

Scattering in onedimensional disordered systems

Part I

Complete and exact formulae in the transfer matrix formalism,
Resistance at high density of scatterers

Diplomarbeit by Klaus Schneider

Fachbereich Physik der
Freien Universität Berlin

Dezember 1989

First expert: Prof. Dr. I. Peschel

Summary

Proceeding from the work of LANDAUER(1970) and ANDERSON ET. AL. (1980) it was at the beginning of the 1980's when the investigation of the scattering at 1D disordered systems moved into the center of interest of a small community of physicists. Based on a consideration, which goes back to LANDAUER(1970) and is sketched in appendix A, it is claimed that the specific resistance of systems, which may be described by the 1D Schrödinger equation, is, at $T = 0K$, determined only by the proportion of reflected to transmitted current.

As a rule as far as the investigation of disordered systems is concerned one is not interested in the features of *one* special realization but in their ensemble average.

Based upon a multitude of works, which I will cite within the running text, I followed the goal to gain **exact** expressions for the averaged values and probability distributions of **all** in the investigation of the scattering solution of the 1D Schrödinger equation interesting quantities. Apart from the gain of exact expressions, **simplicity** and **lucidity** of the derivation and last but not least **evaluability** of the same were in the center of interest. It has been tried, merely from the structure of the gained equations, independent of concrete models of disorder, to arrive at as many statements as possible about disordered systems, that means to classify disordered systems for their possible behaviour and to give criteria for the respective class membership. The results of my efforts referring thereto may be found in the chapters 2-4.

First and foremost I establish in a somewhat extensive Introduction/ Survey the relation to a part of the rich number of works, which have already been published in this field of problems.

In the 5th and last chapter of this work I give a solution for the problem of the resistance at high number density per wavenumber raised by ERDÖS & HERNDON(1982) and picked up by FELDERHOF & FORD(1986).

The reproduction of one section and two further chapters had to be dispensed for a lack of time.

In a further section of the 3rd chapter equivalences with and between older works should have been shown.

In a 6th chapter it was planned to put down in writing concrete results for the probability distributions of the resistance for the limiting case of *gaussian white noise* type potentials, which I investigated jointly with Prof. I. Peschel, as well as for the Landauer limes (s. IV.4).

A 7th chapter, mainly basing upon the results of the 4th chapter, should have shown, if, and if true, how it is possible to get within Landauer's model a behaviour of the average resistance differing from the Landauer behaviour or even a linear growth of the average resistance.

I want to point out that all problems which may be reduced to a product of

random matrices may be treated in the same manner.

Table of contents

List of figures	vi
List of tables	viii
1 Introduction/Survey	1
2 Basic concepts of the scattering problem	9
2.1 Features and parametrization of the transfer matrix as well as the scattering solution	9
2.2 The chain of atoms and its partition	18
2.3 Transfer matrix for rectangular and δ -potential	20
2.4 Transfer matrix for finit-periodic potentials	25
3 How to average arbitrary functions of the resistance:	29
3.1 The problem of averaging	29
3.2 The analytic representations of $SU(1,1)$	30
3.3 Finit-dimensional representations, Legendre polynoms	34
3.4 Unitary representations, spectral analysis, conical functions, probability distribution	39
4 Explicit formulae: The problem of the Nth power of a matrix	48
4.1 Introduction	48
4.2 Cauchy's integral formula	49
4.3 A simple condition for the occurence of λ_{\max} in the $(0,0)$ -matrix element	51
4.4 Special cases for \mathbf{A}^N	52
4.5 The characteristics of growth with degeneracy of the eigenvalues and linear resistance	55
4.6 Bounds for the eigenvalues which occur in the $(0,0)$ -matrix element	63
5 The resistance at high density of scatterers	67
5.1 Introduction	67
5.2 Probability distributions	69

5.3	Averaging and optical potential	71
5.4	Statistical properties of the resistance in the limit $N \rightarrow \infty, \langle L \rangle_N = konst., U_{opt.} = konst.$	73
5.5	Statistical properties of the resistance for $N \rightarrow \infty, \langle L \rangle_N = konst.$	75
5.6	Remarks	77
A	Landauer's formula	81
B	Simple conclusions from representation theory	83
	Bibliography	85
	Acknowledgements	89
	Read papers	91

List of figures

1.1	From the left a wave ψ_i hits a chain of chaotic obstacles, a part ψ_r is reflected, another part ψ_t passes, is transmitted.	2
2.1	“Localised” potential.	10
2.2	Scattering by 2 isolated potential hills.	18
2.3	Possible partition of a potential hill.	19
2.4	Partition of the potential hill of two atoms.	20
2.5	Scattering of electrons with the energy $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ by a rectangular potential.	21
2.6	Scattering by a regular array of N identical rectangular potentials with the fixed distance a	25
5.1	N δ -potentials of strength V_δ distributed onto a length element with the fixed length L	67

List of tables

2.1	Behaviour of the resistance depending on the location of the energy of the impinging electrons in the spectrum.	28
4.1	All possible cases of non-exponential growth of the resistance for 2 EV $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$	59
4.2	All possible cases of non-exponential growth of the resistance for all 3 EV $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 1$	60
4.3	All possible cases of non-exponential growth of the resistance for 1 EV $\lambda_1 = 1$	61
4.3	Continuation	62

1

Introduction/Survey

Schon früh wurde man gewahr, daß die elektrischen Transporteigenschaften von Metallen bei Unordnung der Atome qualitativ keine Änderung erfahren [s. ERDÖS & HERNDON(1982) und Referenzen darin sowie ASHCROFT & MERMIN(1976), p.309-310]. Dies gilt sowohl für thermische, d.h. durch Phononenanregung als auch für statische, d.h. durch Versetzung oder verschiedene Konstituenten (Legierungen) bedingte, Unordnung. Lediglich der Restwiderstand würde bei perfekter Periodizität verschwinden. Ansonsten zeigen auch flüssige Metalle einen linear mit der Länge wachsenden Widerstand, und es nicht mehr offensichtlich, daß man eine Flüssigkeit als kleine Störung eines Einkristalls auffassen kann, wie man dies üblicherweise bei der Berechnung der Leitfähigkeiten verunreinigter Metalle annimmt.

Wie immer besteht daher der Wunsch, exakt lösbare Modelle zu untersuchen. Dazu muß man in der Regel Nachteile in Kauf nehmen, d.h. man muß Modelle betrachten, von denen man a priori nicht weiß, inwieweit sie reale physikalische Systeme beschreiben. Der große Erfolg des Kronig-Penney-Modells [KRONIG & PENNEY(1931)] bei der Erklärung der Bandstruktur in Kristallen, legt es nahe auch die elektrische Leitfähigkeit von Metallen in einem 1D Modell zu beschreiben. Einem dieser Modelle, dem Landauer-Modell [LANDAUER(1970)], ist diese Untersuchung gewidmet.

Dazu betrachten wir zunächst die Streuung von Elektronen in 1D, an dem durch die Atomrümpfe erzeugten effektiven Potential [Bild (1.1)]. Es scheint offensichtlich, daß die in Bild (1.1) skizzierte Streuung von Elektronen etwas mit dem *elastischen* Anteil des elektrischen Widerstandes zu tun haben muß. Kommt nur ein geringer Teil der einlaufenden Welle durch, so wird der Widerstand groß sein und umgekehrt. Zusätzlich weiß man empirisch (s. a. Kapitel 2.4), daß Transmissionsmaxima erlaubten Zuständen entsprechen.

Es bereitet allerdings einige Schwierigkeiten, diese intuitiv erwartete Ver-



Figure 1.1 : From the left a wave ψ_i hits a chain of chaotic obstacles, a part ψ_r is reflected, another part ψ_t passes, is transmitted.

knüpfung zu quantifizieren. Die ersten, relativ einfachen Überlegungen hierzu wurden von LANDAUER(1970) angestellt und sind im Anhang A wiedergegeben. Landauer fand, daß bei $T = 0K$ der Widerstand Ω gemäß

$$\Omega = \pi \frac{\hbar}{e^2} \rho \quad (1.1)$$

mit dem Verhältnis von Reflexion $|r|^2$ zu Transmission $|t|^2$

$$\rho := \frac{|r|^2}{|t|^2} \quad (1.2)$$

verknüpft ist. \hbar ist dabei das Plancksche Wirkungsquantum, e die Elementarladung und $\pi\hbar/e^2 \approx 12000\Omega$.

In der Folgezeit wurde, angefangen mit der Arbeit von ANDERSON et. al.(1980) über BÜTTIKER et. al.(1985), LANDAUER(1987) und STONE & SZAFER(1988), um nur einige Stationen zu nennen, versucht, die **Landauer-Formel** (1.1) auf ein besseres Fundament zu stellen.

Auch wenn ich diesen Überlegungen etwas distanziert gegenüberstehe, so ist doch die Streuung von Wellen in 1D ungeordneten Systemen ein höchst interessantes Problem, wobei ich darauf hinweisen möchte, daß das 1D Streuproblem auch bei der Ausbreitung von Phononen, bei der Wärmeleitung und bei der Ausbreitung von Lichtwellen in Medien mit statistisch variierendem Brechungsindex Verwendung findet, d.h. grundsätzlich bei allen Phänomenen, die durch 1D Wellengleichungen beschrieben werden können. Den interessierten Leser verweise ich hierzu auf die Übersichtsartikel von ISHII(1973) und JOHN(1988).

Vereinfachen wir jetzt in Verbindung mit (1.1) und (1.2) die Sprechweise und bezeichnen ρ als (dimensionslosen) Widerstand. Dann taucht im Zusammenhang

mit Landauers Formel folgendes Problem auf:

Bei ungeordneten Systemen ist man in der Regel nicht an den speziellen Eigenschaften eines Systems, sondern an Mittelwerten über viele Systeme interessiert. LANDAUER(1970) selbst fand nun unter vereinfachten Annahmen, dem sogenannten **Landauer-Limes**, den ich in IV.3 erläutern werde, daß das Ensemble-Mittel des Widerstandes $\langle \rho \rangle_N$ exponentiell mit der Anzahl N der Streuer wächst, d.h.

$$\langle \rho \rangle_N \sim e^{\alpha N}. \quad (1.3)$$

Schlimmer noch, später zeigte sich [s. z.B. ERDÖS & HERNDON(1982)], was bereits von LANDAUER(1970) vermutet worden war, daß nämlich auch die relative Varianz $\sigma_{\rho,N}^2$ des Widerstandes exponentiell divergiert, in Formeln

$$\sigma_{\rho,N}^2 = \frac{\langle \rho^2 \rangle_N - \langle \rho \rangle_N^2}{\langle \rho \rangle_N^2} \sim e^{\alpha' N}. \quad (1.4)$$

Dies bedeutet, daß man bei der Messung von ρ an verschiedenen Systemen desselben Ensembles sehr verschiedene Werte finden würde, die in der Regel stark vom Mittelwert $\langle \rho \rangle_N$ abweichen. Der mittlere Widerstand ist daher keine typische Größe, die man in einem Experiment an einem bestimmten System messen würde.

Das sich in (1.3) und (1.4) ausdrückende **Landauer-Verhalten** des Widerstandes bereitet einiges Kopfzerbrechen und wirft Fragen auf. An erster Stelle steht die Frage:

Ist das Landauer-Verhalten typisch für 1D Systeme oder nur ein Ausdruck mangelhafter Modelle und/oder Rechenkunst?

Die Antwort ist:

Die überwiegende Mehrheit aller Autoren, die auf diesem Gebiet tätig waren und/oder es noch sind¹, glaubt, daß das Landauer-Verhalten typisch ist. Soweit mir bekannt ist, üben einzig ERDÖS & HERNDON(1982) in ihrem Übersichtsartikel Kritik und melden Zweifel an.

Im Gegenzug dazu gibt es, soweit ich es überblicke, keinen Beweis für diese Annahme.

Zur Klärung dieser Situation bedarf es zunächst exakter Formeln zur Beschreibung der Streuung in einer Dimension, die die zugrunde liegende physikalische Situation berücksichtigen. Hier wurde bereits viel Arbeit geleistet.

Prinzipiell ist man an der Berechnung der Mittelwerte der Momente des Widerstandes ρ , des Transmissions- und Reflexionsvermögens $|t|^2$ und $|r|^2$ sowie

¹Seit der Arbeit von LANDAUER(1970) sind über 300 Arbeiten erschienen

deren Kehrwerte interessiert. Allergrößtes Interesse besitzt jedoch die Berechnung der Verteilungsfunktionen dieser Größen, z.B. die des Widerstandes $p_N(\rho)$, die allein ja bei einem eventuellen Experiment gemessen würden. Nachdem ANDERSON et. al.(1980) feststellten, daß $\langle \ln(1 + \rho) \rangle_N$ im Landauer-Limes linear mit der Anzahl der Streuer skaliert, und wichtiger, daß die relative Varianz von $\ln(1 + \rho)$ im thermodynamischen Limes gegen Null geht und damit $\langle \ln(1 + \rho) \rangle_N$ meßbar ist, ist man auch stark an der Berechnung der Mittelwerte der Momente von $\ln(1 + \rho)$ sowie dessen Verteilungsfunktion $p_N[\ln(1 + \rho)]$ interessiert.²

Zur Berechnung dieser Größen sind mir 3 verschiedene Methoden bekannt. Die erste benutzt Diagrammtechniken und ist vertreten durch die Arbeiten von BERENZINSKII(1974), darauf aufbauend MELNIKOV(1980a,b)³, dann durch die Arbeit von ABRIKOSOV & RYZHKIN(1978) und darauf aufbauend ABRIKOSOV(1981) sowie auch die Arbeit von KREE & SCHMID(1981). Ein Nachteil dieser Arbeiten ist, daß sie ausschließlich Potentiale vom Typ *Gaußschen weißen Rauschen* verwenden. Bei diesem Potentialtyp gibt es keinen Abstand benachbarter Atome, so daß die damit gewonnenen Aussagen a priori nicht auf realistischere Modelle übertragen werden können. Allerdings gelang es ABRIKOSOV(1981) für diesen Potentialtyp, die Verteilungsfunktion des Kehrwertes des Transmissionsvermögens $p_N(|t|^{-2})$ zu berechnen.

Die zweite Methode versucht Differentialgleichungen vom Typ der Fokker - Planck-Gleichung für die Mittelwerte der obengenannten Momente und deren Verteilungsfunktionen herzuleiten und fungiert unter dem Stichwort *invariante Einbettung*. Diese Methode ist vertreten durch die Arbeiten von KUMAR(1984), HEINRICHS(1986), JAYANAVAR(1987) und RAMMAL & DOUCOT(1987). Auch diese Autoren müssen auf Potentiale vom Typ *Gaußschen weißen Rauschen* zurückgreifen, um zu expliziten Lösungen zu gelangen. Die damit gefundenen Ergebnisse stimmen mit denen von ABRIKOSOV(1981) überein. Man erkennt auch die nahe Verwandtschaft beider Techniken, wenn man die Diagramme von RAMMAL & DOUCOT(1987) mit denen von BERENZINSKII(1974) vergleicht. Ebenso möchte ich noch die Arbeit von WELLER & KASNER(1988) erwähnen, die ein diskretes Analogon zur Technik der invarianten Einbettung bildet und zwischen beiden Techniken steht.

