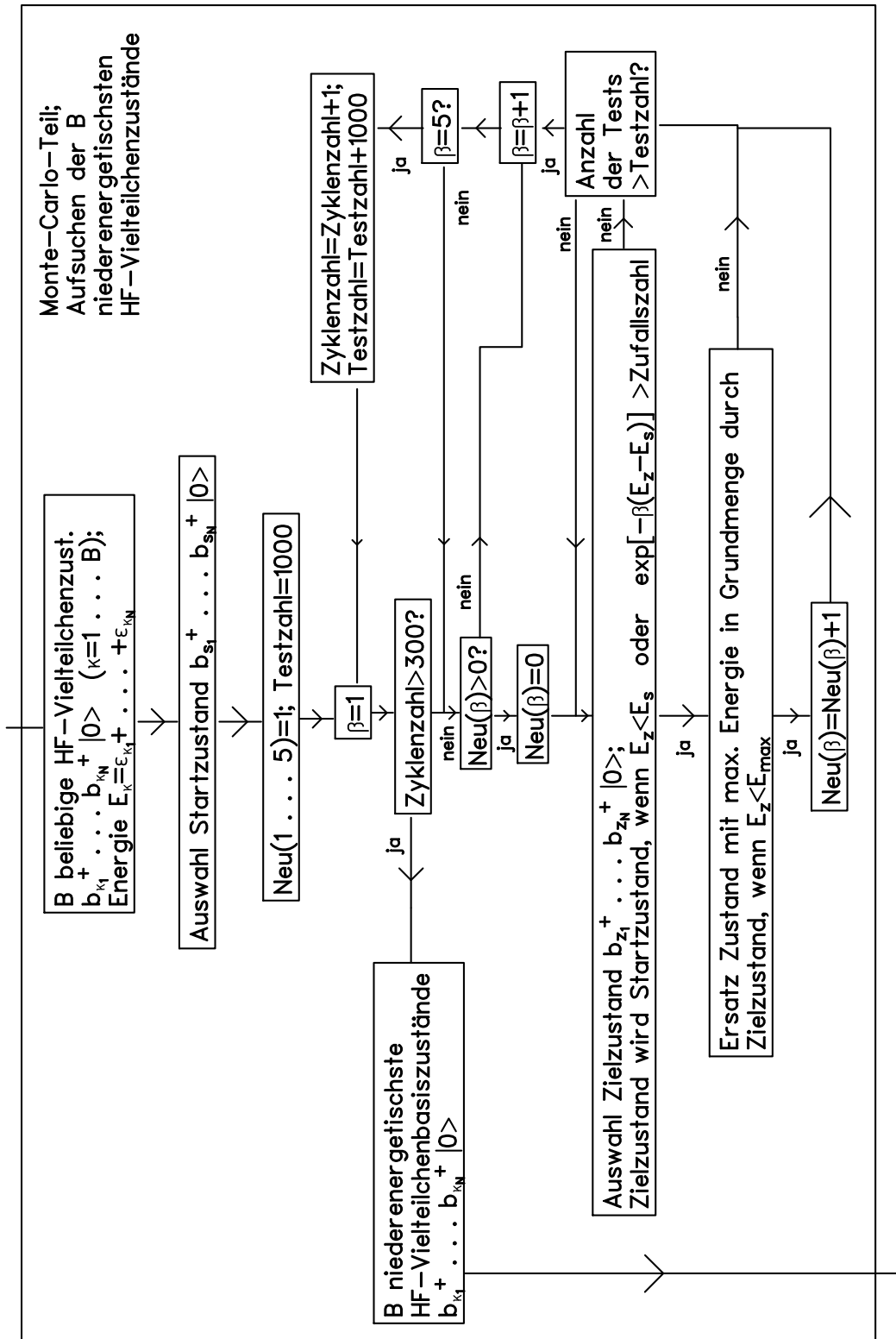
²⁰ Einheit ist $\frac{e^2}{\hbar}$.

²¹ Wir können für $\gamma C''$ einfach γ schreiben, weil die Verlustrate im Rahmen dieser Abschätzung sowieso nur bis auf Proportionalitäten abgeschätzt werden kann. Sie hängt für konkrete Systeme natürlich auch von den Anschlußbedingungen ab.

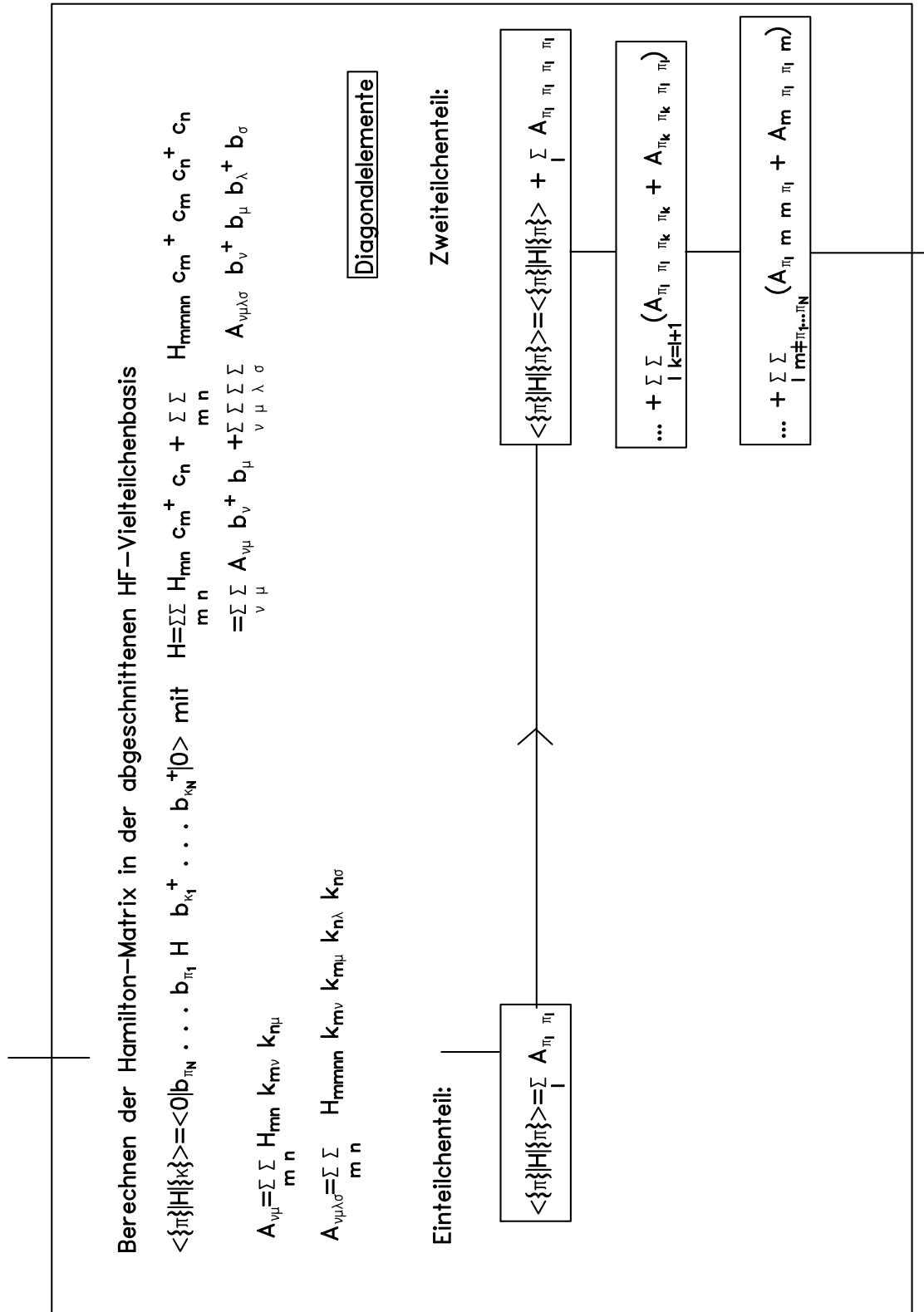
Anhang 2: Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung: Ablaufplan