Die dritte und letzte Methode, auf die sich meine Arbeit stützt, ist der Transfermatrixformalismus. Ein großer Vorteil des Transfermatrixformalismus ist es, daß dieser, wie wir in II.2 sehen werden, auf natürliche Weise die Zerlegung des

²Vorsicht ist bei der Interpretation des Sachverhaltes geboten, daß die relative Varianz von $\ln(1 + \rho)$ gegen Null konvergiert. Dies bedeutet lediglich, daß die Verteilungsfunktion irgendwie, aber nicht notwendigerweise gaußförmig, um $\langle \ln(1 + \rho) \rangle_N$ konzentriert ist. Eine Approximation der wahren Verteilungsfunktion von $\ln(1 + \rho)$ durch eine Normalverteilung muß auch nicht besonders aussagekräftig sein, da sich viele Verteilungsfunktionen durch Normalverteilungen approximieren lassen. Eine Normalverteilung von $\ln(1 + \rho)$ kann nur durch eine Berechnung von $p_N[\ln(1 + \rho)]$ im Einzelfall nachgewiesen werden.

³Später [MELNIKOV(1981,1982)] verwendet Melnikov dann den Transfermatrixformalismus

zugrunde liegenden physikalischen Problems in atomare Einheiten wiedergibt. Ein Nachteil des Transfermatrixformalismus blieb bisher, daß es nicht möglich schien, die Mittelwerte aller obengenannter Größen zu berechnen. Studiert man die Arbeiten von ABRAHAMS & STEPHEN(1980), ERDÖS & HERNDON(1982) und FELDERHOF(1986), so gewinnt man den Eindruck, daß man lediglich die Mittelwerte von Momenten des Widerstandes $\langle \rho^m \rangle_N$ und des Kehrwertes des Transmissionsvermögens $\langle |t|^{-2m} \rangle_N$, $m \in \mathbb{N}$ bestimmen kann, wobei es zusätzlich große Schwierigkeiten zu bereiten scheint, für $m > 2$ explizite Formeln zu gewinnen.

PENDRY(1982) zeigte, wie man für alle ganzzahligen Momente von ρ explizite Formeln gewinnen kann. Dies wurde dann von KIRKMAN & PENDRY(1984a) auf alle Momente von $1/t^\nu$, $\nu \in \mathbb{C}$ ausgedehnt. Diese Momente besitzen jedoch keine physikalische Bedeutung und entscheidend ist die Arbeit von KIRKMAN & PENDRY(1984b), wo es beiden Autoren gelingt, exakte Ausdrücke⁴ für $\langle |t|^{2\nu} \rangle_N$, $\nu \in \mathbb{C}$ abzuleiten. Die von Pendry bzw. Kirkman & Pendry benutzte Vorgehensweise findet man auch noch einmal bei PENDRY(1988) zusammengefaßt.

Die Ableitung der Ergebnisse von PENDRY(1982,1988) und KIRKMAN & PENDRY(1984a,b) ist jedoch sehr umständlich und schwer nachvollziehbar. Insbesondere bleibt die mathematische Rechtfertigung für das Verfahren der analytischen Fortsetzung unklar, was mit ein Hauptgrund für die bisher geringe Akzeptanz dieser Arbeiten sein dürfte. Außerdem waren beide Autoren nicht in der Lage, für die anderen obengenannten Momente sowie deren Verteilungsfunktionen exakte Formeln anzugeben. Allerdings möchte ich bemerken, daß vermutlich der vorzeitige Tod einer der beiden Autoren (Kirkman) daran Schuld ist, daß die Situation bis heute so unbefriedigend blieb.

Licht in die Arbeiten von PENDRY(1982,1988) und KIRKMAN & PENDRY(1984a,b) gelangt jedoch beim Studium der Arbeit von MELLO(1986). Dieser benutzte als erster systematisch die Darstellungstheorie der Gruppe $SU(1,1)$, zu der die Transfermatrizen gehören, um einen zentralen Grenzwertsatz für die Gruppe $SU(1,1)$ zu beweisen. Wäre ihm dies gelungen, so hätte ihm dies die Verteilungsfunktion des Widerstandes $p_N(\rho)$ und über die Stromerhaltung (s. II.1) auch aller anderen obengenannten Größen geliefert, womit das in dieser Arbeit untersuchte Problem vollständig gelöst gewesen wäre.

Der erste wichtige Teil meiner Arbeit besteht nun darin, daß ich im 3-ten Kapitel zeige, wie die von MELLO(1986) eingeführte Technik der *harmonischen Analyse auf Gruppen*, kurz **Spektralanalyse**, dazu benutzt werden kann, für alle obengenannten Mittelwerte einschließlich deren Verteilungsfunktionen exakte Formeln im Transfermatrixformalismus abzuleiten. Ich werde dabei auf die Ergebnisse der Darstellungstheorie von Gruppen zurückgreifen und im Rahmen der analytischen Darstellungen der $SU(1,1)$ wird sich zeigen, daß die von KIRK-

⁴Der von ihnen gefundene Ausdruck für $\langle |t|^{2\nu} \rangle_N$, $\nu \in \mathbb{C}$ ist exakt, wie ich in III.4 zeigen werde, da deren Gl.(21) für alle und nicht nur für kleine λ gültig ist.

MAN & PENDRY(1984a,b) durch analytische Fortsetzung gewonnenen Resultate richtig sind. Außerdem wird von diesem Standpunkt aus die Berechnung der ganzzahligen Momente des Widerstandes sowie des Kehrwertes des Transmissionsvermögens in neuem Licht erscheinen.

Das anschließende 4-te Kapitel handelt von der Berechnung der N -ten Potenz, oder allgemeiner von Funktionen, linearer Operatoren. Dies ist notwendig, stellt es sich im 3-ten Kapitel doch heraus, daß im Rahmen des Transfermatrixformalismus die Berechnung der Mittelwerte der obengenannten Momente zu einem wesentlichen Teil auf die Berechnung des $(0,0)$ -Matrixelementes(ME) der N -ten Potenz einer im allgemeinen unendlichdimensionalen Matrix zurückgeführt wird.

Für endlichdimensionale Matrizen gebe ich zuerst die exakte, allgemeine und explizite Formel an. Dann betrachte ich einige Spezialfälle in denen die allgemeine Formel besonders einfache Gestalt annimmt. Nach einer einfachen Bedingung dafür, daß der größte Eigenwert(EW) im $(0,0)$ -ME der N -ten Potenz, der für den Widerstand maßgeblichen gemittelten 3D Darstellung, vorkommt, untersuche ich von der allgemeinen Formel ausgehend das mögliche Wachstumsverhalten des Widerstandes. Dabei wird sich zeigen, daß neben dem bereits bekannten [s. ERDÖS & HERNDON(1982)] exponentiellen Anstieg und einem Oszillieren des Widerstandes in speziellen Fällen auch noch **lineares(!)** und quadratisches Wachstum möglich sind.

Zum Schluß gebe ich auch noch Schranken für die EW an, die im $(0,0)$ -ME vorkommen können, wobei ich zu dem vielleicht bemerkenswertesten Resultat dieser Arbeit gelange, daß nämlich immer dann exponentielles Wachsen des mittleren Widerstandes bzw. von dessen Momenten eintritt, wenn **“Eins” nicht EW** der zugehörigen in die N -te Potenz zu erhebenden Matrix ist. Dieses Ergebnis ist das Analogon, des von ISHII(1973) in das engverwandte Problem der *Lokalisierung von Eigenzuständen in 1D* eingeführten Furstenberg Theorems [FURSTENBERG(1963)].

Abschließend bemerke ich, daß es mit Hilfe des in den Kapiteln 2-4 aufgezeigten Weges möglich sein sollte, in Zukunft eine Antwort auf die eingangs gestellte Frage zu finden, ob das von Landauer gefundene Verhalten typisch für 1D Systeme ist.

Im 5-ten Kapitel wende ich mich dann der Untersuchung eines Modelles zu, bei dem auf einem Längenelement fester Länge eine variable Anzahl von Atomen untergebracht ist. Bei diesem Modell, so ERDÖS & HERNDON(1982), soll es, nach numerischen Studien von EBERLE & ERDÖS(1981), bei fester Länge und wachsender Konzentration der Streuer eine Abweichung vom Landauer-Verhalten geben. In diesem Limes soll $\langle \rho \rangle_N \sim e^{\alpha\sqrt{N}}$ wachsen und die relative Varianz $\sigma_{\rho,N}$ gegen Null gehen.

Das gleiche Modell und der gleiche Limes untersuchte mit gleichem Ergebnis, teils analytisch, teils numerisch, EBERLE(1982) in seiner Dissertation, die jedoch unveröffentlicht blieb.

Ein paar Jahre später studierten FELDERHOF & FORD(1986) dieses Modell. Sie entwickelten eine allgemeine Methode, wie man Systeme fester Länge mittelt,

konnten für den Grenzwert hoher Dichte der Streuer bezogen auf die Wellenlänge aber nur den charakteristischen Exponenten bestimmen mit dem $\langle \rho \rangle_N$ bzw. $\langle \rho^2 \rangle_N$ anwächst, wobei sie ebenfalls Übereinstimmung mit den Angaben von ERDÖS & HERNDON(1982) fanden. Sie gaben aber erstmals eine Vermutung über das zu erwartende Endresultat an, die ich durch eine einfache Rechnung beweise.

2

Basic concepts of the scattering problem

2.1 Features and parametrization of the transfer matrix as well as the scattering solution

Die Ausbreitung und Streuung von Wellen in einer Dimension läßt sich sehr elegant und übersichtlich mit Hilfe der sog. Transfermatrix beschreiben. In diesem ersten Abschnitt führe ich diese Matrix ein und stelle ihre Eigenschaften zusammen. Die Überlegungen dieses und des nächsten Abschnitts findet man, abgesehen von der Wahl der Parametrisierung, bereits in dem Übersichtsartikel von ERDÖS & HERNDON(1982), sind aber, um einer einheitlichen Behandlung und Notation willen, auf die ich in den folgenden Abschnitten und Kapiteln häufig zurückgreifen werde, nötig. Kleinere Abweichungen merke ich an.

Betrachten wir jetzt zunächst die allgemeine Lösung der (zeitunabhängigen) Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi, \quad (2.1)$$

für Potentiale der Art

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < x_1 \\ \text{bel.} & x_1 \leq x \leq x_2 \\ 0 & x > x_2 \end{cases}, \quad (2.2)$$

von denen ich eines in Bild (2.1) skizziert habe.

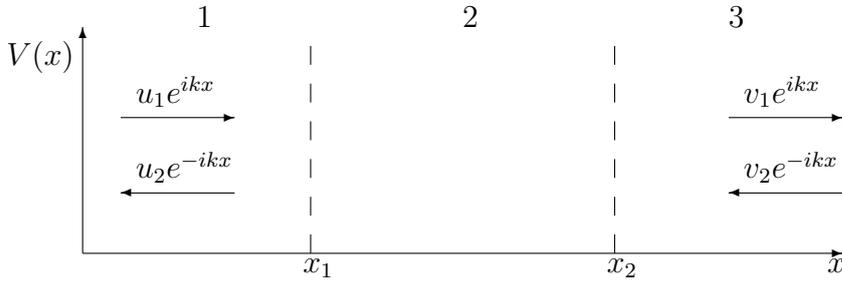


Figure 2.1 : “Localised” potential.

Für derartige Potentiale hat die Lösung von (2.1) die Gestalt

$$\psi(x) = \begin{cases} u_1 e^{ikx} + u_2 e^{-ikx} & x < x_1 \\ \text{potentialabhängig} & x_1 \leq x \leq x_2 \\ v_1 e^{ikx} + v_2 e^{-ikx} & x > x_2 \end{cases} \quad (2.3)$$

mit $u_i, v_i \in \mathbb{C}$ und $E = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Wir sind nur an der Lösung außerhalb des Potentials interessiert, genauer gesagt am Zusammenhang der Amplituden $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ und $\mathbf{v} = (v_1, v_2)$ links und rechts vom Potential. Da die Schrödingergleichung linear und von 2-ter Ordnung ist, existieren genau 2 linear unabhängige Lösungen, und die Abhängigkeit der Amplituden \mathbf{u} und \mathbf{v} findet man durch Integration der Schrödingergleichung (2.1). Einmaliges Integrieren liefert

$$\psi'(x) = \int \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi dx. \quad (2.4)$$

Wir sehen:

Ein stückweise stetiges Potential hat die Stetigkeit der ersten Ableitung der Wellenfunktion zur Folge. Lassen wir auch δ -Distributionen zu, weist $\psi'(x)$ an der Singularität einen durch (2.4) definierten Sprung auf. Erneute Integration liefert aber auch dann die Stetigkeit von $\psi(x)$ selber. Dies sind die üblichen Anschlußbedingungen, die einem den vom speziellen Potential abhängigen Zusammenhang der Amplituden liefern. Die durch

$$\mathbf{v} = \mathcal{T}(\mathbf{u}) \quad (2.5)$$

definierte Transferabbildung besitzt jedoch unabhängig vom Potential die folgenden

Eigenschaften:

1. \mathcal{T} ist linear. Wir sprechen daher im folgenden von der Transfermatrix und bezeichnen diese mit \mathbf{T} .

2. Die Transfermatrix \mathbf{T} hat die Eigenschaften

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma}_x^{-1} \mathbf{T}^* \boldsymbol{\sigma}_x, \quad (2.6)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_z = \mathbf{T}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{T} \quad (2.7)$$

und daher die Gestalt

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a^* \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

mit

$$\det \mathbf{T} = |a|^2 - |b|^2 = 1. \quad (2.9)$$

Dabei sind

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

die üblichen Pauli-Matrizen.

3. Verschieben wir den Koordinatenursprung um x_0 , d.h. gehen wir von einem Referenzsystem \mathbf{X} gemäß $x' = x - x_0$ in ein Referenzsystem \mathbf{X}' über und bezeichnen mit $\mathbf{T}_{\mathbf{X}}$ bzw. $\mathbf{T}_{\mathbf{X}'}$ die Transfermatrizen im System \mathbf{X} bzw. \mathbf{X}' , dann gilt

$$\mathbf{T}_{\mathbf{X}'} = e^{ikx_0 \boldsymbol{\sigma}_z} \mathbf{T}_{\mathbf{X}} e^{-ikx_0 \boldsymbol{\sigma}_z}. \quad (2.10)$$

Ein Verschieben des Potentials wird daher durch eine unitäre Transformation beschrieben.

4. Messen wir für symmetrische Potentiale die Transfermatrix in dem durch die Symmetrielinie vorgegebenen Referenzsystem, dann gilt zusätzlich zu (2.8)

$$\text{Re}(b) = 0. \quad (2.11)$$

Beweis:

1. \mathcal{T} ist eine unbekannte, aber **feste** Abbildung, so daß sowohl der Zusammenhang zwischen den Amplituden \mathbf{v}_1 und \mathbf{u}_1 einer Lösung ψ_1 als auch zwischen \mathbf{v}_2 und \mathbf{u}_2 einer anderen Lösung ψ_2 durch \mathcal{T} gegeben ist. In Formeln heißt dies

$$\mathbf{v}_1 = \mathcal{T}(\mathbf{u}_1),$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathcal{T}(\mathbf{u}_2).$$

Aufgrund der Linearität der Schrödingergleichung (2.1) bildet eine beliebige Linearkombination von Lösungen wieder eine Lösung. Für die Linearkombination $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ finden wir dann

$$\begin{aligned} c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 &= \mathcal{T}(c_1\mathbf{u}_1 + c_2\mathbf{u}_2) \\ &= \mathcal{T}(c_1\mathbf{u}_1) + \mathcal{T}(c_2\mathbf{u}_2) \\ &= c_1\mathcal{T}(\mathbf{u}_1) + c_2\mathcal{T}(\mathbf{u}_2). \end{aligned}$$

Insgesamt also

$$\mathcal{T}(c_1\mathbf{u}_1 + c_2\mathbf{u}_2) = c_1\mathcal{T}(\mathbf{u}_1) + c_2\mathcal{T}(\mathbf{u}_2)$$

$\forall c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ und $\forall \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \in \mathbb{C}^2$. Dies ist aber gerade die Definition der linearen Abbildung.^{1,2}

2. a) Da der Schrödingeroperator reell und linear ist, ist mit ψ auch ψ^* eine Lösung (Zeitumkehrinvarianz). Für die Koeffizienten \mathbf{u}, \mathbf{v} von ψ und $\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{v}}$ von ψ^* gilt

$$\mathbf{v} = \mathbf{T}\mathbf{u}, \quad (2.12)$$

$$\tilde{\mathbf{v}} = \mathbf{T}\tilde{\mathbf{u}}. \quad (2.13)$$

Da man von ψ lediglich zu ψ^* übergegangen ist, hängen $\tilde{\mathbf{v}}, \tilde{\mathbf{u}}$ mit \mathbf{v}, \mathbf{u} zusammen [s.(2.3)].

$$\left. \begin{aligned} \tilde{\mathbf{u}} &= \sigma_x \mathbf{u}^* \\ \tilde{\mathbf{v}} &= \sigma_x \mathbf{v}^* \end{aligned} \right\}, \quad (2.14)$$

wobei σ_x die einzelnen Komponenten vertauscht. Einsetzen von (2.14) in (2.13) liefert

$$\mathbf{v} = \sigma_x^{-1} \mathbf{T}^* \sigma_x \mathbf{u}.$$

Der Vergleich mit (2.12) zeigt

$$(\mathbf{T} - \sigma_x^{-1} \mathbf{T}^* \sigma_x) \mathbf{u} = 0$$

$\forall \mathbf{u} \in \mathbb{C}^2$, so daß nur

$$\mathbf{T} = \sigma_x^{-1} \mathbf{T}^* \sigma_x \quad (2.15)$$

¹In Anlehnung an die Matrix-Schreibweise wird von nun an die Klammer um das Argument weggelassen.

²Der Beweis zu P1 bei ERDÖS & HERNDON(1982) ist insofern nicht richtig, da sie die Linearität der Transferabbildung annehmen. Eine lineare Abbildung hängt aber *per definitionem* nicht von den Vektoren ab, auf die sie wirkt. Sinnvoll ist daher nur der Beweis, daß die durch (2.5) definierte Transferabbildung linear ist.

möglich ist, woraus man (2.8) für die Matrixelemente (ME) von \mathbf{T} abliest.

b) Die Erhaltung des Wahrscheinlichkeitsstromes (Konstanz der Wronski- Determinante) besagt

$$j = \frac{i}{\hbar} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = \text{konst.} \quad (2.16)$$

Setzen wir (2.3) in (2.16) ein und bezeichnen mit (\cdot, \cdot) das gewöhnliche Skalarprodukt zweier Vektoren, so läßt sich der Strom rechts $j_{\mathbf{v}}$ und links $j_{\mathbf{u}}$ des Potentials folgendermaßen schreiben

$$\begin{aligned} j_{\mathbf{u}} &= \frac{2k}{\hbar} (\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{u}), \\ j_{\mathbf{v}} &= \frac{2k}{\hbar} (\mathbf{v}, \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{v}). \end{aligned}$$

(2.16) bedingt

$$j_{\mathbf{u}} = j_{\mathbf{v}},$$

und daher gilt

$$\begin{aligned} (\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{u}) &= (\mathbf{v}, \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{v}) \\ &= (\mathbf{T}\mathbf{u}, \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{T}\mathbf{u}) \\ &= (\mathbf{u}, \mathbf{T}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{T}\mathbf{u}). \end{aligned}$$

Aus der ersten und der letzten Zeile folgt

$$(\mathbf{u}, (\boldsymbol{\sigma}_z - \mathbf{T}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{T})\mathbf{u}) = 0. \quad (2.17)$$

Da $\mathbf{u} \in \mathbb{C}^2$ beliebig ist, erzwingt die letzte Gleichung³

$$\boldsymbol{\sigma}_z = \mathbf{T}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{T}. \quad (2.18)$$

Aus den sich aus (2.18) ergebenden Gleichungen für die ME und (2.8) folgt

$$\det \mathbf{T} = 1.$$

3. Die Wellenfunktion im alten Referenzsystem ist

$$\psi(x) = \begin{cases} u_1 e^{ikx} + u_2 e^{-ikx} & x < x_1 \\ \text{potentialabhängig} & x_1 \leq x \leq x_2 \\ v_1 e^{ikx} + v_2 e^{-ikx} & x > x_2 \end{cases}, \quad (2.19)$$

im neuen

$$\psi(x') = \begin{cases} u_1 e^{ikx_0} e^{ikx'} + u_2 e^{-ikx_0} e^{-ikx'} & x' < x_1 - x_0 \\ \text{potentialabhängig} & x_1 - x_0 \leq x' \leq x_2 - x_0 \\ v_1 e^{ikx_0} e^{ikx'} + v_2 e^{-ikx_0} e^{-ikx'} & x' > x_2 - x_0 \end{cases},$$

³(2.18) ist eine nicht triviale Folgerung aus (2.17) und für $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^2$ falsch!

woraus wir für den Zusammenhang der alten mit den neuen Amplituden

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{v}' &= e^{ikx_0} \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{u} \\ \mathbf{u}' &= e^{ikx_0} \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{u} \end{aligned} \right\} \quad (2.20)$$

ablesen. Die Transfermatrizen im alten bzw. im neuen Referenzsystem sind durch

$$\mathbf{v} = \mathbf{T}_X \mathbf{u} \quad (2.21)$$

und

$$\mathbf{v}' = \mathbf{T}_{X'} \mathbf{u}'$$

definiert. Einsetzen von (2.20) in (2.21) liefert sofort die Behauptung.

4. Für symmetrische Potentiale ist die Schrödingergleichung (2.1) invariant unter Spiegelung an der Symmetrielinie. Liegt die Symmetrielinie im Ursprung, dann heißt das, daß mit $\psi(x)$ auch $\psi(-x)$ eine Lösung der Schrödingergleichung (2.1) ist. Die Transfermatrix hängt nur von der Gestalt des Potentials ab und ist daher invariant unter Spiegelung. Sind die Amplituden rechts und links des Potentials \mathbf{v} und \mathbf{u} der Wellenfunktion $\psi(x)$ durch

$$\mathbf{v} = \mathbf{T} \mathbf{u}$$

verknüpft, dann gilt für die Amplituden von $\psi(-x)$

$$\boldsymbol{\sigma}_x \mathbf{u} = \mathbf{T} \boldsymbol{\sigma}_x \mathbf{v},$$

und beides zusammen ergibt

$$(\mathbf{T} \boldsymbol{\sigma}_x)^2 = \mathbf{I}, \quad (2.22)$$

wobei \mathbf{I} die Einheitsmatrix bezeichnet. Die sich aus (2.22) in Verbindung mit (2.8) ergebenden Bedingungen zeigen die Behauptung.

Bemerkung:

1. Es ist jetzt gezeigt, daß jedes \mathbf{T} die Gestalt $\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a^* \end{pmatrix}$ mit $(a, b) \in \mathbb{C}$ und $|a|^2 - |b|^2 = 1$ hat. Jedes \mathbf{T} gehört damit zur $SU(1,1)$, der Gruppe der speziellen unitären Matrizen in 2D hyperbolischer Geometrie. Nicht gezeigt ist, daß jede Matrix der obigen Gestalt auch wirklich eine Transfermatrix ist, d.h. zu einer Schrödingergleichung gehört. Es könnte $\{\mathbf{T}\} < SU(1,1)$ gelten. Physikalisch würde dies eine weitere Erhaltungsgröße bedeuten. Dies ist aber nicht der Fall. Man zeigt:

Die Menge aller zu allen Rechteckpotentialen gehörenden \mathbf{T} überdeckt $SU(1,1)$.

Weiter gilt:

$SU(1,1)$ ist eine Darstellung des Potentialraumes. Die räumlich geordnete Summe zweier Potentiale wird auf das Produkt zweier Transfermatrizen abgebildet.

2. Aus (2.15) folgt

$$\det \mathbf{T}^* = \det \mathbf{T} \Leftrightarrow \det \mathbf{T} \in \mathbb{R}.$$

Aus (2.16) folgt

$$|\det \mathbf{T}| = 1,$$

also $\det \mathbf{T} = \pm 1$, ohne auf die ME von \mathbf{T} zurückzugreifen.

Jetzt wenden wir uns zu der Frage einer geeigneten

Parametrisierung

Dazu betrachten wir die Gruppe $SU(2)$ der gewöhnlichen unitären Matrizen in 2D. Für jedes $\mathbf{U} \in SU(2)$ gilt

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

mit

$$\det \mathbf{U} = |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (2.24)$$

Vergleicht man (2.23) mit (2.8), so stellt man fest, daß sich $\mathbf{T} \in SU(1,1)$ und $\mathbf{U} \in SU(2)$ nur durch das Minuszeichen vor dem b^* unterscheiden. Es liegt daher nahe, $SU(1,1)$ analog $SU(2)$ zu parametrisieren. Wegen der Isomorphie

$$SO(3) \cong SU(2)/\{\mathbf{I}, -\mathbf{I}\} \quad (2.25)$$

wird $SU(2)$ gewöhnlich mit den Euler-Winkeln parametrisiert. Jedes $\mathbf{U} \in SU(2)$ schreibt sich damit [s. VILENKIN(1969),Ch.III,§1]

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}} & \\ & e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & i \sin \frac{\theta}{2} \\ i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\psi}{2}} & \\ & e^{-i\frac{\psi}{2}} \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

wobei $0 \leq \varphi < 2\pi$, $0 < \theta < \pi$, $-2\pi \leq \psi < 2\pi$ die 3 Euler-Winkel sind.

Für jedes $\mathbf{T} \in \text{SU}(1,1)$ erhält man nun eine zu (2.26) analoge Parametrisierung, wenn man $\tau = i\theta$ setzt [s. VILENKIN(1969),Ch.VI,§1.3]

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}} & \\ & e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh \frac{\tau}{2} & \sinh \frac{\tau}{2} \\ \sinh \frac{\tau}{2} & \cosh \frac{\tau}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\psi}{2}} & \\ & e^{-i\frac{\psi}{2}} \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Für die ‘‘Euler-Winkel’’ gilt jetzt $0 \leq \varphi < 2\pi$, $0 < \tau < \infty$, $-2\pi \leq \psi < 2\pi$. Multipliziert man (2.27) aus

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \cosh \frac{\tau}{2} e^{i\frac{(\varphi+\psi)}{2}} & \sinh \frac{\tau}{2} e^{i\frac{(\varphi-\psi)}{2}} \\ \sinh \frac{\tau}{2} e^{-i\frac{(\varphi-\psi)}{2}} & \cosh \frac{\tau}{2} e^{-i\frac{(\varphi+\psi)}{2}} \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

so entnimmt man sofort den Zusammenhang zwischen den Euler-Winkeln und a, b aus (2.8)

$$\left. \begin{aligned} |a| &= \cosh \frac{\tau}{2} \\ |b| &= \sinh \frac{\tau}{2} \\ \arg(a) &= \frac{\varphi+\psi}{2} \\ \arg(b) &= \frac{\varphi-\psi}{2} \end{aligned} \right\}. \quad (2.29)$$

Wir wählen jedoch eine geringfügig andere Parametrisierung. Wir setzen

$$\left. \begin{aligned} \sqrt{\rho} &= \sinh \frac{\tau}{2} \\ \sqrt{1+\rho} &= \cosh \frac{\tau}{2} \end{aligned} \right\}. \quad (2.30)$$

Damit schreibt sich (2.27)

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}} & \\ & e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{1+\rho} & \sqrt{\rho} \\ \sqrt{\rho} & \sqrt{1+\rho} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\psi}{2}} & \\ & e^{-i\frac{\psi}{2}} \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

mit $0 \leq \varphi < 2\pi$, $0 < \rho < \infty$, $-2\pi \leq \psi < 2\pi$. ρ ist der in der Einleitung definierte dimensionslose Widerstand.

Streulösung

Um dies zu sehen, betrachten wir den schon in der Einleitung skizzierten Fall, daß eine Welle von links einfällt und ein Teil (r) durch das Potential reflektiert wird, ein anderer (t) durchgelassen wird, d.h. das Streuprobem in 1D. Dann gilt

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}, \mathbf{v} = \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Wenden wir uns als erstes der Stromerhaltung zu. Sie liefert uns die wichtigen Beziehungen

$$|r|^2 + |t|^2 = 1, \quad (2.32)$$

$$|r|^2 = \frac{\rho}{1 + \rho}, \quad (2.33)$$

$$|t|^2 = \frac{1}{1 + \rho}. \quad (2.34)$$

Diese Beziehungen sind deshalb so wichtig, gestatten sie es uns doch auf $|r|^2$, $|t|^2$ oder ρ allein zu beschränken. $|r|^2$ charakterisiert die Streuung ebenso gut wie $|t|^2$ oder ρ . Funktionen von $|r|^2$ und $|t|^2$ können wir als Funktionen von ρ ausdrücken. Merken wir uns:

Es genügt Funktionen von ρ zu betrachten!

Jetzt wollen wir noch die Einträge der Transfermatrix (2.8) durch die Streuamplituden ausdrücken. Dazu fassen wir die Transferrelation (2.5)

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}$$

als lineares Gleichungssystem für a und b auf. Dies ermöglicht die Symmetrie der Transfermatrix. Auflösen dieses Gleichungssystems ergibt unter Berücksichtigung der Stromerhaltung (2.32) für die Transfermatrix die Gestalt

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \frac{1}{t} & -\frac{r^*}{t} \\ -\frac{r}{t} & \frac{1}{t} \end{pmatrix}, \quad (2.35)$$

und damit die Erklärung für die von uns gewählte Parametrisierung. Aus (2.35) lesen wir nämlich

$$|b| = \left| \frac{r}{t} \right| = \sqrt{\rho} \quad (2.36)$$

und

$$|a| = \left| \frac{1}{t} \right| = \sqrt{1 + \rho} \quad (2.37)$$

ab.

2.2 The chain of atoms and its partition

Nachdem wir die Streuung an einem isolierten Potential behandelt haben, wenden wir uns dem Fall mehrerer Streuzentren zu. Betrachten wir zunächst zwei isolierte Potentialgebirge [Bild (2.2)]. Man kann sich vorstellen, daß jedes Gebirge ein Atom repräsentiert.

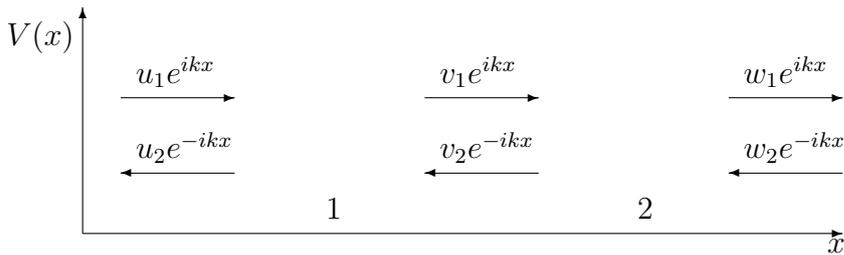


Figure 2.2 : Scattering by 2 isolated potential hills.

Wir fassen zuerst das Gebilde aus Atom 1 und Atom 2 als 1 Potential auf. Dann gilt wegen (2.5) und den Eigenschaften der Transferabbildung

$$\mathbf{w} = \mathbf{T}_{12} \mathbf{u}. \quad (2.38)$$

Jetzt vollziehen wir zuerst den Übergang bei Atom 1

$$\mathbf{v} = \mathbf{T}_1 \mathbf{u}, \quad (2.39)$$

und daraufhin den Übergang bei Atom 2

$$\mathbf{w} = \mathbf{T}_2 \mathbf{v}. \quad (2.40)$$

Fassen wir (2.39) und (2.40) zusammen und schauen auf (2.38), so bekommen wir

$$\mathbf{T}_{12} = \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1, \quad (2.41)$$

d.h.:

Die Gesamttransfermatrix ist das Produkt aus 2 Teiltransfermatrizen, die jeweils ein Potentialgebilde repräsentieren.