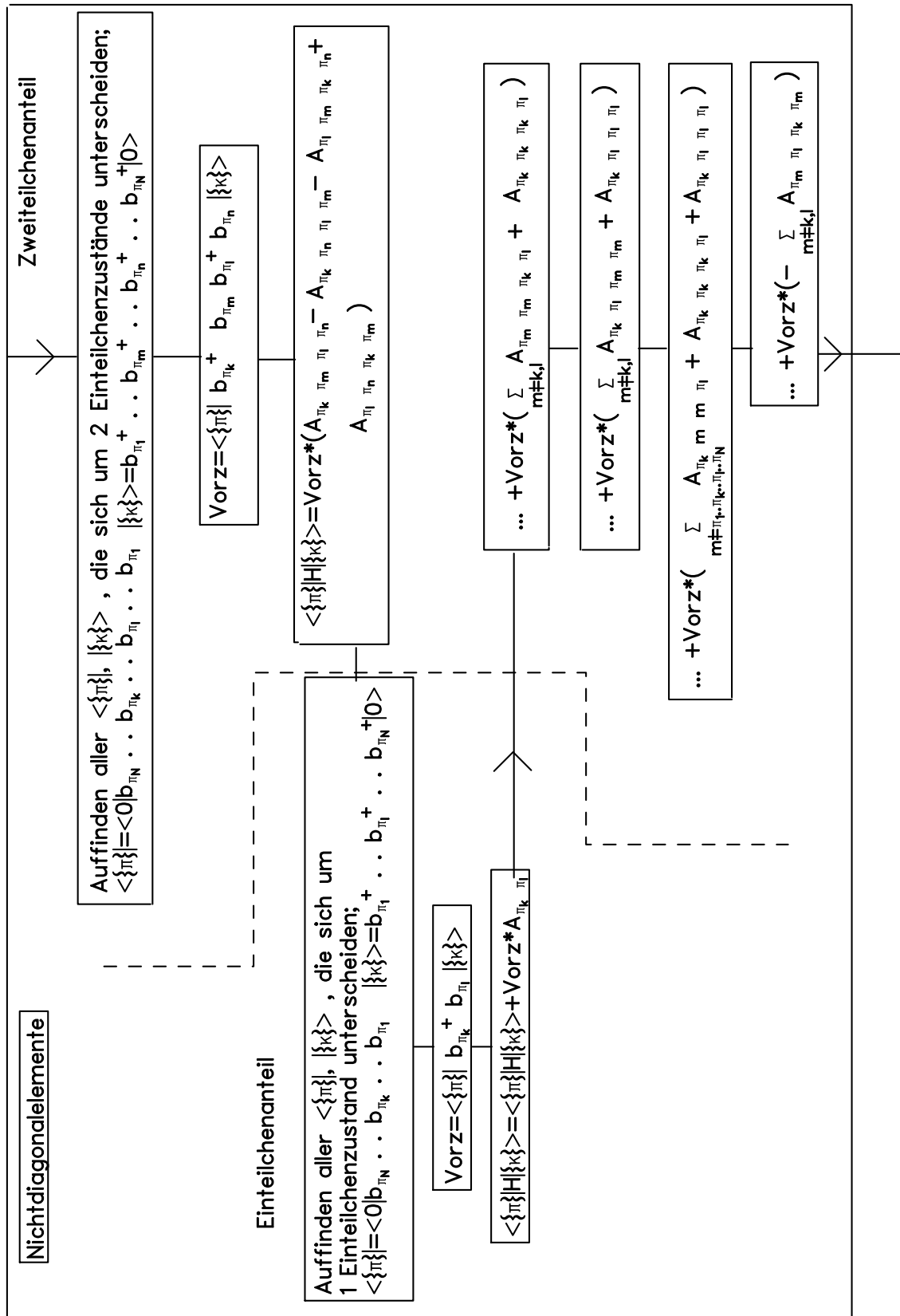




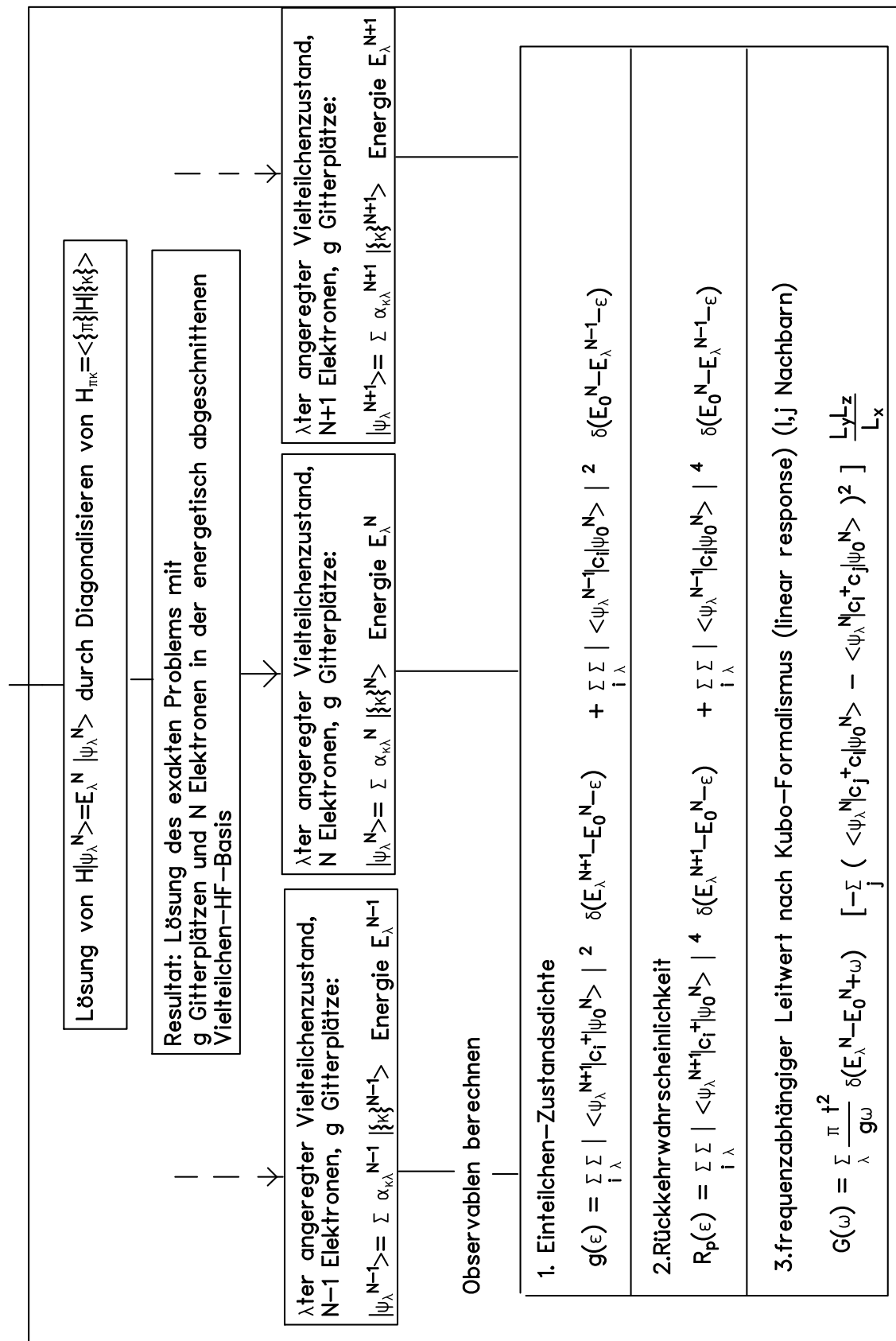
Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung: Monte-Carlo-Verfahren zur Ermittlung der B niederenergetischsten Hartree-Fock-Vielteilchenbasiszustände



Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung: Ermittlung der Hamilton-Matrix in der energetisch abgeschnittenen Hartree-Fock-Basis; Diagonalelemente



Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung: Ermittlung der Hamilton-Matrix in der energetisch abgeschnittenen Hartree-Fock-Basis; Nichtdiagonalelemente



Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung; numerische Diagonalisierung und Berechnung von Einteilchen-Zustandsdichte, Rückkehrwahrscheinlichkeit und Kubo-Leitwert

Literaturverzeichnis

- A58 P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)
- AA79 B. L. Altshuler und A. G. Aronov, Sol. State Commun. **30**, 116 (1979)
- AAAD92 K. M. Abkemeier, C. J. Adkins, R. Asal und E. A. Davis, J. Phys. Condens. Matter **4**, 9113 (1992)
- AALR79 E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello und T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979)
- ASCA75 B. Abeles, P. Sheng, M. D. Coutts und Y. Arie, Adv. Phys. **24**, 407 (1975)
- AZS92 A. Aharony, Y. Zhang und M. P. Sarachik, Phys. Rev. Lett. **68**, 3900 (1992)
- B29 F. Bloch, Z. Phys. **57**, 545 (1929)
- B84 G. Bergmann, Phys. Rep. **107**, 1 (1984)
- BA96 R. Berkovits und Y. Avishai, Phys. Rev. Lett. **76**, 291 (1996)
- BEGS79 S. D. Baranovskii, A. L. Efros, B. L. Gelmont und B. I. Shklovskii, J. Phys. C **12** 1023 (1979)
- BKS87 B. Bulka, B. Kramer und M. Schreiber, Z. Phys. B **66**, 21 (1987)
- BK94 D. Belitz und T. R. Kirkpatrick, Rev. Mod. Phys. **66**, 261 (1994)
- BK97 D. Belitz und T. R. Kirkpatrick, cond-mat/9705023
- BMP97 D. Braun, G. Montamboux und M. Pascaud, cond-mat/9712256
- BP95 G. Bouzerar und D. Poilblanc, Phys. Rev. B **52**, 10772 (1995)

- BTD80 D. J. Bishop, D. C. Tsui, R. C. Dynes, Phys. Rev. Lett. **44**, 1153 (1980)
- CIM91 G. Casati, F. Izrailev und L. Molinari, J. Phys. A: Math. Gen. **24**, 4755 (1991)
- D85 G. Döhler, in: *Properties of impurity states in n-i-p-i superlattice structures*, Hrsg. G. Döhler, C. Y. Fong, I. P. Batra und S. Ciraci (New York: Plenum) S. 169 (1985)
- D97 S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge University Press, Cambridge (1997)
- DA85 J. H. Davies, Phil. Mag. B **52** 511 (1985)
- DH90 B. Dietz und F. Haake, Z. Phys. B **80** 153 (1990)
- DLR82 J. H. Davies, P. A. Lee und T. M. Rice, Phys. Rev. Lett. **49** 758 (1982)
- DLR84 J. H. Davies, P. A. Lee und T. M. Rice, Phys. Rev. B **29** 4260 (1984)
- DP88 G. Döhler und K. Ploog, in: *Synthetic modulated structure materials*, Hrsg. L. L. Chang und B. C. Giessen (New York: Academic) S. 163 (1988)
- DZS91 P. Dai, Y. Zhang und M. P. Sarachik, Phys. Rev. Lett. **66**, 1914 (1991)
- DZS92 P. Dai, Y. Zhang und M. P. Sarachik, Phys. Rev. Lett. **69**, 1804 (1992)
- E76 A. L. Efros, J. Phys. C **9** 2021 (1976)
- EBGS78 A. L. Efros, S. D. Baranowskii, G. L. Gelmont und B. I. Shklovskii Sol. State Commun. **27** 1 (1978)
- EKL74 R. J. Elliot, J. A. Krumhansl und P. L. Leath, Rev. Mod. Phys. **46** 465 (1974)
- ENS79 A. L. Efros, V. L. Nguyen, B. I. Shklovskii, J. Phys. C **C12**, 1869 (1979)
- EP95 A. L. Efros und F. G. Pikus, Solid State Commun. **96**, 183 (1995)
- ES75 A. L. Efros und B. I. Shklovskii, J. Phys. C **8**, L49 (1975)
- ES92 A. L. Efros und B. I. Shklovskii, in: *Electron-Electron Interactions in Disordered Systems*, Hrsg. A. L. Efros und M. Pollak (North-Holland: Amsterdam) S.409 (1985)
- F55 R. P. Feynman, Phys. Rev. **97**, 600 (1955)

- F83 A. M. Finkelstein, Sov. Phys. JETP **57**, 97 (1983)
- F95 P. Fulde, *Electronic correlations in molecules and solids*, (Springer: Berlin) (1995)
- G58 D. A. Greenwood, Proc. Phys. Soc., London **71** 585 (1958)
- GPSW82 M. Grünewald, B. Pohlmann, L. Schweitzer und D. Würz, J. Phys. C **16** L1163 (1982)
- GPSW83 M. Grünewald, B. Pohlmann, L. Schweitzer und D. Würz, J. Non-Cryst. Sol. **59&60** 77 (1983)
- H57 D. R. Hartree, *The calculation of atomic structures*, (New York: Wiley) (1957)
- H92 S. Hikami, Progr. Theor. Phys. Suppl. **107**, 213 (1992)
- H94 E. Hofstetter, Doktorarbeit, Universität Mainz (1994), unpubliziert
- HB78 S. Hikami und E. Brezin, J. Phys. A **11**, 1141 (1978)
- HKSS88 A. J. Heeger, S. Kivelson, J. R. Schrieffer und W. P. Su, Rev. Mod. Phys. **60**, 781 (1987)
- HS93 E. Hofstetter und M. Schreiber, Europhys. Lett. **21** 933 (1993)
- HS94 E. Hofstetter und M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **73** 3137 (1994)
- I95 Y. Imry, Europhys. Lett. **30**, 405 (1995)
- JS97 P. Jacquod und D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **78**, 4986 (1997)
- K57 K. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 576 (1957)
- KB94 T. R. Kirkpatrick und D. Belitz, Phys. Rev. Lett. **73**, 862 (1994)
- KF92 C. L. Kane und M. P. A. Fischer, Phys. Rev. B **23**, 15233 (1992)
- KKFPD94 S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov und M. D' Iorio, Phys. Rev. B **50**, 8039 (1994)
- KM93 B. Kramer und A. MacKinnon, Rep. Progr. Phys. **56**, 1469 (1993)
- KMBF+95 S. V. Kravchenko, W. E. Mason, G. E. Blowker, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov und M. D' Iorio, Phys. Rev. B **51**, 7038 (1995)
- KSS96 S. V. Kravchenko, D. Simonian, M. P. Sarachik, Phys. Rev. Lett. **77**, 4938 (1996)