Analoges gilt natürlich für eine Kette aus N Potentialgebilden.

Jetzt ist es aber vollkommen unwesentlich, daß zwischen 2 aufeinanderfolgenden Potentialgebilden ein potentialfreier Raum existiert. Schließlich gilt die oben

angestellte Überlegung für eine potentialfreie Strecke beliebiger Länge. Daher muß sie auch in dem Limes gelten, wo diese Länge gegen Null geht. Der potentialfreie Raum stellt lediglich eine Gedanken*krücke* dar, die wir benötigen, da wir keine Integraldarstellung [s. z.B. WEST ET AL. (1980)] für die exakte Lösung der zugrunde liegenden Schrödingergleichung benutzt haben. Wir können daher ein beliebiges Potentialgebilde beliebig zerhacken [Bild (2.3)].

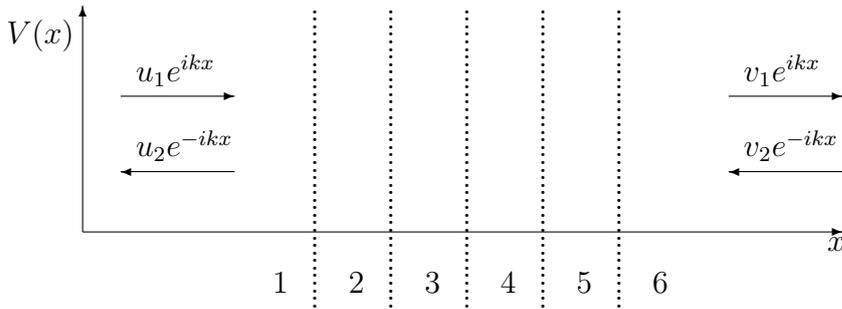


Figure 2.3 : Possible partition of a potential hill.

So gilt z.B. für die Gesamttransfermatrix des obigen Gebildes

$$\mathbf{T}_{\text{ges.}} = \mathbf{T}_6 \mathbf{T}_5 \mathbf{T}_4 \mathbf{T}_3 \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1. \quad (2.42)$$

Gebräuchlich ist jedoch nur eine

Zerlegung

Hierzu rufen wir unser Ziel in Erinnerung. Wir wollen ungeordnete Systeme beschreiben und haben prinzipiell 2 Arten von Unordnung. Die erste Art besteht darin, daß, aus welchen Gründen auch immer, Atome nicht an ihrem regulären Gitterplatz sitzen. Die zweite Art besteht darin, daß Fremdatome das Gitter stören. Die erste Art kann als **Abstandsunordnung**, die zweite als **Unordnung in der Gestalt des Potentials** charakterisiert werden. Die Transfermatrix für eine Kette von Atomen sollte daher so zerlegt werden, daß beide Arten von Unordnung deutlich hervortreten. Dies erweist sich aufgrund des Transformationsverhaltens (2.10) der Transfermatrix stets als möglich. Schauen wir uns dazu eine Kette aus 2 Atomen an [Bild (2.4)]. Die Gesamttransfermatrix dieser Kette ist gegeben durch

$$\mathbf{T}_{\text{ges.}} = \mathbf{A}_{2,x} \mathbf{A}_{1,x}. \quad (2.43)$$

$\mathbf{A}_{1,x}$ und $\mathbf{A}_{2,x}$ sind dabei die Transfermatrizen der einzelnen Atome bezogen auf das Referenzsystem \mathbf{X} . Die Wirkungsbereiche der Teiltransfermatrizen sollen durch die roten Balken begrenzt sein.

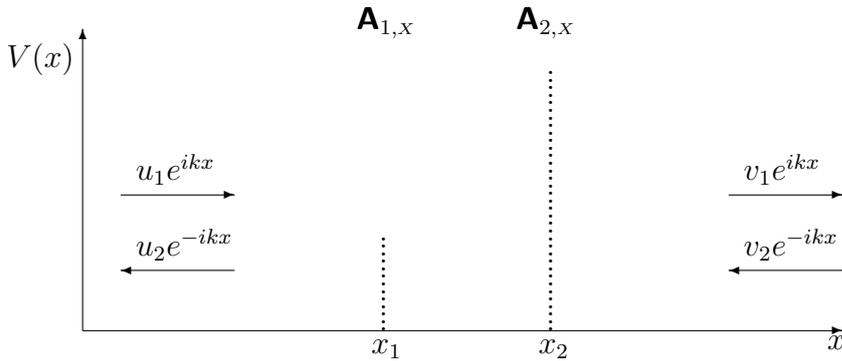


Figure 2.4 : Partition of the potential hill of two atoms.

Außerdem sind wir dabei davon ausgegangen, daß dem Ort des Atoms jeweils ein Maximum des Potentials entspricht. Das Minimum zu wählen wäre auch möglich. Generelle Annahme ist, daß der Ort eines Atoms stets eine physikalisch wohldefinierte, d.h. meßbare Größe ist.

Jetzt nutzen wir das Transformationsverhalten (2.10), drücken jede zu einem Atom gehörende Teiltransfermatrix in ihrem eigenen durch den Sitz des Atoms⁴ bestimmten Referenzsystem aus und bekommen

$$\mathbf{T}_{\text{ges.}} = e^{-ikx_2\sigma_z} \mathbf{A}_{2,x_2} e^{ik(x_2-x_1)\sigma_z} \mathbf{A}_{1,x_1} e^{ikx_1\sigma_z}. \quad (2.44)$$

Mit (2.44) ist unsere Aufgabe gelöst. Die Gesamttransfermatrix ist zerlegt in die Matrizen \mathbf{A}_{j,x_j} , $j = 1, 2$, welche nur von der Potentialform und in die Matrix $e^{ik(x_2-x_1)\sigma_z}$, die die freie Propagation der Welle von x_1 nach x_2 beschreibt und nur vom Abstand der beiden Atome abhängt.

Analog zerlegt sich die Gesamttransfermatrix einer Kette aus N Atomen. Verabreden wir noch in Zukunft, die zu einem Atom gehörenden Teiltransfermatrizen stets in ihrem eigenen Referenzsystem zu messen, dann vereinfacht sich die Notation und für eine Kette aus N Atomen gilt

$$\mathbf{T}_{\text{ges.}} = e^{-ikx_N\sigma_z} \mathbf{A}_N e^{ik(x_N-x_{N-1})\sigma_z} \dots e^{ik(x_2-x_1)\sigma_z} \mathbf{A}_1 e^{ikx_1\sigma_z}. \quad (2.45)$$

2.3 Transfer matrix for rectangular and δ -potential

Eine große mathematische Schwierigkeit besteht bereits darin, die Transfermatrix für ein vorgegebenes Potential zu berechnen. Im allgemeinen ist dies nicht

⁴ERDÖS & HERNDON(1982) führen den Begriff vom “Sitz des Potentials” ein. Dies finde ich unnatürlich. Physikalisch relevant ist der Sitz des Atoms und nicht ein wie auch immer definierter Sitz des Potentials.

möglich. Nur bei einigen einfachen Potentialen gelingt die Quadratur der Schrödingergleichung (2.1). Am häufigsten werden Rechteck- und δ -Potentiale betrachtet. Für diese beiden Potentiale möchte ich die Transfermatrix in der ungewohnten Exponentialschreibweise herleiten.

Aufgrund der Eigenschaften der Transferabbildung genügt es, die Transfermatrix eines im Ursprung zentrierten Rechteckpotentials zu berechnen [Bild (2.5)].

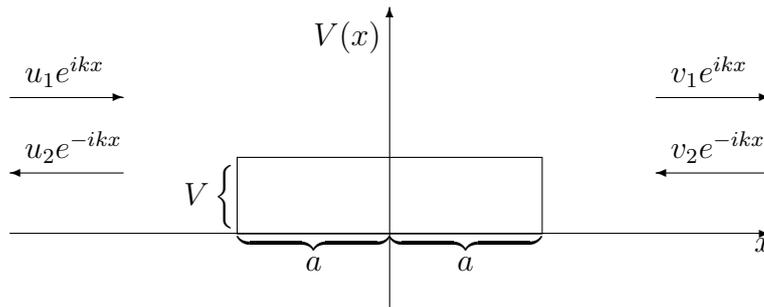


Figure 2.5 : Scattering of electrons with the energy $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ by a rectangular potential.

Dazu führen wir die Schrödingergleichung (2.1)

$$\psi'' = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \psi$$

auf ein Differentialgleichungssystem 1-ter Ordnung zurück

$$\begin{pmatrix} \psi' \\ \psi'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi' \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

(2.46) läßt sich zwar allgemein integrieren [WEST ET AL.(1980)], die dabei auftretenden geordneten Produkte und das Integral über das Potential aber nicht ausführen. Für das Rechteckpotential dagegen ist $V(x)$ stückweise konstant und die Integration von (2.46) Standard. Definieren wir

$$\boldsymbol{\psi} := \begin{pmatrix} \psi \\ \psi' \end{pmatrix},$$

$$\kappa^2(x) := \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E],$$

und

$$\mathbf{J}(x) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \kappa^2(x) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

dann schreibt sich (2.46)

$$\boldsymbol{\psi}'(x) = \mathbf{J}(x)\boldsymbol{\psi}(x). \quad (2.48)$$

Im Inneren des Rechteckpotentials ist $\mathbf{J}(x)$ konstant, und die Quadratur von (2.48) ist

$$\boldsymbol{\psi}(a) = e^{2a\mathbf{J}}\boldsymbol{\psi}(-a).$$

Für die Wellenfunktionen rechts und links des Potentials gilt

$$\psi_r = v_1 e^{ikx} + v_2 e^{-ikx},$$

$$\psi_l = u_1 e^{ikx} + u_2 e^{-ikx},$$

so daß wir für $\boldsymbol{\psi}(x)$

$$\boldsymbol{\psi}_r = \mathbf{X}(k)e^{ikx\boldsymbol{\sigma}_z} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

und

$$\boldsymbol{\psi}_l = \mathbf{X}(k)e^{ikx\boldsymbol{\sigma}_z} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

erhalten, wobei wir

$$\mathbf{X}(k) := \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik & -ik \end{pmatrix}$$

gesetzt haben. Jetzt benutzen wir die Anschlußbedingungen $\boldsymbol{\psi}(a) = \boldsymbol{\psi}_r(a)$ und $\boldsymbol{\psi}(-a) = \boldsymbol{\psi}_l(-a)$ und bekommen für die Transfermatrix

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_R &= e^{-ika\boldsymbol{\sigma}_z} \mathbf{X}^{-1}(k) e^{2a\mathbf{J}} \mathbf{X}(k) e^{-ika\boldsymbol{\sigma}_z} \\ &= e^{-ika\boldsymbol{\sigma}_z} e^{i\frac{a}{k}\mathbf{M}} e^{-ika\boldsymbol{\sigma}_z} \end{aligned} \quad (2.49)$$

mit

$$\mathbf{M} := \text{ad}(\mathbf{X}(k)) \mathbf{J} \mathbf{X}(k) = \begin{pmatrix} k^2 - \kappa^2 & -(k^2 + \kappa^2) \\ k^2 + \kappa^2 & -(k^2 - \kappa^2) \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

und

$$\mathbf{X}^{-1}(k) = \frac{\text{ad}(\mathbf{X}(k))}{\det \mathbf{X}(k)}.$$

$\text{ad}(\mathbf{X}(k))$ ist die **adjungierte Matrix** zu $\mathbf{X}(k)$. \mathbf{M} hat die Eigenschaft

$$\mathbf{M}^2 = -4\kappa^2 k^2 \mathbf{1}. \quad (2.51)$$

Daher gilt

$$e^{i\frac{a}{k}\mathbf{M}} = \cosh(2\kappa a) \mathbf{1} + \frac{i}{2\kappa k} \sinh(2\kappa a) \mathbf{M}, \quad (2.52)$$

woraus wir für den Widerstand ρ_R eines einzelnen Rechteckpotentials

$$\rho_R = |\mathbf{T}_{R,12}|^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \right)^2 \sinh^2(2\kappa a) \quad (2.53)$$

ablesen.

Die Transfermatrix für δ -Potentiale erhalten wir durch Grenzübergang in (2.49) und (2.50)

$$\mathbf{T}_\delta = \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ 2aV = \text{konst.}}} \mathbf{T}_R = \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ 2aV = \text{konst.}}} e^{i\frac{a}{k}\mathbf{M}} = e^{i\beta\mathbf{Q}}, \quad (2.54)$$

wobei die Bezeichnungen

$$\beta = \frac{mV_\delta}{\hbar^2 k}, \quad (2.55)$$

$$V_\delta = 2aV \quad (2.56)$$

und

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.57)$$

eingeführt wurden. \mathbf{Q} ist **nilpotent**, d.h.

$$\mathbf{Q}^2 = \mathbf{O}, \quad (2.58)$$

wobei wir mit \mathbf{O} die Nullmatrix bezeichnen. Wir bekommen daher

$$\mathbf{T}_\delta = e^{i\beta\mathbf{Q}} = \mathbf{I} + i\beta\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 - i\beta & -i\beta \\ i\beta & 1 + i\beta \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

und für den Widerstand eines einzelnen δ -Potentials

$$\rho_\delta = |\mathbf{T}_{\delta,12}|^2 = \beta^2. \quad (2.60)$$

Betrachten wir jetzt speziell Atomketten, die nur aus Rechteck- bzw. δ -Potentialen aufgebaut sind, dann sehen wir, daß die im vorhergehenden Abschnitt eingeführte Zerlegung der Transfermatrix einer Atomkette [Gl.(2.45)] ausschließlich aus Produkten von Exponentialoperatoren besteht. Später werden wir versuchen, diese geeignet zusammenzufassen, so daß es nützlich ist, Kommutatoren $[\ ,]_-$ und Antikommutatoren $[\ ,]_+$ von \mathbf{M} und \mathbf{Q} mit σ_z zu betrachten. Zur Abkürzung der Schreibweise vereinbaren wir

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}]_-^n = \underbrace{[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \dots [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_- \dots]]_-}_{n - \text{Klammern}} \quad (2.61)$$

und dazu analog

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}]_+^n = \underbrace{[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \dots [\mathbf{A}, \mathbf{B}]_+ \dots]]_+}_{n - \text{Klammern}} \quad (2.62)$$

Kommutatoren:

1. $[\mathbf{M}, \sigma_z]_-^n$

$$[\mathbf{M}, \sigma_z]_- = 2(k^2 + \kappa^2)\sigma_z, \quad (2.63)$$

$$[\mathbf{M}, \sigma_z]_-^2 = 4(k^2 + \kappa^2) \begin{pmatrix} -(k^2 + \kappa^2) & k^2 - \kappa^2 \\ -(k^2 - \kappa^2) & k^2 + \kappa^2 \end{pmatrix}, \quad (2.64)$$

$$[\mathbf{M}, \sigma_z]_-^3 = -8(k^2 + \kappa^2)k^2\kappa^2\sigma_z, \quad (2.65)$$

⋮

zyklisch mit entsprechender Veränderung des
Vorfaktors

2. $[\mathbf{Q}, \sigma_z]_-^n$

$$[\mathbf{Q}, \sigma_z]_- = 2\sigma_z, \quad (2.66)$$

$$[\mathbf{Q}, \sigma_z]_-^2 = 4\mathbf{Q}, \quad (2.67)$$

$$[\mathbf{Q}, \sigma_z]_-^3 = \mathbf{0}. \quad (2.68)$$

Antikommutatoren:

1. $[\mathbf{M}, \sigma_z]_+^n$

$$[\mathbf{M}, \sigma_z]_+ = 2(k^2 - \kappa^2)\mathbf{I}, \quad (2.69)$$

$$[\mathbf{M}, \sigma_z]_+^2 = 4(k^2 - \kappa^2)\mathbf{M}, \quad (2.70)$$

$$[\mathbf{M}, \sigma_z]_+^3 = -16k^2\kappa^2(k^2 - \kappa^2)\mathbf{I}, \quad (2.71)$$

⋮

zyklisch wie oben

2. $[\mathbf{Q}, \sigma_z]_+^n$

$$[\mathbf{Q}, \sigma_z]_+ = -2\mathbf{I}, \quad (2.72)$$

$$[\mathbf{Q}, \sigma_z]_+^2 = -4\mathbf{Q}, \quad (2.73)$$

$$[\mathbf{Q}, \sigma_z]_+^3 = \mathbf{0}. \quad (2.74)$$

Die Kommutatoren und Antikommutatoren haben also eine besonders einfache Gestalt, insbesondere überträgt sich die Nilpotenz der \mathbf{Q} -Matrix auf ihre Kommutatoren und Antikommutatoren.