- LCP93 Q. M. Li, L. Cruz und P. Phillips, Phys. Rev. B **47**, 1840 (1993)
- LP93 Q. M. Li und P. Phillips, Phys. Rev. B **48**, 16035 (1993)
- LR85 P. A. Lee und T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985)
- M49 N. F. Mott, Proc. Roy. Soc. A **62**, 416 (1949)
- M66 N. F. Mott, Phil. Mag. **13**, 989 (1966)
- M95 D. L. Maslov, Phys. Rev. B **20**, 14368 (1995)
- Me91 M. L. Mehta, *Random Matrices*, (Academic: New York) (1991)
- MK83 A. MacKinnon und B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **47**, 1646 (1983)
- ML95 J. G. Massey und M. Lee, Phys. Rev. Lett. **75**, 4266 (1995)
- [MNDH+97] A. Möbius, A. Nekliudov, A. Diaz-Sanchez, K. H. Hoffmann, A. Fachat und M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **79**, 4297 (1997)
- MR87a A. Möbius und M. Richter, J. Non-Cryst. Sol. **97&98** 483 (1987a)
- MRB92 A. Möbius, M. Richter und B. Drittler, Phys. Rev. B **45**, 11668 (1992)
- MRRTT53 N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953)
- MSB89 M. Milovanovic, S. Sachdev und R. N. Bhatt, Phys. Rev. Lett. **63**, 82 (1989)
- OW95 F. von Oppen und T. Wettig, Europhys. Lett. **32**, 741 (1995)
- OWM96 F. von Oppen, T. Wettig und J. Müller, Phys. Rev. Lett. **76**, 491 (1996)
- P70 M. Pollak, Discuss. Faraday Soc. **50**, 13 (1970)
- P92 M. Pollak, Phil. Mag. B **65**, 657 (1992)
- PA92 M. Pollak und C. J. Adkins, Phil. Mag. B **65**, 855 (1992)
- Pei34 R. E. Peierls, Phys. Rev. **54**, 918 (1934)
- PO85 M. Pollak und M. Ortuno, in: *Electron-electron interactions in disordered systems*, Hrsg. A. L. Efros und M. Pollak (Amsterdam: North-Holland) S. 287 (1985)
- PS98 H. Potempa und L. Schweitzer, J. Phys. Cond. Matt. **10**, L431 (1998)

- PWMKD97 P. Phillips, Y. Wan, I. Martin, S. Knysh und D. Dalidovich, *Nature*, **395**, 253 (1998)
- RB87 S. Roth und H. Bleier, *Adv. Phys.* **36**, 385 (1987)
- RE87 M. E. Raikh und A. L. Efros, *JETP Lett.* **45** 280 (1987)
- RS97 R. A. Römer und M. Schreiber, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 515 (1997)
- S94 D. L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2607 (1994)
- SC86 W. N. Shafarman und T. G. Castner, *Phys. Rev. B* **33**, 3570 (1986)
- SG91 M. Schreiber und H. Grussbach, *Phys. Rev. Lett.* **67** 607 (1991)
- SG95 M. Schreiber und H. Grussbach, *Phys. Rev. B* **51** 663 (1995)
- SG96 M. Schreiber und H. Grussbach, *Phys. Rev. Lett.* **76** 1687 (1996)
- SGFGE93 D. Schmeisser, W. Göpel, H. Fuchs, K. Graf und P. Erk, *Phys. Rev. B* **48**, 4891 (1993)
- SK84 B. I. Shklovskii, A. L. Efros, *Electronic properties of doped semiconductors*; Berlin, Springer (1984)
- SSSLS93 B.I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides und H. B. Shore, *Phys. Rev.* **47**, 11487 (1993)
- SSSSE98 P. Schmitteckert, T. Schulze, C. Schuster, P. Schwab, U. Eckern, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 560 (1998)
- SSV95 M. Sarvestani, M. Schreiber und T. Vojta, *Rev. B* **52**, R3820 (1995)
- T77 G. Toulouse, *Commun. Phys.* **2**, 116 (1977)
- TPE96 J. Talamantes, M. Pollak und L. Elam, *Europhys. Lett.* **35**, 511 (1996)
- TS94 K. Tenelsen und M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **49**, 12662 (1994)
- U94 G. S. Uhrig, "Symmetriebrechung und Leitfähigkeit für Fermionen in hohen Dimensionen", in: *Aachener Beiträge zur Physik der kondensierten Materie Bd. 11*, Hrsg. B. U. Felderhof, P. Grosse, G. Güntherodt, A. Stahl und D. Vollhardt (Verlag der Augustinus Buchhandlung: Aachen) (1994)
- UDR81 M. J. Uren, R. A. Davies, M. Raveh, M. Pepper, *J. Phys. C* **14**, 5737 (1981)

- VJS93 T. Vojta, W. John und M. Schreiber, *J. Phys. Condens. Matter* **5**, 4989 (1993)
- VSH86 G. Vignale, Y. Shinozuka und W. Hanke, *Phys. Rev. B* **34**, 3003 (1986)
- W31 A. H. Wilson, *Proc. Roy. Soc.* **133**, 458 (1931)
- W89 F. Wegner, *Nucl. Phys.* **B316**, 663 (1989)
- WMPF95 D. Weinmann, A. Müller-Groeling, J. L. Pichard und K. Frahm, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1598 (1995)
- WPI97 D. Weinmann, J.-L. Pichard und Y. Imry, *J. Phys. I (France)* **7**, 1559 (1997)
- ZR97 F. C. Zhang und T. M. Rice, *cond-mat/9708050*

Teile der Ergebnisse der vorliegenden Arbeit wurden bereits in folgenden Publikationen veröffentlicht:

M.Schreiber, F.Epperlein und T.Vojta: "Density of states and localization properties of disordered quantum systems with long-range interactions", in: *Proc. 23rd International Conference on the Physics of Semiconductors*, Hrsg. M. Scheffler und R. Zimmermann (World Scientific: Singapore) S.169-172 (1996)

F.Epperlein, M.Schreiber und T.Vojta: "Quantum Coulomb glass within the Hartree-Fock-approximation", *Phys. Rev. B* **56**, 5890-6 (1997)

T.Vojta, F.Epperlein und M.Schreiber: "Quantum Coulomb glass: Anderson localization in an interacting system", *phys. stat. sol. (b)* **205**, 53-9 (1998)

F.Epperlein, M.Schreiber und T.Vojta: "Quantum Coulomb glass - Hartree-Fock approximation versus exact diagonalization", *phys. stat. sol. (b)* **205**, 233-6 (1998)

T.Vojta, F.Epperlein und M.Schreiber: "Do interactions increase or reduce the conductance of disordered electrons? It depends!", *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4212 (1998)

M.Schreiber, F.Epperlein und T.Vojta: "Transport in disordered interacting systems: Numerical results for one-dimensional spinless electrons", eingereicht bei *Physica A*, *cond-mat/9807385*

T.Vojta, F.Epperlein und M.Schreiber: "Hartree-Fock based diagonalization: an effective method for simulating disordered interacting electrons", eingereicht bei *Comp. Phys. Commun.*, *cond-mat/9809171*

T.Vojta und F.Epperlein: "Electronic transport in disordered interacting systems", *Ann. Phys.* **7**, 493 (1998)