2.4 Transfer matrix for finit-periodic potentials

In diesem Abschnitt möchte ich die allgemeine Gestalt der Transfermatrix des effektiven Potentials einer endlichen Kette von Atomen, die sämtlich auf regulären Gitterplätzen sitzen, ableiten und diskutieren. Die betrachtete Situation ist in Bild (2.6) anhand von Rechteckpotentialen illustriert. Das Studium des pe-

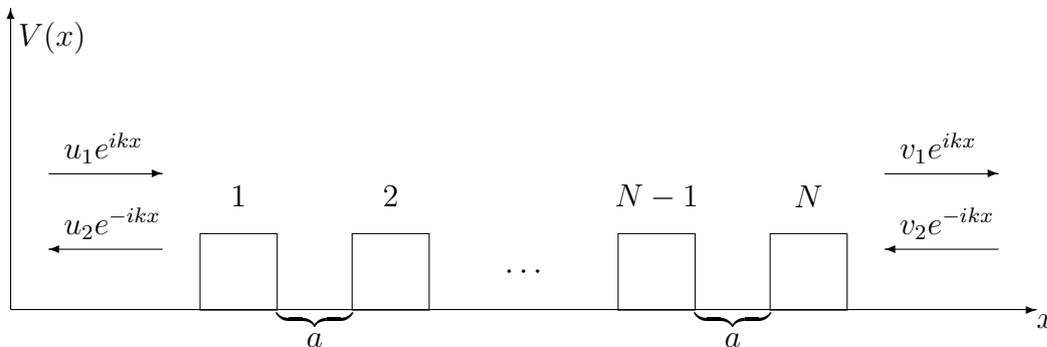


Figure 2.6 : Scattering by a regular array of N identical rectangular potentials with the fixed distance a .

riodischen Falles ist nicht nur für sich selber genommen von Bedeutung, sondern geschieht auch im Hinblick darauf, daß wir im 5-ten Kapitel in ganz anderem Zusammenhang die Formeln benötigen werden. Ein extensives Studium der Eigenschaften des periodischen Potentials ist aber nicht beabsichtigt.

Während das Energiespektrum unendlich ausgedehnter 1D periodischer Potentiale bereits in der Arbeit von STRUTT(1928) sowie der bekannten Arbeit von KRONIG & PENNEY (1931) untersucht wurde und deren Ergebnisse heutzutage in jedem elementaren Lehrbuch über Quantenmechanik zu finden sind, scheint das Transmissionsproblem endlicher 1D periodischer Potentiale eigentümlicherweise erstmals von CVETIČ & PIČMAN (1981) behandelt worden zu sein. Am Ende dieses Abschnittes lernen wir etwas über die Verknüpfung dieser beiden Probleme.

Die nun folgende Ableitung weist zwangsläufig große Ähnlichkeit mit derjenigen von CVETIČ & PIČMAN (1981) auf, ist aber um einer einheitlichen Behandlung und Notation willen nötig.

Die Gesamttransfermatrix für eine periodische Anordnung der Atome erhalten wir durch Spezialisierung des Ergebnisses aus II.2 für eine beliebige Anordnung

beliebiger Atome. Dazu setzen wir in (2.45) $\mathbf{A}_j = \mathbf{A} \forall j = 1, \dots, N$ und $x_j - x_{j-1} = d \forall j = 2, \dots, N$. Dann schreibt sich (2.45)

$$\mathbf{T}_{\text{ges}} = e^{ik(x_N+d)\sigma_z} \left[e^{ikd\sigma_z} \mathbf{A} \right]^N e^{ikx_1\sigma_z}, \quad (2.75)$$

wobei wir zur Erzielung möglichst großer Kompaktheit der Schreibweise auf der linken Seite noch ein Phasenmatrix, die die freie Propagation der Welle zwischen 2 Atomen beschreibt, hinzugefügt und wieder subtrahiert haben. Im periodischen Fall reduziert sich das Problem also darauf, die Transfermatrix \mathbf{A} für das Potential eines einzelnen Streuers zu bestimmen und diese, multipliziert mit der Phasenmatrix für den Abstand benachbarter Atome, in die N -te Potenz zu erheben. Wie man die N -te Potenz von Matrizen berechnet, wird im 4-ten Kapitel gezeigt. Für ein beliebiges Potential hat \mathbf{A} die Gestalt [s. (2.8)]

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a^* \end{pmatrix}. \quad (2.76)$$

Dann gilt

$$\tilde{\mathbf{A}} = e^{ikd\sigma_z} \mathbf{A} = \begin{pmatrix} ga & gb \\ (gb)^* & (ga)^* \end{pmatrix} \quad (2.77)$$

mit $g = e^{ikd}$. Das charakteristische Polynom $f_{\tilde{\mathbf{A}}}$ von $\tilde{\mathbf{A}}$ lautet

$$f_{\tilde{\mathbf{A}}} = \lambda^2 - 2\text{Re}(ga)\lambda + 1. \quad (2.78)$$

$\tilde{\mathbf{A}}$ besitzt daher die EW

$$\lambda_{\pm} = \text{Re}(ga) \pm \sqrt{\text{Re}^2(ga) - 1} \quad (2.79)$$

mit

$$\det \tilde{\mathbf{A}} = \lambda_+ \lambda_- = 1. \quad (2.80)$$

Zur Berechnung der N -ten Potenz von $\tilde{\mathbf{A}}$ benutzen wir jetzt die Ergebnisse aus Kap.IV, insbesondere (4.20). Damit bekommen wir

$$\tilde{\mathbf{A}}^N = \frac{\mathbf{B}(\lambda_+)\lambda_+^N}{\lambda_+ - \lambda_-} + \frac{\mathbf{B}(\lambda_-)\lambda_-^N}{\lambda_- - \lambda_+} \quad (2.81)$$

mit

$$\mathbf{B}(\lambda_{\pm}) = \begin{pmatrix} \lambda_{\pm} - (ga)^* & gb \\ (gb)^* & \lambda_{\pm} - ga \end{pmatrix}, \quad (2.82)$$

so daß für die ME $\tilde{a}_{ij}^{(N)}$ von $\tilde{\mathbf{A}}^N$

$$\tilde{a}_{11}^{(N)} = \frac{\lambda_+^{N+1} - \lambda_-^{N+1}}{\lambda_+ - \lambda_-} - (ga)^* \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+ - \lambda_-}, \quad (2.83)$$

$$\tilde{a}_{12}^{(N)} = gb \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+ - \lambda_-}, \quad (2.84)$$

$$\tilde{a}_{22}^{(N)} = \tilde{a}_{11}^{(N)*}, \quad \tilde{a}_{21}^{(N)} = \tilde{a}_{12}^{(N)*} \quad (2.85)$$

gilt. Jetzt verwenden wir, daß wir wg.

$$\ln(\lambda_+ \lambda_-) = \ln(\lambda_+) + \ln(\lambda_-) = 0 \quad (2.86)$$

[s. (2.80)] $\forall k \in \mathbb{C}$

$$\lambda_+^k - \lambda_-^k = e^{k \ln \lambda_+} - e^{-k \ln \lambda_+} = 2 \sinh(k \ln \lambda_+) \quad (2.87)$$

schreiben können. Wir setzen dies in (2.83) und (2.84) ein, benutzen noch die Identitäten

$$\sinh[(N+1)\varphi] = \sinh(N\varphi) \cosh(\varphi) + \cosh(N\varphi) \sinh(\varphi), \quad (2.88)$$

$$\ln \lambda_+ = \operatorname{acosh}[\operatorname{Re}(ga)] \quad (2.89)$$

und erhalten

$$\tilde{a}_{11}^{(N)} = \cosh(N \ln \lambda_+) + i \operatorname{Im}(ga) \frac{\sinh(N \ln \lambda_+)}{\sinh(\ln \lambda_+)}, \quad (2.90)$$

$$\tilde{a}_{12}^{(N)} = gb \frac{\sinh(N \ln \lambda_+)}{\sinh(\ln \lambda_+)}. \quad (2.91)$$

In formaler Analogie zum Rechteckpotential gilt daher

$$\tilde{\mathbf{A}}^N = \cosh(N \ln \lambda_+) \mathbf{I} + \frac{\sinh(N \ln \lambda_+)}{\sinh(\ln \lambda_+)} \tilde{\mathbf{M}} \quad (2.92)$$

mit

$$\tilde{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} i \operatorname{Im}(ga) & gb \\ (gb)^* & -i \operatorname{Im}(ga) \end{pmatrix}, \quad (2.93)$$

$$\tilde{\mathbf{M}}^2 = [|b|^2 - \operatorname{Im}^2(ga)] \mathbf{I}. \quad (2.94)$$

Für den Widerstand entnehmen wir (2.91)

$$\rho = |\tilde{a}_{12}^{(N)}|^2 = |b|^2 \frac{\sinh^2(N \ln \lambda_+)}{\sinh^2(\ln \lambda_+)}. \quad (2.95)$$

Wg. (2.79) und (2.80) sind die EW für

$$-1 \leq \operatorname{Re}(ga) \leq 1 \quad (2.96)$$

konjugiert komplex und vom Betrag 1. Dann oszilliert der Widerstand mit der Anzahl der Streuer. Für δ -Potentiale können wir die Bedingung (2.96) interpretieren. Nach (2.59) ist für δ -Potentiale

$$\operatorname{Re}(ga) = \operatorname{Re}[e^{ikd}(1 - i\beta)] = \cos(kd) + \beta \sin(kd). \quad (2.97)$$

Mithin lautet (2.96)

$$-1 \leq \cos(kd) + \beta \sin(kd) \leq 1. \quad (2.98)$$

Dies ist jedoch gerade die Bedingung(6) von KRONIG & PENNEY (1931) für die erlaubten Energiebänder einer 1D infinit periodischen Anordnung von δ -Potentialen mit periodischen Randbedingungen. Wir können daher die in Tabelle (2.1) aufgelisteten Zuordnungen treffen.

Lage der Energie der einfallenden Elektronen im Spektrum	EW von $\tilde{\mathbf{A}}$	Verhalten des Widerstandes
Energieband	$\lambda_+ = e^{i\varphi}$	$\rho = b ^2 \frac{\sin^2(N\varphi)}{\sin^2(\varphi)}$ (Oszillieren)
Bandlücke	$\lambda_+ \in \mathbb{R}$	$\rho = b ^2 \frac{\sinh^2(N \ln \lambda_+)}{\sinh^2(\ln \lambda_+)}$ (Exponentielles Wachsen)
Bandkante	$\lambda_+ = \pm 1$	$\rho = b ^2 N^2$ (Quadratisches Wachsen)

Table 2.1 : Behaviour of the resistance depending on the location of the energy of the impinging electrons in the spectrum.

Es sind diese Zuordnungen, welche ERDÖS(1967), ERDÖS & HERNDON (1972,1982) dazu veranlaßt haben auch im ungeordneten Fall vom Verhalten des Widerstandes auf die Bandstruktur zurückzuschließen. Es läßt sich sogar zeigen, daß für die EW des endlichperiodischen Potentials mit periodischen Randbedingungen, d.h., wenn man die Kette zu einem Ring schließt, vollständige Transmission, d.h. $|t|^2 = 1$ auftritt [PESCHEL(1989)].

3

How to average arbitrary functions of the resistance:

3.1 The problem of averaging

Wir sind nicht an den Eigenschaften einer speziellen ungeordneten Kette interessiert. Wir möchten Mittelwerte, insbesondere des Widerstandes, über viele ungeordnete Ketten bestimmen. Hier möchte ich die prinzipielle Vorgehensweise illustrieren.

Dazu nehmen wir an, daß wir N lauter gleichartige Atome haben, deren Abstände voneinander durch eine gemeinsame Verteilungsfunktion $p(\xi = x_j - x_{j-1})$, $j = 2, \dots, N$ beschrieben werden. Dann können wir (2.45) mitteln

$$\langle \mathbf{T}_{\text{ges.}} \rangle_N = \langle e^{-ikx_N \sigma_z} \mathbf{A}_N e^{ik(x_N - x_{N-1}) \sigma_z} \dots e^{ik(x_2 - x_1) \sigma_z} \mathbf{A}_1 e^{ikx_1 \sigma_z} \rangle. \quad (3.1)$$

Da alle Atome gleich sind, haben wir $\mathbf{A}_N = \dots = \mathbf{A}_1 = \mathbf{A}$ und \mathbf{A} hängt nur von der Potentialform und nicht vom Abstand ab. Vernachlässigen wir weiter, daß bei festem x_1 , $x_N = x_1 + \sum_{j=2}^N \xi_j$ gilt, dann vereinfacht sich (3.1) zu

$$\langle \mathbf{T}_{\text{ges.}} \rangle_N = e^{-ikx_N \sigma_z} \mathbf{A} \langle e^{ik(x_N - x_{N-1}) \sigma_z} \rangle \dots \langle e^{ik(x_2 - x_1) \sigma_z} \rangle \mathbf{A} e^{ikx_1 \sigma_z}. \quad (3.2)$$

Nach Annahme ist die Verteilungsfunktion für je zwei benachbarte Atome gleich, so daß wir

$$\langle G \rangle = \langle e^{ik(x_j - x_{j-1}) \sigma_z} \rangle$$

unabhängig von j haben, und (3.2) vereinfacht sich weiter zu

$$\langle \mathbf{T}_{\text{ges.}} \rangle_N = e^{-ikx_N \sigma_z} \langle G \rangle^{-1} [\langle G \rangle \mathbf{A}]^N e^{ikx_1 \sigma_z}. \quad (3.3)$$

Damit wäre das Problem auf die Berechnung der N -ten Potenz einer Matrix zurückgeführt und stark vereinfacht.

Abgesehen davon, daß man beim Übergang von (3.1) nach (3.2) die Mittelung nicht einfach durch die beiden äußeren Phasenmatrizen schieben darf, liefert uns (3.3) bei näherer Betrachtung der ME von $\langle \mathbf{T}_{\text{ges.}} \rangle_N$ [s. (2.35)], daß wir $\langle \frac{1}{t} \rangle_N$ und $\langle \frac{r}{t} \rangle_N$ berechnet haben. Beide Größen sind nicht meßbar und daher uninteressant. Von Bedeutung sind nur Mittelwerte von Funktionen des Widerstandes, deren Mittelung ich in den nächsten Abschnitten beschreibe. Dabei wird sich auch das Problem der beiden Phasenmatrizen am Rande von (3.1) von allein lösen.

Bemerkung:

Ohne auf das Problem der genauen Wahl der Verteilungsfunktion näher einzugehen möchte ich bemerken, daß die Annahme, daß \mathbf{A} nur von der Potentialform und nicht vom Abstand abhängt, nicht mit der üblichen Vorstellung über den Verlauf des effektiven Potentials zwischen den Atomen vereinbar ist.

Nehmen wir zum Beispiel an, daß das Potential in der Mitte zwischen zwei Atomen ein Maximum besitzt und von dort streng monoton bis zum Sitz des Atoms abfällt. Dann muß sich bei einer Änderung des Abstandes zwangsläufig die Gestalt des Potentials ändern, will man Überlappung beider Potentialhälften ausschließen. Wir halten fest:

Abstand und Potentialform sind stets korreliert.

Dies wurde bisher aber nie berücksichtigt. Man stellte zwar die Gefahr der Überlappung fest [z.B. ERDÖS & HERNDON(1982)], führte aber zu deren Vermeidung "lokalisierte" Potentiale ein, die bei entsprechender Einschränkung der Verteilungsfunktion immer einen potentialfreien Raum ließen. Dies rettet formal, doch physikalisch ist es nicht!

3.2 The analytic representations of SU(1,1)

Wir sahen eben, wie sich das Problem bei Mittelung auf die Berechnung der N -ten Potenz einer Matrix vereinfachte. Wenn wir die 2×2 Transfermatrizen direkt mitteln, bekommen wir jedoch nur Mittelwerte unbeobachtbarer Größen. Wie können wir dies ändern?

Derjenige, der bereits mit Darstellungen von Gruppen vertraut ist, weiß:

Darstellungen der 2×2 Transfermatrizen erhalten die Multiplikationsstruktur (2.45) der Transferrelation. Dies ist die Voraussetzung, um das Problem bei Mittelung auf das viel einfachere Problem der Berechnung der N -ten Potenz einer Matrix zurückzuführen.

Nur die **irreduziblen** Darstellungen sind wichtig, so daß die Aufgabe entsteht, **alle** irreduziblen Darstellungen der $SU(1,1)$ zu untersuchen.¹

Diese Untersuchung ist noch nicht vollständig abgeschlossen. Ich konnte ausschließlich die analytischen Darstellungen der $SU(1,1)$ betrachten. Ob nicht-analytische Darstellungen der $SU(1,1)$ existieren und von Nutzen sind, weiß ich nicht. Nach meinem besten Wissen sind **alle** analytischen irreduziblen Darstellungen in der sogenannten **vollen nicht-unitären Prinzipalserie** $\mathcal{P}^{\pm, \nu}$ [s. Knapp(1986),S.38] enthalten.

Die nun folgenden Überlegungen basieren im wesentlichen auf dem 6-ten Kapitel des Buches von VILENKIN(1969). Dort befindet sich eine ausführliche Beschreibung der $SU(1,1)$ und ihrer analytischen Darstellungen. Voraussetzung zum Verständnis diese 6-ten Kapitels sind Grundkenntnisse in der Darstellungstheorie, wie sie in etwa in den ersten 9 Kapiteln des Buches von TUNG(1985) vermittelt werden. Die außergewöhnlichen Eigenschaften unitärer Darstellungen, die wir im 4-ten Abschnitt dieses Kapitels benötigen, mit besonderem Hinblick auf die $SU(1,1)$ und das Problem des elektrischen Widerstandes in 1D vermittelt am besten der Aufsatz von MELLO(1986), der dieses Kapitel der vorliegenden Arbeit maßgeblich inspiriert hat.

Für die volle nicht-unitäre Prinzipalserie $\mathcal{P}^{\pm, \nu}$ findet man bei VILENKIN (1969) für die ME die Integraldarstellung

$$\mathcal{P}_{mn}^{\pm, \nu}(\mathbf{T}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (be^{i\theta} + \bar{a})^{\nu+n} (\bar{b}e^{-i\theta} + a)^{\nu-n} e^{i(m-n)\theta} d\theta. \quad (3.4)$$

Dabei wurde als Basis $\{e^{-ik\theta}, k \in Z\}$ zugrunde gelegt. $\nu \in \mathbb{C}$ klassifiziert die einzelnen Darstellungen. m und n sind entweder beide ganzzahlig ($\mathcal{P}_{mn}^{+, \nu}$) oder beide halbzahlig ($\mathcal{P}_{mn}^{-, \nu}$).

Nach VILENKIN(1969) sind diese Darstellungen irreduzibel, außer für $\mathcal{P}_{mn}^{+, \ell}$, ℓ ganzzahlig und $\mathcal{P}_{mn}^{-, \ell}$, ℓ halbzahlig. Der Binomialentwicklung [Gl.(6) §3.1, Ch.VI, VILENKIN(1969)] entnimmt man für $\mathcal{P}_{mn}^{+, \ell}$, ℓ ganzzahlig folgende Blockstruktur:

¹Wenn nicht gesondert bemerkt, sind im folgenden stets irreduzible Darstellungen gemeint.

1. $\ell \geq 0$:

$$\mathcal{P}_{mn}^{+, \ell}(\mathbf{T}) = \begin{array}{c} m \setminus n \\ -\ell \\ +\ell \end{array} \left(\begin{array}{c|c|c} & -\ell & +\ell \\ \hline \mathcal{D}_\ell^+(\mathbf{T}) & 0 & 0 \\ \hline X & \mathcal{P}_f^{+, \ell}(\mathbf{T}) & X \\ \hline 0 & 0 & \mathcal{D}_\ell^-(\mathbf{T}) \end{array} \right). \quad (3.5)$$

2. $\ell < 0$:

$$\mathcal{P}_{mn}^{+, \ell}(\mathbf{T}) = \begin{array}{c} m \setminus n \\ \ell + 1 \\ -\ell - 1 \end{array} \left(\begin{array}{c|c|c} & \ell + 1 & -\ell - 1 \\ \hline \mathcal{D}_\ell^+(\mathbf{T}) & X & 0 \\ \hline 0 & \mathcal{P}_f^{+, \ell}(\mathbf{T}) & 0 \\ \hline 0 & X & \mathcal{D}_\ell^-(\mathbf{T}) \end{array} \right). \quad (3.6)$$

\mathcal{D}_ℓ^\pm sind die beiden diskreten unitären Serien, und $\mathcal{P}_f^{+, \ell}$ ist die $|2\ell + 1|$ -dimensionale irreduzible Darstellung. Für ganzzahliges ℓ zerfällt $\mathcal{P}_{mn}^{+, \ell}(\mathbf{T})$ daher in 3 Blöcke, darunter in der Mitte die endlichdimensionalen Darstellungen. Die mit X bezeichneten Blöcke in (3.5) und (3.6) sind von Null verschieden. Dies hat aber keinen Einfluß. Bei der Multiplikation von 2 Matrizen $\mathcal{P}^{+, \ell}(\mathbf{T}_1)$ und $\mathcal{P}^{+, \ell}(\mathbf{T}_2)$ transformieren sich $\mathcal{D}_\ell^\pm(\mathbf{T}_j)$ und $\mathcal{P}_f^{+, \ell}(\mathbf{T}_j)$ untereinander. Analog sieht es für $\mathcal{P}_{mn}^{-, \ell}(\mathbf{T})$, ℓ halbzahlig aus.

Benutzen wir jetzt die in II.1 eingeführte Parametrisierung, dann schreibt sich (3.4) [VILENKIN(1969)]

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{mn}^{\pm, \nu}(\mathbf{T}) &= e^{-i(m\phi+n\psi)} P_{mn}^\nu(\cosh \tau) \\ &= e^{-i(m\phi+n\psi)} P_{mn}^\nu(1 + 2\rho), \end{aligned} \quad (3.7)$$

wobei wir $\cosh \tau = 1 + 2\rho$ benutzt haben. $P_{mn}^\nu(z)$ heißt **Jacobi-Funktion** der Variablen z .

Schauen wir uns die Integraldarstellung (3.4) an, so finden wir, daß für $m, n \neq 0$ die ME $\mathcal{P}_{mn}^{\pm, \nu}(\mathbf{T})$ im allgemeinen komplex sind. Das (0,0)-ME $\mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(\mathbf{T})$ ist dagegen stets reel und nach (3.7) gilt

$$P_\nu(1 + 2\rho) = P_{00}^\nu(1 + 2\rho). \quad (3.8)$$

$P_\nu(1 + 2\rho)$ ist die **Legendre-Funktion zum Index ν** in der Variablen $z = 1 + 2\rho$ [VILENKIN(1969)].

Wir erhalten damit das wichtige Resultat:

Das (0,0)-ME der vollen nicht-unitären Prinzipalserie ist eine Funktion des Widerstandes allein und es gilt

$$\mathcal{P}_{00}^{+,\nu}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) = P_\nu(1 + 2\rho), \quad (3.9)$$

wobei $P_\nu(1 + 2\rho)$ die Legendre-Funktion zum Index ν ist.

Die analytischen Darstellungen der $SU(1,1)$ versetzen uns daher in die Lage, Legendre-Funktionen in der Variablen $z = 1 + 2\rho$ des Widerstandes zu berechnen. $|t|^2 = 1/(1 + \rho)$ und $\ln(1 + \rho)$ sind aber keine Legendre-Funktionen in $z = 1 + 2\rho$. Wie können wir solche Größen berechnen? Die Antwort ist einfach:

Funktionen des Widerstandes müssen nach Legendre-Funktionen in $1 + 2\rho$ entwickelt werden.

Dazu benötigen wir **vollständige Orthogonalsysteme** von Legendre-Funktionen.

Sei I_ν eine Indexmenge und $P_\nu(1 + 2\rho)$, $\nu \in I_\nu$ ein vollständiges Orthogonalsystem von Legendre-Funktionen im Intervall I_ρ . Dann besagt die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_{I_\nu} P_\nu(1 + 2\rho') P_\nu(1 + 2\rho) w(\nu) d\nu = \delta(\rho - \rho'). \quad (3.10)$$

Eine beliebige Funktion $f(\rho)$ des Widerstandes besitzt damit in I_ρ eine Entwicklung der Gestalt

$$f(\rho) = \sum_{I_\nu} a_\nu P_\nu(1 + 2\rho) w(\nu) d\nu, \quad (3.11)$$

wobei die Entwicklungskoeffizienten a_ν von der speziellen Orthogonalitätsrelation abhängen. Für den Mittelwert von $f(\rho)$ bekommen wir aus (3.11)

$$\langle f(\rho) \rangle_N = \sum_{I_\nu} a_\nu \left[\langle \mathcal{P}^{+,\nu}(\mathbf{T}) \rangle^N \right]_{00} w(\nu) d\nu, \quad (3.12)$$

wenn wir beachten, daß ρ in (3.11) der Gesamtwiderstand ist, wegen der Darstellungseigenschaft der $\mathcal{P}^{+,\nu}$'s

$$\mathcal{P}^{+,\nu}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) = \mathcal{P}^{+,\nu}(\mathbf{T}_N) \cdots \mathcal{P}^{+,\nu}(\mathbf{T}_1) \quad (3.13)$$

gilt und wir die Mittelwertbildung mit der Integration über ν vertauscht haben.

Mitteln wir einfach die Vollständigkeitsrelation (3.10), so liefert dies für die Verteilungsfunktion des Widerstandes das Resultat

$$p_N(\rho) = \sum_{I_\nu} \left[\langle \mathcal{P}^{+,\nu}(\mathbf{T}) \rangle^N \right]_{00} P_\nu(1 + 2\rho) w(\nu) d\nu. \quad (3.14)$$

2 vollständige Orthogonalsysteme von Legendre-Funktionen lernen wir in den beiden nächsten Abschnitten kennen. Das erste im Intervall $I_\rho = [-1, 0]$ sind die **Legendre-Polynome** $P_n(1 + 2\rho)$, $n \in \mathbb{N}_0$, die eng mit den **endlichdimensionalen Darstellungen** zusammenhängen, das zweite im Intervall $I_\rho = [0, \infty[$ sind eng verknüpft mit den **unitären Darstellungen**, die **konischen Funktionen** $P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho)$, $q \in \mathbb{R}^+$.

3.3 Finit-dimensional representations, Legendre polynoms

Die gegenwärtige Situation in der Literatur hinsichtlich der irreduziblen endlichdimensionalen Darstellungen scheint unübersichtlich. Es gibt, so weit ich es überblicke, vier verschiedene Methoden, um zu den irreduziblen endlichdimensionalen Darstellungen zu gelangen. Die Schöpfer dieser Methoden sind ANDERECK & ABRAHAMS(1980), PENDRY(1982), ERDÖS & HERNDON(1982) und FELDERHOF(1986).

Nur in einer dieser 4 Arbeiten, der von ERDÖS & HERNDON(1982), steht, worauf es ankommt. In deren §7.3 wird ganz klar gesagt, daß die irreduziblen (endlichdimensionalen)² Darstellungen der $SU(1,1)$ gesucht sind. Doch, anstatt nun, ausgestattet mit dieser Erkenntnis, die seit der Jahrhundertwende bekannten irreduziblen Darstellungen hinzuschreiben und zu untersuchen, fahren beide Autoren bei ihrem ungünstigen Startpunkt fort und reduzieren das zweifache Tensorprodukt $\mathbf{T}^* \otimes \mathbf{T}$ und das vierfache Tensorprodukt $(\mathbf{T}^* \otimes \mathbf{T}) \otimes (\mathbf{T}^* \otimes \mathbf{T})$ aus. Dann, um das Unglück perfekt zu machen, geben sie nur die Symmetrien der ME der 3D bzw. 5D irreduziblen Darstellungen an und nicht die ME selbst, mit dem Resultat, daß alles kompliziert und unübersichtlich wirkt. Dies ist insofern unverständlich, als einer der Autoren, schon früher [ERDÖS(1967)] eine klarere Abhandlung ausgearbeitet hatte, die leider unveröffentlicht blieb.

Die Folge dieser unglücklichen Darlegung war, daß andere Autoren den Kern der Aussage übersahen und “neue”, “einfachere” Methoden entwickelten, um zu den 3D bzw. 5D irreduziblen Darstellungen der $SU(1,1)$ zu gelangen. So ist die Entstehung der Arbeiten von KIRKMAN & PENDRY(1984a,b) und FELDERHOF(1986) zu verstehen.

KIRKMAN & PENDRY(1984a) betrachten Tensorprodukte der Form $\mathbf{T}^{\otimes N}$ und $(\mathbf{T}^* \otimes \mathbf{T})^{\otimes N}$, die sie mit Hilfe der symmetrischen Gruppe reduzieren bzw. “verbessert” reduzieren. Für alle **klassischen Gruppen**, zu denen auch die $SU(1,1)$ gehört, ist dies ebenfalls seit der Jahrhundertwende bekannt und gelöst [TUNG(1985) und Referenzen darin]. **Young Tableau’s** entdeckt man allerdings erst in der neueren Arbeit von PENDRY & CASTAÑO(1988), und von irreduziblen Darstellungen ist in dieser Arbeit, genauso wie in der obengenannten

²Wir sprechen in diesem Abschnitt ausschließlich von endlichdimensionalen Darstellungen.

Arbeit, keine Rede.

Die Arbeit von FELDERHOF(1986) zeichnet sich dadurch aus, daß man dort zum ersten Mal die 3D bzw. 5D irreduzible Darstellung, explizit in Matrixform angegeben findet. Der gewählte Zugang über den harmonischen Oszillator stellt aber, im Zusammenhang mit dem Problem der Ausbreitung von Wellen in 1D ungeordneten Systemen, einen Umweg dar.

Etwas ungewöhnlich ist die Methode von ANDERECK & ABRAHAMS (1980). Beide Autoren gelangen zu den irreduziblen Darstellungen der $SU(1,1)$ in Gestalt der irreduziblen Darstellungen der $SL(2, \mathbb{R})$. Diese beiden Gruppen sind innerhalb der $SL(2, \mathbb{C})$ konjugiert zueinander [KNAPP(1986), p.39 und BARGMANN(1947), §3]. Es gilt

$$SL(2, \mathbb{R}) = \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix} SU(1,1) \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}^{-1}. \quad (3.15)$$

Schauen wir uns jetzt die endlichdimensionalen irreduziblen Darstellungen näher an. Wir finden sie zum Beispiel bei BARGMANN(1947) Gl.(10.33).