F.Epperlein, M.Schreiber, T.Vojta und A. Möbius: "Coulomb interaction and localization in disordered electron systems", zur Veröffentl. angenommen in: *Proc. 24th International Conference on the Physics of Semiconductors*, (Jerusalem 1998)

Verzeichnis der Abbildungen und Tabellen

Abb. 1.1: Teilweise kompensiertes Störstellenband in einem Halbleiter	10
Abb. 1.2: Vergleich der Größenordnungen der Schwankungen von ϕ , U_{ik} und t für Si:As	12
Abb. 1.3: Modelle und Methoden für Elektronen ohne Spin	15
Abb. 1.4: Modelle und Methoden beim Quanten-Coulomb-Glas	16
Abb. 1.5: Einteilchenzustandsdichte beim Wignerkristall	17
Abb. 1.6: Einteilchenzustandsdichte bei Bandelekttronen	17
Abb. 1.7: Einteilchenzustandsdichte beim Zufallspotential-Gitter	17
Abb. 1.8: Einteilchenzustandsdichte für wechselwirkende Elektronen ohne Unordnung	19
Abb. 1.9: Einteilchenzustandsdichte beim klassischen Coulomb-Glas	20
Abb. 1.10: Einteilchenzustandsdichte, Partizipationszahl und MIT beim 3d-Anderson-Modell	21
Abb. 1.11: Coulomb-Anomalie	23
Abb. 2.1: HF-Verfahren beim Quanten-Coulomb-Glas	30
Abb. 2.2: a) Grenzyklus einer ausgewählten Besetzungszahl ohne Zumischung; b) Besetzungszahlen bei einer Zumischung von 50%	34
Abb. 2.3: a) Notwendige Zumischung in Abhängigkeit von der Systemgröße; b) notwendige Schrittzahl bis zu hinreichender Konvergenz in Abhängigkeit von t	35
Abb. 2.4: Konvergenz von Eigenwerten und Besetzungszahlen beim Start vom Anderson-Modell bzw. vom klassischen Coulomb-Glas	36
Abb. 2.5: Einteilchenzustandsdichten für die Grenzfälle des Quanten-Coulomb-Glases	37
Abb. 2.6: Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung bei Halbfüllung	39
Abb. 2.7: Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung bei dreiviertel gefülltem Band	39
Abb. 2.8: Doppelt-logarithmische Darstellung der Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung bei Halbfüllung	40
Abb. 2.9: Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in Hartree-Näherung bei Halbfüllung	41
Abb. 2.10: Inverse Partizipationszahl $P^{-1}(\epsilon)$ des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung bei Halbfüllung	42
Abb. 2.11: Inverse Partizipationszahl P^{-1} des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung bei dreiviertel gefülltem Band	43

Abb. 2.12: Inverse Partizipationszahlen P^{-1} des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung und des Anderson-Modells der Lokalisierung	44
Abb. 2.13: PE und GOE-Verteilung	46
Abb. 2.14: Fitkonstanten A, C und β im Anderson-Modell der Lokalisierung in Abhängigkeit von t	48
Abb. 2.15: Mobilitätskante im Anderson-Modell der Lokalisierung	48
Abb. 2.16: Verteilung der Abstände benachbarter Energieniveaus $P(s)$ beim Quanten-Coulomb-Glas	49
Abb. 2.17: Fitkonstanten A, C und β beim Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung für verschiedene t	49
Abb. 2.18: Mobilitätskante des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung für Bandfüllungen $K = 0.5, K = 0.75, K = 0.875$ und $K = 0.9375$	50
Abb. 2.19: MIT-Phasendiagramm des Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung und des Anderson-Modells der Lokalisierung	50
Abb. 2.20: Gleichstromleitwerte $G_{xx}(0)$ eines zweidimensionalen Anderson-Modells der Lokalisierung für verschiedene L und t und Skalenfunktion	51
Abb. 2.21: Gleichstromleitwerte $G_{xx}(0)$ eines zweidimensionalen Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung für verschiedene Kantenlängen L und t	53
Abb. 3.1 Teilchen-Loch-Zustandsdichte des klassischen Coulomb-Glases in exakter Lösung und HF-Näherung	57
Abb. 3.2 Einteilchenzustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in exakter Lösung und mit HF-Näherung für verschiedene t	60
Abb. 3.3 Histogramm der Einteilchenzustände (Lochzweig) eines Quanten-Coulomb-Glases in exakter Lösung und HF-Näherung für eine Realisierung des Zufallspotentials	61
Abb. 3.4 Fockraumpartizipationszahl P_{Fock}^{-1} des Vielteilchengrundzustands beim Quanten-Coulomb-Glas und beim Anderson-Modell der Lokalisierung	65
Abb. 3.5 Vergleich der Grundzustände eines Quanten-Coulomb-Glases mit 6 und 7 Teilchen	67
Abb. 3.6 Rückkehrwahrscheinlichkeiten $R_p(\epsilon)$ eines Quanten-Coulomb-Glases in HF-Näherung und exakter Lösung	69
Abb. 3.7 Rückkehrwahrscheinlichkeiten $R_p(\epsilon)$ eines Quanten-Coulomb-Glases in exakter Lösung im Vergleich zum Anderson-Modell der Lokalisierung	70
Abb. 3.8 Rückkehrwahrscheinlichkeiten $R_p(\epsilon_F)$ im Vergleich: a) Quanten-Coulomb-Glas in HF-Näherung und exakter Lösung, b) Anderson-Modell und Quanten-Coulomb-Glas in exakter Lösung	70
Abb. 3.9 Leitwerte $G_{xx}(\omega)$ für das Quanten-Coulomb-Glas in exakter Lösung und HF-Näherung bei verschiedenen t	72
Abb. 3.10 Teilchen-Loch-Zustandsdichte des Quanten-Coulomb-Glases in exakter Lösung und HF-Näherung	73
Abb. 3.11 Projektion ausgewählter exakter Zustände auf die niederenergetischsten 50 HF-Zustände	75
Abb. 3.12 Relative Abweichungen von HF-Grundzustandsenergie und korrigierter HF-Grundzustandsenergie zur exakten Grundzustandsenergie beim Quanten-Coulomb-Glas	76
Abb. 4.1 HFD: Teilschritte	80
Abb. 4.2 Voraussichtliches Konvergenzverhalten von Zuständen und Energien bei der HFD	85
Abb. 4.3 Voraussichtliches Konvergenzverhalten der Rückkehrwahrscheinlichkeit $R_p(\epsilon)$ und des Leitwerts $G_{xx}(\omega)$ bei der HFD	86
Abb. 4.4 Rückkehrwahrscheinlichkeiten $R_p(\epsilon)$ des Quanten-Coulomb-Glases ($g = 4 \times 3$) mit exakter Lösung und HFD bei $B = 50$	91
Abb. 4.5 Leitwerte $G_{xx}(\omega)$ des Quanten-Coulomb-Glases ($g = 4 \times 3$) mit exakter Lösung und HFD bei $B = 50$	92