Die dort angegebene Form hat den Vorteil, sowohl mit den unitären Darstellungen der $SU(1,1)$ als auch mit den unitären Darstellungen der Drehgruppe $SO(3)$, genauer deren Spinorgruppe $SU(2)$, vergleichbar zu sein. Die unitären Darstellungen der $SU(1,1)$ erhält man aus den korrespondierenden endlichdimensionalen Darstellungen durch analytische Fortsetzung im Index, die unitären Darstellungen der $SU(2)$ durch simples Ersetzen von \bar{b} durch $-\bar{b}$. Ein Nachteil dieser Form ist allerdings, daß hier unbequeme Wurzelfaktoren auftreten.

Benutzen wir stattdessen die volle nicht-unitäre Prinzipalserie (3.4), so bekommen wir die endlichdimensionalen Darstellungen für halb- oder ganzzahliges ν . Dann sind die ME Polynome in a, \bar{a}, b, \bar{b} . Das (0,0)-ME tritt nur für ganzzahlige ν auf und es gilt [VILENKIN(1969)]

$$\mathcal{P}_{f,00}^{+,k}(\mathbf{T}) = \mathcal{P}_{f,00}^{+,-k-1}(\mathbf{T}) = P_k(1+2\rho), \quad k \in \mathbb{N}_0. \quad (3.16)$$

$P_k(1+2\rho)$ sind die **Legendre-Polynome** in der Variablen $1+2\rho$.

Die Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelationen der Legendre-Polynome lauten

$$\int_{-1}^{-1} P_k(1+2\rho) P_\ell(1+2\rho) d(1+2\rho) = \frac{2}{2k+1} \delta_{k\ell} \quad (3.17)$$

und

$$\sum_{k=0}^{\infty} P_k(1+2\rho) P_k(1+2\rho') = \frac{2}{2k+1} \delta(\rho - \rho'). \quad (3.18)$$

Funktionen des Widerstandes, die quadratintegrabel über $[-1, 1]$ in $z = 1+2\rho$, d.h. über $[-1, 0]$ in ρ , sind, können daher nach Legendre-Polynomen entwickelt werden.

$$f(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(k + \frac{1}{2}\right) P_k(1+2\rho) \quad (3.19)$$

mit

$$a_k = \int_{-1}^1 f(\rho) P_k(1+2\rho) d(1+2\rho). \quad (3.20)$$

Mittelung von (3.19) ergibt

$$\langle f(\rho) \rangle_N = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left(k + \frac{1}{2}\right) \left[\langle \mathcal{P}_f^{+,k}(\mathbf{T}) \rangle^N \right]_{00}, \quad (3.21)$$

wobei wir wieder berücksichtigt haben, daß ρ in (3.19) der Gesamtwiderstand ist und wegen der Darstellungseigenschaft der $\mathcal{P}^{+,k}$'s

$$\mathcal{P}_f^{+,k}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) = \mathcal{P}_f^{+,k}(\mathbf{T}_N) \cdots \mathcal{P}_f^{+,k}(\mathbf{T}_1) \quad (3.22)$$

gilt. Außerdem wurden Mittelwertbildung und Summation über k vertauscht. Die Vorgehensweise ist daher mit der im 2-ten Abschnitt illustrierten identisch.

Allerdings ist Vorsicht geboten! Die Entwicklung (3.19) gilt nur für $\rho \in [-1, 0]$. Für andere ρ muß die Summe auf der rechten Seite nichts mit der Funktion $f(\rho)$ gemein haben. Für den Fall, daß $f(\rho)$ ein Polynom ist, ist die Entwicklung (3.19) aber für alle $\rho \in \mathbb{C}$ gültig. Dann macht auch (3.21) Sinn, wo wir über $\rho \in [0, \infty[$ mitteln.

Wir können auch ein Analogon zur Verteilungsfunktion $p_N(\rho)$ angeben

$$p_N^{[-1,0]}(\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} P_k(1+2\rho) \left[\langle \mathcal{P}_f^{+,k}(\mathbf{T}) \rangle^N \right]_{00}. \quad (3.23)$$

$p_N^{[-1,0]}(\rho)$ ist nicht die Verteilungsfunktion. Wenn man aber die Mittelung geeignet analytisch fortsetzen könnte, dann könnte man (3.23) als analytische Fortsetzung der Verteilungsfunktion $p_N(\rho)$ im Intervall $[-1, 0]$ auffassen.

Andererseits ließe sich (3.23) u.U. als eine Art Kern eines die *Mittelwerte von Funktionen des Widerstandes erzeugenden Funktionals* interpretieren, derart daß

$$\langle f(\rho) \rangle_N = \int_{-1}^1 p_N^{[-1,0]}(\rho) f(\rho) d(1+2\rho) \quad (3.24)$$

gilt.

Ohne Zweifel liefert (3.24) bei gliedweiser Integration für alle Polynome $f(\rho)$ das richtige Ergebnis (3.21), so daß folgende Fragen offen bleiben: Gibt es Funktionen $f(\rho)$, die keine Polynome sind und für die (3.21) Sinn macht? Wie sind (3.23) und (3.24) zu interpretieren?

Bemerkung:

Diese Probleme treten bei den im nächsten Abschnitt zu besprechenden unitären Darstellungen nicht auf.

Ergänzungen:

Aus der vollen nicht-unitären Prinzipialserie (3.4) bekommen wir für die 1D, 3D und 5D Darstellung

$$\mathcal{P}_f^{+,0} \left[\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a^* \end{pmatrix} \right] = 1, \quad (3.25)$$

$$\mathcal{P}_f^{+,1} \left[\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a^* \end{pmatrix} \right] = \begin{matrix} & \begin{matrix} m \setminus n & -1 & 0 & 1 \end{matrix} \\ \begin{matrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{matrix} & \begin{pmatrix} a^2 & ab & b^2 \\ 2ab^* & |a|^2 + |b|^2 & 2a^*b \\ b^{*2} & a^*b^* & a^{*2} \end{pmatrix} \end{matrix}, \quad (3.26)$$

$$\mathcal{P}_f^{+,2} \left[\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a^* \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} a^4 & a^3b & a^2b^2 & ab^3 & b^4 \\ 4a^3b^* & a^2(|a|^2 + 3|b|^2) & 2ab(|a|^2 + |b|^2) & b^2(3|a|^2 + |b|^2) & 4a^*b^3 \\ 6a^2b^{*2} & 3ab^*(|a|^2 + |b|^2) & |a|^4 + 4|a|^2|b|^2 + |b|^4 & 3a^*b(|a|^2 + |b|^2) & 6a^{*2}b^2 \\ 4ab^{*3} & b^{*2}(3|a|^2 + |b|^2) & 2a^*b^*(|a|^2 + |b|^2) & a^{*2}(|a|^2 + 3|b|^2) & 4a^{*3}b \\ b^{*4} & a^*b^{*3} & a^{*2}b^{*2} & a^{*3}b^* & a^{*4} \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Die Anordnung der ME ist an der 3D Darstellung gekennzeichnet.

Diese Darstellungen sind zur Berechnung der ersten beiden Momente von ρ und $|t|^{-2} = 1 + \rho$ ausreichend. Für die Entwicklung (3.21) finden wir

$$\langle \rho \rangle_N = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} [\langle \mathcal{P}_f^{+,1}(\mathbf{T}) \rangle^N]_{00}, \quad (3.28)$$

$$\langle \rho^2 \rangle_N = \frac{1}{3} - \frac{1}{2} [\langle \mathcal{P}_f^{+,1}(\mathbf{T}) \rangle^N]_{00} + \frac{1}{6} [\langle \mathcal{P}_f^{+,2}(\mathbf{T}) \rangle^N]_{00} \quad (3.29)$$

und

$$\langle |t|^{-2} \rangle_N = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} [\langle \mathcal{P}_f^{+,1}(\mathbf{T}) \rangle^N]_{00}, \quad (3.30)$$

$$\langle |t|^{-4} \rangle_N = \frac{1}{3} + \frac{1}{2} [\langle \mathcal{P}_f^{+,1}(\mathbf{T}) \rangle^N]_{00} + \frac{1}{6} [\langle \mathcal{P}_f^{+,2}(\mathbf{T}) \rangle^N]_{00}. \quad (3.31)$$

Stellen wir jetzt, wie BARGMANN(1947), die Transfermatrizen im Raum der homogenen Polynome $P_{2j}(\mathbf{x})$ vom Grad $2j$, j halbzahlig oder ganzzahlig, dar. Durch

$$\Phi^{2j+1}(\mathbf{T}) = P_{2j}(\mathbf{T}\mathbf{x}), \quad (3.32)$$

$$\Phi^{2j+1}(\mathbf{T}_2)P_{2j}(\mathbf{T}_1\mathbf{x}) = P_{2j}(\mathbf{T}_2\mathbf{T}_1\mathbf{x}) \quad (3.33)$$

wird eine Darstellung der $SU(1,1)$ der Dimension $2j + 1$ definiert. Diese Darstellungen sind irreduzibel [BARGMANN(1947)]. Wie hängen diese Darstellungen mit den Darstellungen der vollen nicht-unitären Prinzipalserie zusammen? Ohne Beweis gilt

$$\mathcal{P}^{+,j}(\mathbf{T}) = \Phi^{2j+1}(\mathbf{T}^T)^T, \quad (3.34)$$

wenn wir als Basis Monome der Gestalt $x_1^{j+m}x_2^{j-m}$ wählen und nach fallendem m anordnen. Dies erleichtert den Vergleich, der von den verschiedenen Autoren gefundenen äquivalenten Darstellungen.

Abschließend bemerke ich, daß die im 1-ten Abschnitt störenden Phasenmatrizen $\mathbf{U}^{-1}(x_N)$ und $\mathbf{U}(x_1)$ in den relevanten Darstellungen wegen $\mathcal{P}_{00}^{+,k}(\mathbf{U}) = 1$ wegfallen. Dies gilt auch bei den im folgenden zu besprechenden unitären Darstellungen.

3.4 Unitary representations, spectral analysis, conical functions, probability distribution

Einleitung

Für unitäre Darstellungen gelten mächtige Sätze:

Funktionen, die über der Gruppenmannigfaltigkeit quadratintegrabel sind, können nach den irreduziblen unitären Darstellungen zerlegt werden. (verallgemeinerte harmonische Analyse = Spektralanalyse)

Die unitären Darstellungen der $SU(1,1)$ wurden erstmalig von BARGMANN (1947) bestimmt und sind die ersten überhaupt bestimmten für eine nicht-kompakte Gruppe.

Im Rahmen des hier untersuchten Problems steht MELLO(1986) der Verdienst zu, die Idee der Spektralanalyse eingeführt zu haben. Allerdings verfolgte er ein anderes Ziel, nämlich einen zentralen Grenzwertsatz für die $SU(1,1)$ zu beweisen. In dessen Anhang sind, in der Sprache Bargmanns, die wichtigsten Ergebnisse für die unitären Darstellungen der $SU(1,1)$ zusammengefaßt.

Wir werden jedoch ganz der Darlegung VILENKINS (1969) folgen. Die Arbeiten Bargmanns und Vilenkins unterscheiden sich in der Wahl der Basis. Bargmann ist ausschließlich an den unitären Darstellungen der $SU(1,1)$ interessiert und wählte eine Basis, die mit den unitären Darstellungen der $SU(2)$ (der Drehgruppe) vergleichbar ist, aber zu unangenehmen Wurzelfaktoren der ME führt. Vilenkin dagegen geht von der vollen nicht-unitären Prinzipalserie aus, so daß keine Wurzelfaktoren auftreten.

Abschließend möchte ich für die allgemeine Darstellungstheorie und abstrakte Resultate noch das Buch von KNAPP(1986) nennen.

Nun aber 'ran!

Mittlung über $SU(1,1)$ quadratintegrabler Funktionen.

Im ersten Abschnitt sahen wir, daß sich jede Transfermatrix mit Hilfe der Eulerwinkel ϕ und ψ , sowie dem dimensionslosen Widerstand ρ parametrisieren läßt. Nach VILENKIN(1969) können wir Funktionen $f(\phi, \rho, \psi)$ spektral zerlegen

$$f(\phi, \rho, \psi) = \frac{1}{4\pi} \sum_{m,n,\varepsilon} \left[\int_0^\infty a_{mn}^\varepsilon(q) \mathcal{P}_{mn}^{(-\frac{1}{2}+iq,\varepsilon)}(\mathbf{T}) q \tanh[\pi(q+i\varepsilon)] dq + \right.$$

$$+ \left. \sum_{\ell=1-\varepsilon}^{\infty} \left(\ell - \frac{1}{2}\right) b_{mn}^{\varepsilon}(\ell) \mathcal{P}_{mn}^{(\ell, \varepsilon)}(\mathbf{T}) \right]. \quad (3.35)$$

In dieser Notation sind m und n ganzzahlig für $\varepsilon = 0$ und halbzahlig für $\varepsilon = \frac{1}{2}$. $\mathcal{P}_{mn}^{(-\frac{1}{2}+iq, \varepsilon)}(\mathbf{T})$ sind die **unitären Prinzipalserien** $\mathcal{P}_{mn}^{\pm, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T})$ und $\mathcal{P}_{mn}^{(\ell, \varepsilon)}$ die **diskreten Serien** $\mathcal{D}_{mn}^{\pm, \ell}(\mathbf{T})$. $+$ steht für $\varepsilon = 0$ und $-$ für $\varepsilon = \frac{1}{2}$. Die Spektralkoeffizienten a_{mn}^{ε} und b_{mn}^{ε} sind durch

$$a_{mn}^{\varepsilon}(q) = \int_{-2\pi}^{2\pi} \int_{-2\pi}^{2\pi} \int_0^{\infty} f(\phi, \rho, \psi) \overline{\mathcal{P}_{mn}^{(-\frac{1}{2}+iq, \varepsilon)}(\mathbf{T})} d\rho d\phi d\psi \quad (3.36)$$

und

$$\begin{aligned} b_{mn}^{\varepsilon}(\ell) &= (-)^{m-n} \frac{\Gamma(\ell + m + \varepsilon + 1)\Gamma(\ell - m - \varepsilon + 1)}{\Gamma(\ell + n + \varepsilon + 1)\Gamma(\ell - n - \varepsilon + 1)} \times \\ &\times \int_{-2\pi}^{2\pi} \int_{-2\pi}^{2\pi} \int_0^{\infty} f(\phi, \rho, \psi) \overline{\mathcal{P}_{mn}^{(\ell, \varepsilon)}(\mathbf{T})} d\rho d\phi d\psi \end{aligned} \quad (3.37)$$

gegeben.

(3.35) - (3.37) sind einigermaßen kompliziert. Wir aber wollen nur Funktionen $f(\rho)$ des Widerstandes allein analysieren. Diese Funktionen sind unabhängig von den Euler-Winkeln, und die ganze Winkelabhängigkeit der Darstellungsmatrizen steckt in Phasenfaktoren [s. (3.7)]. Dies hat einschneidende Konsequenzen für die Spektralkoeffizienten (3.35). Nach Ausführung der Winkelintegration überlebt lediglich der (0,0)-Koeffizient, alle anderen sind identisch Null. Dies vereinfacht die Spektralanalyse für Funktionen des Widerstandes zu

$$f(\rho) = \int_0^{\infty} a(q) \mathcal{P}_{00}^{(-\frac{1}{2}+iq, 0)}(\mathbf{T}) 2q \tanh(\pi q) dq \quad (3.38)$$

mit dem Spektralkoeffizienten

$$a(q) = \int_0^{\infty} f(\rho) P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho) d\rho. \quad (3.39)$$

Die beiden diskreten Serien $\mathcal{D}_{mn}^{\pm, \ell}$ und $\mathcal{P}_{mn}^{-, -\frac{1}{2}+iq}$ besitzen kein (0,0)-ME und verschwinden völlig. Dann wurde die Notation zu

$$a(q) = a_{00}^0(q), \quad (3.40)$$

$$P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho) = \mathcal{P}_{00}^{(-\frac{1}{2}+iq, 0)}(\mathbf{T}) \quad (3.41)$$

verkürzt und $P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho) = \overline{P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho)}$ verwendet.