Abb. 4.6 Konvergenz von Grund- und angeregten Zuständen bei der HFD für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$	93
Abb. 4.7 Zur Konvergenz von Grund- und angeregten Zuständen notwendige Basisgröße bei der HFD für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$	94
Abb. 4.8 Relativer Fehler der HFD-Grundzustandsenergie für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$	94
Abb. 4.9 Konvergenz der HFD-Energien der angeregten Zustände für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$ bei $t = 0.03$ und $t = 0.1$	95
Abb. 4.10 Wie Abb. 4.9, aber für $t = 0.3$ und $t = 0.5$	96
Abb. 4.11 Mittlerer relativer Fehler der Grundzustandsbesetzungszahlen für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$	96
Abb. 4.12 Mittlerer relativer Fehler der Beiträge verschiedener Zustände zur Rückkehrwahrscheinlichkeit $R_p(\epsilon)$ bei der HFD für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$	97
Abb. 4.13 HFD- und exakte Rückkehrwahrscheinlichkeiten $R_p(\epsilon)$ für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$	98
Abb. 4.14 Mittlerer relativer Fehler der Beiträge verschiedener Zustände zum HFD-Leitwert für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$	99
Abb. 4.15 HFD- und exakte Leitwerte für eine Realisierung des Systems mit $g = 16$	100
Abb. 4.16 HFD-Leitwerte bei verschiedenen Basisgrößen B für eine Realisierung des Systems mit $g = 25$	101
Abb. 4.17 HFD-Leitwerte für Systeme mit $g = 16$ und $g = 25$	102
Abb. 4.18 HFD-Gleichstromleitwert für Systeme mit $g = 12$, $g = 16$ und $g = 25$	103
Abb. 4.19 HFD-Gleichstromleitwert für ein System mit $g = 3 \times 3 \times 3$ und $N = 13$ bei verschiedenen t und U	104
Abb. 4.20 Wie Abb. 4.19, aber für ein System mit $g = 5 \times 5$ und $N = 12$	105
Abb. 4.21 Wie Abb. 4.19, aber für ein System mit $g = 25 \times 1$ und $N = 12$	106
HFD: Überblick	124
HFD: HF-Lösung	125
HFD: Monte-Carlo-Verfahren zur Ermittlung der B niederenergetischsten HF-Vielteilchenbasiszustände	126
HFD: Ermittlung der Hamilton-Matrix in der energetisch abgeschnittenen HF-Basis; Diagonalelemente	127
HFD: Ermittlung der Hamilton-Matrix in der energetisch abgeschnittenen HF-Basis; Nicht-diagonalelemente	128
HFD: numerische Diagonalisierung und Berechnung von Einteilchen-Zustandsdichte, Rückkehrwahrscheinlichkeit und Kubo-Leitwert	129
Tabelle 3.1 Größe der vollständigen Basis bei verschiedenen Systemgrößen	59

Verzeichnis der Formelzeichen und Abkürzungen

A	Fitkonstante in der Israilev-Formel
$A(j, t : i, 0)_T$	Wahrscheinlichkeit, ein zur Zeit $t_0 = 0$ am Platz i erzeugtes Teilchen zur Zeit t am Platz j wiederzufinden
$A(j, t : i, 0)_L$	Wahrscheinlichkeit, ein zur Zeit $t_0 = 0$ am Platz i erzeugtes Loch zur Zeit t am Platz j wiederzufinden
A_{ik}	Gewicht des Einteilchenanteils $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_k$ im Hamiltonoperator
$A_{\mu\nu}$	Gewicht des Einteilchenanteils $\hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu$ im Hamiltonoperator
$A_{\mu\nu\lambda\rho}$	Gewicht des Zweiteilchenanteils $\hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\nu \hat{b}_\lambda^\dagger \hat{b}_\rho$ im Hamiltonoperator
$\alpha_{l\lambda}$	Koeffizient des Vielteilchen-Platz-Slaterzustands $ \{l\}\rangle$ im λ -ten angeregten Vielteilchenzustand $ \psi_\lambda\rangle$
$\alpha_{\pi\lambda}$	Koeffizient des Vielteilchen-HF-Slaterzustands $ \{\pi\}\rangle$ im λ -ten angeregten Vielteilchenzustand $ \psi_\lambda\rangle$
B	Anzahl der HF-Vielteilchenbasiszustände bei der HFD
B_1	Anzahl der HF-Vielteilchenbasiszustände bei der HFD, die sich in einem Einteilchenzustand unterscheiden
B_2	Anzahl der HF-Vielteilchenbasiszustände bei der HFD, die sich in zwei Einteilchenzuständen unterscheiden
$\hat{b}_\mu^\dagger, \hat{b}_\nu$	Erzeuger bzw. Vernichter des HF-Einteilchenzustands $ \mu\rangle$ bzw. $ \nu\rangle$
$\hat{b}_{\pi_1}^\dagger, \hat{b}_{\pi_N}$	Erzeuger bzw. Vernichter des HF-Einteilchenzustands $ \pi_1\rangle$ bzw. $ \pi_N\rangle$
β	Fitkonstante in der Israilev-Formel, Skalenfunktion beim Leitwert, inverse Temperatur beim Monte-Carlo Verfahren
C	Fitkonstante in der Israilev-Formel
$\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_k$	Erzeuger bzw. Vernichter des Platz-Zustandes $ i\rangle$ bzw. $ k\rangle$
$\hat{c}_{i_1}^\dagger, \hat{c}_{i_N}$	Erzeuger bzw. Vernichter des Platz-Zustandes $ i_1\rangle$ bzw. $ i_N\rangle$
d	räumliche Dimension
δ	Variation
Δ	Madelung-Konstante
$\delta_{\mu\lambda}$	Kroneckersymbol
$\delta(\)$	Diracsche Delta-Funktion
Δ	Fehler
Δ_r	relativer Fehler
ξ	Gitterkonstante in x -Richtung
e	Elementarladung
\mathbf{E}	elektrisches Feld
E	Energie eines Vielteilchenzustands

- E_x x -Komponente des elektrischen Feldes
 E_{Start} Energie des Start-Vielteilchenzustands beim Monte-Carlo Verfahren
 E_{Ziel} Energie des Ziel-Vielteilchenzustands beim Monte-Carlo Verfahren
 E_λ Energie eines Vielteilchensystems im Zustand $|\psi\rangle_\lambda$
 E_λ^N Energie eines Vielteilchensystems mit der Teilchenzahl N im Zustand $|\psi\rangle_\lambda^N$
 ϵ Einteilchenenergie (bei $d = 2 + \epsilon$ infinitesimale Konstante)
 ϵ_F Fermienergie
 ϵ_i Einteilchenenergie am Gitterplatz i
 ϵ_μ Energie des Einteilchenzustands $|\mu\rangle$
 ϵ_{ρ_1} Energie des Einteilchenzustands $|\rho_1\rangle$
 ϵ_0 Dielektrizitätskonstante
 ϵ_r relative Dielektrizitätskonstante
- F freie Energie
 \mathbf{F} Kraft
- g Zahl der Gitterplätze
 g_{Kon} Zahl der Gitterplätze an den Kontakten des Systems
 $G^R(\hat{A}, t : \hat{O}, t')$ retardierte Greensfunktion der Operatoren \hat{A} und \hat{O}
 $G^R(i, t : i, t')$ retardierte zeitliche Einteilchengreensfunktion
 $G_{ii}^A(\omega)$ fouriertransformierte avancierte Einteilchengreensfunktion
 $G_{ii}^R(\omega)$ fouriertransformierte retardierte Einteilchengreensfunktion
 $G_{ii}(\bar{\omega})$ komplexe Einteilchengreensfunktion
 G_λ^+ Gewicht $\sum_i |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^2$
 G_λ^- Gewicht $\sum_i |\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle|^2$
 $G_\lambda'^+$ Gewicht $\sum_i |\langle \psi_\lambda^{N+1} | \hat{c}_i^\dagger | \psi_0^N \rangle|^4$
 $G_\lambda'^-$ Gewicht $\sum_i |\langle \psi_\lambda^{N-1} | \hat{c}_i | \psi_0^N \rangle|^4$
 G_{xx} Leitwert in x -Richtung
 $G_{xx}(0)$ Gleichstromleitwert in x -Richtung
 $G_{xx}(\omega)$ frequenzabhängiger Leitwert in x -Richtung
 $g(\epsilon)$ Einteilchenzustandsdichte bei $T = 0$
 γ Verbreiterung
- \hat{H} Hamilton-Operator
 H_{mn} Gewicht des Einteilchenanteils $\hat{c}_m^\dagger \hat{c}_n$ im Hamiltonoperator
 H_{mnnn} Gewicht des Zweiteilchenanteils $\hat{c}_m^\dagger \hat{c}_m \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n$ im Hamiltonoperator
- \Im Imaginärteil
 $i - \xi$ Platznummer des linken Nachbarn vom Gitterplatz i
 $i + \xi$ Platznummer des rechten Nachbarn vom Gitterplatz i
 $|\{i\}\rangle$ Vielteilchen-Platz-Slaterzustand $|\{i\}\rangle = \hat{c}_{i_1}^\dagger \dots \hat{c}_{i_N}^\dagger |0\rangle$
- K Kompensation
 $k_{i\mu}$ Koeffizienten bei der linearen Transformation zwischen Platz-Erzeugern bzw. Vernichtern und Erzeugern bzw. Vernichtern von HF-Einteilchenzuständen
 k_x, k_y, k_z Wellenzahl in x, y, z -Richtung
- \hat{j} Stromdichteoperator
 \hat{j}_i^x Stromdichteoperator am Platz i in x -Richtung
 \hat{j}_x Stromdichteoperator in x -Richtung
- l Lokalisierungsradius des Donatorelektrons einer „nackten“ Störstelle
 L Kantenlänge
 L_x, L_y, L_z Kantenlänge in x, y, z -Richtung

λ_{Lok}	Lokalisierungslänge
m_{eff}	effektive Masse eines Elektrons
N_{A}	Akzeptorkonzentration
N_{C}	kritische Konzentration
N_{D}	Donatorkonzentration
n_i	Besetzungszahl des Gitterplatzes i
$n_{i\downarrow}$	Besetzungszahl des Gitterplatzes i mit Elektronen mit Spin \downarrow
\hat{n}_i	Besetzungszahloperator von Gitterplatz i
$\bar{N}(\epsilon)$	geglättete integrierte Einteilchenzustandsdichte
ω	Frequenz
$P(\dots)$	Hauptwert
P^{-1}	über alle Einteilchenzustände $ \nu\rangle$ gemittelte inverse Partizipationszahl
$P_{\Delta q}^{-1}(\lambda)$	Partizipationszahl der Verteilung einer Extraladung
$P_{\text{Fock}}^{-1}(\lambda)$	Fock-Raum-Partizipationszahl eines Vielteilchenzustands $ \psi\rangle_\lambda$ mit der Vielteilchenbasis $ i\rangle$, Art der Basis wird im Text spezifiziert
$P_k(\rho_t)$	Wert, der bei der k -ten Permutation von $\rho_1 \dots \rho_N$ an die Stelle ρ_t tritt
$P(s)$	Verteilung des Abstands zwischen benachbarten Energieniveaus
\hat{P}_x	Polarisationsoperator in x -Richtung
$P^{-1}(\epsilon)$	mittlere inverse Partizipationszahl der Einteilchenzustände mit einer Energie ϵ
P_ν^{-1}	inverse Partizipationszahl des Einteilchenzustands $ \nu\rangle$
$P(\psi\rangle_{\text{s.}} \rightarrow \psi\rangle_{\text{z.}})$	Wahrscheinlichkeit für den Sprung vom Start- zum Zielzustand beim Monte-Carlo Verfahren
ϕ_i	Zufallspotential am Gitterplatz i
$ \psi_0\rangle$	Grundzustand eines Vielteilchensystems
$ \psi_0^N\rangle$	Grundzustand eines Vielteilchensystems mit N Teilchen
$ \psi_\lambda\rangle$	λ -ter angeregter Zustand eines Vielteilchensystems
$ \psi_\lambda^N\rangle$	λ -ter angeregter Zustand eines Vielteilchensystems mit N Teilchen
q	Ladung
\Re	Realteil
r_{ik}	Abstand zwischen den Gitterplätzen i und k
r_{max}	maximaler Abstand im System
$R(i, t)$	zeitabhängige Rückkehrwahrscheinlichkeit eines Quasiteilchens, das bei $t = 0$ am Platz i in ein Fermionen-Vielteilchensystem injiziert wird
$\bar{R}(i, t)$	Langzeitlimes von $R(i, t)$
$R(i)$	Rückkehrwahrscheinlichkeit eines Quasiteilchens, das am Platz i in ein Vielteilchen-Fermionensystem injiziert wird
R_p	über alle Plätze gemittelte Rückkehrwahrscheinlichkeit einer Einteilchenanregung
$R_p(\epsilon)$	energieaufgelöste Rückkehrwahrscheinlichkeit
$\hat{\rho}$	Ladungsdichteoperator
$ \{\rho\}\rangle$	Vielteilchen-HF-Slaterzustand $ \{\rho\}\rangle = \hat{b}_{\rho_1}^\dagger \dots \hat{b}_{\rho_N}^\dagger 0\rangle$
s	Abstand zwischen benachbarten Energieniveaus
Sp	Spur
$S(t)$	Störung eines Systems, die über den Operator \hat{O} an den Hamilton-Operator koppelt
σ	Leitfähigkeit
$\sigma_{xx}(\omega)$	frequenzabhängige Leitfähigkeit in x -Richtung
$\sum_{(i,k)}$	Summe über nächste Nachbarn i, k

- t Transferintegral, Zeit
 T Temperatur, Zeit
 $\theta(\)$ Stufenfunktion
- U Wechselwirkungsstärke der Coulomb-Wechselwirkung (Einleitung: Hubbard-Energie)
- $V(P_k)$ Vorzeichen von $\langle 0 | \hat{b}_{\rho_N} \dots \hat{b}_{\rho_1} \hat{b}_{P_k(\rho_1)}^\dagger \dots \hat{b}_{P_k(\rho_N)}^\dagger | 0 \rangle$ unter der k -ten Permutation von $\rho_1 \dots \rho_N$
- W Arbeit
 W_0 Breite der Verteilung des Zufallspotentials
- ζ_{ik} $\begin{cases} 1, & \text{wenn } i, k \text{ Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$
- $[,]_-$ Kommutator
 $[,]_+$ Antikommutator
 $\langle \ \rangle$ Erwartungswert
 $\langle \ \rangle_0$ Grundzustandserwartungswert
 $|0\rangle$ Vakuumzustand im Hilbert- bzw. Fock-Raum
- ATA average T-matrix approximation
 CIB classical impurity band
 CPA coherent potential approximation
 GOE Gaußisch-Orthogonales-Ensemble
 HF Hartree-Fock
 HFD Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung
 MIT Metall-Isolator-Übergang
 PE Poisson-Ensemble
 QCG Quanten-Coulomb-Glas
 VCA virtual crystal approximation

Dank

Mein Dank gilt zuerst Herrn Prof. Dr. Michael Schreiber. Er gab mir die Möglichkeit, dieses Thema in Angriff zu nehmen, hervorragende Arbeitsbedingungen und die Freiheit, eigene Akzente bei der Bearbeitung zu setzen. Mit seiner fundierten und vorwärtsweisenden Kritik half er mir, auf Defizite aufmerksam zu werden, den physikalischen Horizont der Arbeit zu erweitern und die Präsentation der Resultate wesentlich zu verbessern.

Gleichermaßen danke ich Herrn Dr. Thomas Vojta. Seiner ständigen Bereitschaft, über physikalische Fragen zu diskutieren, seinen umfassenden Kenntnissen und der präzisen, aber doch lebendigen Art seiner Erklärung physikalischer Zusammenhänge verdanke ich sehr viel. Die ihm eigene unkomplizierte und freundliche Weise, auch in praktischen Fragen beratend zur Seite zu stehen, hat den Fortschritt der Arbeit zusätzlich wesentlich befördert.

Weiter möchte ich allen anderen Mitgliedern der Chemnitzer Arbeitsgruppe danken, die mit ihrem freundlichen Klima ein Wohlfühlen leichtgemacht hat und stets für Diskussionen und Gespräche offen war.

Ein besonderer Dank gebührt auch dem Graduiertenkolleg „Dünne Schichten und nichtkristalline Materialien“ der TU Chemnitz mit allen Professoren, Stipendiaten und Kollegiaten sowohl für meine Auswahl als Stipendiat und die Finanzierung meiner Arbeit als auch für zahlreiche interessante Vorlesungen und Veranstaltungen, die mir einen breiteren Blick auf die Physik ermöglichten.

Außerdem möchte ich mich ganz besonders bei meiner Frau Manuela bedanken.

Erklärung

Ich erkläre, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe.

Ich erkläre, nicht bereits früher oder gleichzeitig bei anderen Hochschulen oder an dieser Universität ein Promotionsverfahren beantragt zu haben.

Ich erkenne die Promotionsordnung der Fakultät für Naturwissenschaften der Technischen Universität Chemnitz vom 15. März 1995 an.

Frank Epperlein

Thesen zur Dissertation

Gegenstand der Arbeit ist das Quanten-Coulomb-Glas. Es wurde mit der Hartree-Fock-Näherung untersucht, für kleine Gitter exakt gelöst sowie mit der Methode der Hartree-Fock-basierten Diagonalisierung behandelt. Dabei gibt es folgende Hauptresultate:

1. Quanten-Coulomb-Glas in Hartree-Fock-Näherung

Einteilchenzustandsdichte

- Die Einteilchenzustandsdichte zeigt im gesamten isolierenden Bereich eine Coulomb-Lücke, die sich am Phasenübergangspunkt zu einer Coulomb-Anomalie umwandelt.
- Die Coulomb-Lücke auf der isolierenden Seite des Metall-Isolator-Übergangs ist Resultat des Hartree-Terms, während die Coulomb-Anomalie auf der metallischen Seite vom Austauschterm hervorgerufen wird.

Lokalisierungseigenschaften

- Die Hartree-Fock-Einteilchenzustände nahe an der Fermienergie sind im isolierenden Bereich immer stärker lokalisiert als die Zustände etwas weiter weg von der Fermienergie.
- Die Hartree-Fock-Einteilchenzustände an der Fermienergie sind im isolierenden Bereich immer stärker lokalisiert als die Zustände des nichtwechselwirkenden Systems für dasselbe Transfermatrixelement. Der Unterschied ist am größten, wenn die Fermienergie in der Bandmitte liegt und wird für Fermienergien weiter an der Bandkante kleiner.

Metall-Isolator-Übergang

- Im wechselwirkenden System tritt der Metall-Isolator-Übergang unabhängig von der Fermienergie immer bei größeren Transfermatrixelementen auf als im nichtwechselwirkenden System. Die Differenz ist maximal in der Bandmitte und wird zur Bandkante geringer.

Gleichstromleitwert

- Das Quanten-Coulomb-Glas in Hartree-Fock-Näherung hat immer einen deutlich niedrigeren Gleichstromleitwert als ein nichtwechselwirkendes System mit gleichem Transfermatrixelement.

2. Quanten-Coulomb-Glas – Hartree-Fock-Näherung und exakte Lösung für kleine Gitter; ein Vergleich

Einteilchenzustandsdichte:

- Die Hartree-Fock-Näherung beschreibt die Einteilchenzustandsdichte im gesamten Band sehr gut.

Rückkehrwahrscheinlichkeit:

- Die Hartree-Fock-Näherung überschätzt die Rückkehrwahrscheinlichkeit im Vergleich zur exakten Lösung im ganzen Bereich, nur sehr wenig an der Fermienergie, zu den Bandkanten immer stärker.
- In der exakten Lösung ergibt sich für mittlere und große Transfermatrixelemente eine größere Rückkehrwahrscheinlichkeit an der Fermienergie als beim nichtwechselwirkenden System, für kleine Transfermatrixelemente dagegen eine gleiche oder möglicherweise eine kleinere.

Gleichstromleitwert:

- Der Gleichstromleitwert in Hartree-Fock-Näherung ist immer deutlich kleiner als in der exakten Lösung.
- Im Vergleich zum nichtwechselwirkenden System führt die Wechselwirkung bei schwacher Unordnung zu einer Verringerung des Transportes und bei großer Unordnung zu einer Erhöhung des Transportes.

3. Hartree-Fock-basierte Diagonalisierung

- Wechselwirkung induziert für Unordnungstärke/Wechselwirkungsstärke=1 im Bereich kleiner Transfermatrixelemente immer eine stärkere Delokalisierung, im Bereich großer Transfermatrixelemente dagegen immer eine stärkere Lokalisierung. Für ein bestimmtes Transfermatrixelement führt eine genügend starke Wechselwirkung immer zu Lokalisierungseffekten. Je kleiner das Transfermatrixelement dabei ist, umso größer muß die Wechselwirkungsstärke sein. Ebenso läßt sich für eine bestimmte Wechselwirkungsstärke immer eine lokalisierende Tendenz der Wechselwirkung erreichen, wenn man das Transfermatrixelement groß genug wählt. Je kleiner die Wechselwirkungsstärke dabei ist, umso größer muß das Transfermatrixelement sein.

Tabellarischer Lebenslauf

Name: Frank Epperlein

Geburtsdatum: 05.10.1966

Geburtsort: Annaberg-Buchholz

Familienstand: verheiratet

Konfession: evangelisch

Schulbildung: 1973-1983: Polytechnische Allgemeinbildende Oberschule in Annaberg; Mittlere Reife
1983-1985: Erweiterte Oberschule in Annaberg; Abitur

Wehrdienst: 1985-1987 (18 Monate)

Studium: 1987-1990: (5 Fachsemester) an der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
1990-1995: (10 Fachsemester) an der TU Berlin
Fachrichtung: Physik
Thema der Studienarbeit: „Zur Strukturbildung bei der NEMD-Simulation ebener Scherströmungen“
Thema der Diplomarbeit: „Untersuchungen zur Dynamik von Fluiden aus rotierenden Teilchen“

Nebenarbeit: 1993-1995: Übersetzung und Satz des Lehrbuches von A.P. French „Newton Mechanics“ für den Verlag Walter de Gruyter

weiterer Berufsweg: November–Dezember 1995: Arbeit als wissenschaftliche Hilfskraft an der TU Chemnitz-Zwickau
ab Januar 1996: Stipendiat im Graduiertenkolleg „Dünne Schichten und nichtkristalline Materialien“ der TU Chemnitz; Mitarbeit am Teilprojekt C2 des SFB „Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern“
Thema der Dissertation: „Numerische Simulation des Transports in ungeordneten Vielelektronensystemen“

Hobbys: Luftschiffe, Luft-, Raumfahrt und Marinetechnik, Geschichte, CVJM-Arbeit, Basteln an Oldtimern, Skifahren, Bergsteigen