(3.38) und (3.39) ist gerade die Entwicklung von Funktionen des Widerstandes nach konischen Funktionen, von der ich am Ende des 2-ten Abschnittes

sprach. Die konischen Funktionen lassen sich auch als hypergeometrische Funktionen ausdrücken

$$P_{-\frac{1}{2}+iq}(1+2\rho) = {}_2F_1\left(\frac{1}{2}+iq, \frac{1}{2}-iq, 1, -\rho\right). \quad (3.42)$$

(3.38) und (3.39) liefern uns auch alles, um das Ensemble-Mittel für beliebige Funktionen des Widerstandes zu bestimmen. Mittelung von (3.38) gibt

$$\langle f(\rho) \rangle_N = \int_0^\infty a(q) \left[\langle \mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T}) \rangle_{00}^N \right] 2q \tanh(\pi q) dq, \quad (3.43)$$

wenn man berücksichtigt, daß ρ in (3.38) der Gesamtwiderstand ist, wegen der Darstellungseigenschaft der $\mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2}+iq}$'s

$$\mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) = \mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T}_N) \dots \mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T}_1) \quad (3.44)$$

gilt und die Mittelwertbildung mit der Integration über q vertauscht.

Abgesehen von der Schwierigkeit das (0,0)-ME der N -ten Potenz der unendlichdimensionalen Matrix $\langle \mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T}) \rangle$ zu berechnen, womit wir uns noch im 4-ten Kapitel beschäftigen werden, lösen (3.39) und (3.43) das Problem der Mittelung für alle über der Gruppenmannigfaltigkeit quadratintegrablen Funktionen. Quadratintegabel?

ρ , ρ^2 , $\sigma = 1/\rho$, $\ln(1+\rho)$, um nur ein paar Beispiele zu nennen, sind nicht quadratintegabel über $[0, \infty[$.

Mittelung wichtiger Funktionen des Widerstandes, die nicht quadratintegabel über $SU(1,1)$ sind und die Verteilungsfunktion.

Die eben genannten Beispiele sind Vertreter einer ganz bestimmten Klasse von Funktionen $1/f^{0,\infty}(\rho)$, welche nur am Rand des Intervalls $[0, \infty[$ Singularitäten besitzen, d.h. für die gilt

$$\left. \begin{aligned} \lim_{\rho \rightarrow 0} f^{0,\infty}(\rho) = 0 \\ \lim_{\rho \rightarrow \infty} f^{0,\infty}(\rho) = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.45)$$

Der Trick ist nun die Singularitäten aus dem Integrationsbereich wegzuschieben, bzw. geeignet zu dämpfen, so daß der Spektralkoeffizient (3.39) existiert. Für alle gegenwärtig in der Literatur diskutierten Funktionen des Widerstandes erreichen wir dies durch die Hilfsfunktion³

$$f_{\delta,s}(\rho) = \frac{e^{-\rho s}}{\delta + f^{0,\infty}(\rho)} \quad (3.46)$$

³Die Dämpfung mit $e^{-\rho s}$ ist sehr bekannt [s. z.B. MESSIAH(1982), QMI, Ch.V, §7].

mit $\delta > 0$ und $\text{Re}(s) > 0$. Den uns eigentlich interessierenden Mittelwert bekommen wir dann durch Grenzübergang in **(3.43)**

$$\left\langle \frac{1}{f^{0,\infty}(\rho)} \right\rangle_N = \lim_{\delta, s \rightarrow 0} \langle f_{\delta, s}(\rho) \rangle_N. \quad (3.47)$$

Dieser Grenzübergang existiert genau dann, wenn $\langle \frac{1}{f^{0,\infty}(\rho)} \rangle_N$ überhaupt existiert, d.h., wenn

$$\left\langle \frac{1}{f^{0,\infty}(\rho)} \right\rangle_N = \int_0^\infty \frac{p_N(\rho)}{f^{0,\infty}(\rho)} d\rho \quad (3.48)$$

existiert, wo $p_N(\rho)$ die Verteilungsfunktion für N Streuer ist. Dies liegt daran, daß

$$\langle f_{\delta, s}(\rho) \rangle_N = \int_0^\infty f_{\delta, s}(\rho) p_N(\rho) d\rho \quad (3.49)$$

für $\delta \neq 0$, $s \neq 0$ mit der durch die Spektralanalyse gewonnenen Funktion übereinstimmt. Auf die Reihenfolge der Grenzwertbildung und Mittelung in **(3.47)** ist zu achten.

Außer diesem allgemeinen Verfahren gibt es für gewisse *rationale* Funktionen des Widerstandes noch eine weitere Möglichkeit, die einfacher sein dürfte.⁴ Dazu beobachten wir zuerst

$$p_N(s) = \langle e^{-\rho s} \rangle_N = \int_0^\infty p_N(\rho) e^{-\rho s} d\rho. \quad (3.50)$$

Der Mittelwert von $e^{-\rho s}$ ist gerade die Laplace-Transformierte der Verteilungsfunktion. Für diese können wir daher schreiben

$$p_N(\rho) = \frac{1}{2\pi} \int_{\varepsilon - i\infty}^{\varepsilon + i\infty} \langle e^{-\rho s} \rangle_N e^{\rho s} ds, \quad \varepsilon > 0. \quad (3.51)$$

Setzen wir jetzt in **(3.39)** und **(3.43)** $f(\rho) = e^{-\rho s}$, dann diesen Ausdruck in **(3.51)** ein und vertauschen die inverse Laplace-Transformation mit der Integration über q , dann bekommen wir

$$p_N(\rho) = \int_0^\infty \left[\langle \mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2} + iq}(\mathbf{T}) \rangle_N \right]_{00} P_{-\frac{1}{2} + iq}(1 + 2\rho) 2q \tanh(\pi q) dq$$

(3.52)

Dies ist die langgesuchte Formel für die Verteilungsfunktion. Das gleiche Resultat erhält man auch, wenn man, wie am Ende des 2-ten Abschnittes vorgeschlagen, die Vollständigkeitsrelation für die konischen Funktionen verwendet.

⁴Die nachfolgend beschriebene Methode läßt sich vermutlich auf *alle* rationalen Funktionen ausdehnen, doch lohnt der Aufwand hier nicht.

Die Integration von (3.52) gibt einige Probleme auf, die nicht unbekannt sind. Eine grobe Sattelpunktabschätzung von (3.52) im Landauer-Limes (s. IV.3) liefert ein Ergebnis wie (5.22) von MELLO(1986) und ist daher unbrauchbar.

Ähnliche Schwierigkeiten fand auch ABRIKOSOV(1981), der Potentiale vom Typ *Gaußschen weißen Rauschens* mit einer ganz anderen Methode untersuchte. Dessen asymptotischer Ausdruck Gl.(18) für die Verteilungsfunktion reproduzierte, im Gegensatz zum exakten Ausdruck Gl.(16), die Momente verschiedener Funktionen des Widerstandes nicht richtig.

Im Landauer-Limes läßt sich das Problem lösen, indem man für die konischen Funktionen im Integranden von (3.52) geeignete Integraldarstellungen verwendet. Dies ist nötig, da MELLO(1986) daran fehlgeschlagen ist, daß im Limes $\rho \rightarrow \infty$ $\frac{\partial}{\partial q} P_{-\frac{1}{2}+iq}(1+2\rho)$ divergiert.

Dann bemerke ich noch, daß, wenn wir (3.52) zur Mittelwertbildung verwenden wollen, wir nur für über $[0, \infty[$ quadratintegrale Funktionen des Widerstandes die Integration über ρ mit der Integration über q vertauschen dürfen.

Gehen wir jetzt wieder zu den Gln.(3.50) und (3.51) zurück. Differenzieren wir (3.50) m -mal und bilden dann den Limes $s \rightarrow 0$, so bekommen wir

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^m}{ds^m} p_N(s) = \lim_{s \rightarrow 0} \int_0^\infty p_N(\rho) (-\rho)^m e^{-\rho s} d\rho = (-)^m \langle \rho^m \rangle_N, \quad (3.53)$$

d.h. Differentiation der Laplace-Transformierten der Verteilungsfunktion gibt uns alle positiven ganzzahligen Momente des Widerstandes. Analog liefert uns Integration von (3.50) alle negativen ganzzahligen Momente. Dann können wir noch alle ganzzahligen Momente von $\rho + \xi$ berechnen, indem wir (3.50) mit $e^{-\xi s}$ multiplizieren. Bevor ich die Ergebnisse dieses Abschnittes übersichtlich zusammenstelle, noch ein paar Bemerkungen, zuerst zu $\ln(1 + \rho)$.

Es ist kaum zu erwarten, daß man für $\ln(1 + \rho)$ den Spektralkoeffizienten (3.42) ausrechnen kann. Es gilt aber [PENDRY(1988), PESCHEL(1989)]

$$\ln(1 + \rho) = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{d}{dN} e^{\ln(1+\rho)N} = \lim_{N \rightarrow 0} \frac{d}{dN} (1 + \rho)^N. \quad (3.54)$$

Dann gilt für die Laplace-Transformierte der Verteilungsfunktion von $\ln(1 + \rho)$

$$\begin{aligned} \tilde{p}_N(s) &= \int_0^\infty \tilde{p}_N[\ln(1 + \rho)] e^{-\ln(1+\rho)s} d\ln(1 + \rho) \\ &= \int_0^\infty \frac{1}{1 + \rho} \underbrace{\tilde{p}_N[\ln(1 + \rho)]}_{=p_N(\rho)} e^{-\ln(1+\rho)s} d\rho \\ &= \langle e^{-\ln(1+\rho)s} \rangle_N = \langle (1 + \rho)^{-s} \rangle_N. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Wenn wir, wie in (3.55), die Laplace-Transformierte direkt berechnen, dann existiert $\langle (1 + \rho)^{-s} \rangle_N$ für alle $s \in \mathbb{C}$. Der entsprechende Spektralkoeffizient (3.42)

ist jedoch nur für $\text{Re}(s) > 1/2$ definiert. Reichte bei Singularitäten am Rande des Integrationsbereichs stetige Fortsetzung aus, so müssen wir hier das aus der Spektralanalyse gewonnene $\tilde{p}_N(s)$ analytisch fortsetzen, um daraus die ganzzahligen Momente von $\ln(1 + \rho)$ zu erhalten. Für die inverse Laplace-Transformierte genügt es aber auch, den Integrationsweg geeignet zu wählen

$$\tilde{p}_N[\ln(1 + \rho)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\varepsilon + \frac{1}{2} - i\infty}^{\varepsilon + \frac{1}{2} + i\infty} \langle (1 + \rho)^{-s} \rangle_N (1 + \rho)^s ds \quad \varepsilon > 0. \quad (3.56)$$

Vertauschen wir wie in (3.51) die inverse Laplace-Transformierte mit der Integration über q , so bekommen wir eine zu (3.52) analoge Formel, wie es auch sein muß.

Jetzt noch zu der Frage, welche Spektralkoeffizienten man in einschlägigen Integraltafeln findet.

Spektralkoeffizienten

a) $(1 + \rho)^{-s}$:

mit (3.39) und (3.42) finden wir bei GRADSHTEYN & RYZHIK(1965), p.849, Gl.7.512 10

$$\begin{aligned} a(q, s) &= \int_0^\infty (1 + \rho)^{-s} {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + iq, \frac{1}{2} - iq, 1, -\rho\right) d\rho \\ &= \frac{\Gamma(-\frac{1}{2} + iq + s)\Gamma(-\frac{1}{2} - iq + s)}{\Gamma^2(s)}, \quad \text{Re}(s) > \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.57)$$

und mit (3.43), (3.55) und (2.34)

$$\begin{aligned} \tilde{p}_N(s) &= \langle |t|^{2s} \rangle_N \\ &= \int_0^\infty \left[\langle \mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2} + iq}(\mathbf{T}) \rangle_N \right]_{00} \frac{\Gamma(-\frac{1}{2} + iq + s)\Gamma(-\frac{1}{2} - iq + s)}{\Gamma^2(s)} 2q \tanh(\pi q) dq. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Dieses Ergebnis wurde bereits von KIRKMAN & PENDRY(1984b) [Gl.(69)] gefunden. Wir finden aber zusätzlich, daß das Gewicht $w(q) = 2q \tanh(\pi q)$ für alle q exakt ist.

(3.58) stimmt, wenn man von den (0,0)-ME'en der N -ten Potenzen der gemittelten unitären Darstellungen absieht, bis auf das i-Tüpfelchen mit Gl.(23) von ABRIKOSOV(1981) überein. Im Fall der Potentiale vom Typ Gaußschen weißen Rauschen liefern also Transfermatrixformalismus und die Diagrammtechnik von ABRIKOSOV & RYZHKIN(1978) das gleiche Resultat. Potentiale vom

Typ Gaußschen weißen Rauschen zeichnen sich innerhalb des Transfermatrixformalismus dadurch aus, daß sich die (0,0)-ME der N -ten Potenzen der gemittelten unitären Darstellungen *im wesentlichen* auf eine einzige Exponentialfunktion reduzieren.

b) $e^{-\rho s}$:

Hier finden wir je 2 Einträge, Gl. 1.19.2 und 1.19.3 bei OBERHETTINGER ET AL.(1973) und Gln. 7.5.22(1.,2.,3.) bei GRADSHSTEYN & RYZHIK(1965). Mir ist es aber nicht gelungen, die Whittaker-Funktion auf die modifizierte Bessel-Funktion zurückzuführen, oder umgekehrt. Die Argumente und Vorfaktoren passen nicht, so daß sich die Frage erhebt, ob nicht einer (oder beide) Einträge falsch sind. Im Licht dieser Möglichkeit sollte man auch das Integral für den Spektralkoeffizienten von $(1 + \rho)^{-s}$ nochmals überprüfen.

Zusammenfassung

Mit Hilfe der unitären Darstellungen der SU(1,1) lassen sich analytische Formeln für den Mittelwert nahezu jeder beliebigen Funktion des Widerstandes angeben. Im einzelnen gilt

$$\langle f(\rho) \rangle_N = \int_0^\infty a(q) [\langle \mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T}) \rangle_{00}^N] 2q \tanh(\pi q) dq \quad (3.59)$$

mit

$$a(q) = \int_0^\infty f(\rho) P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho) d\rho. \quad (3.60)$$

$P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho) = {}_2F_1(\frac{1}{2} + iq, \frac{1}{2} - iq, 1, -\rho) = \mathcal{P}_{00}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\rho)$ ist das (0,0)-ME der unitären Prinzipalserie $\mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2}+iq}$. ${}_2F_1$ ist die hypergeometrische Funktion und $P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho)$ die konische Funktion in der Variablen $1 + 2\rho$. \mathbf{T} bezeichnet ein Gruppenelement der SU(1,1).

Die ME von $\mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T})$ sind durch

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{mn}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T}) &= \Theta_{mn} \left(-\frac{1}{2} + iq \right) a^{m+n} b^{m-n} \times \\ &\times {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + iq + n, \frac{1}{2} - iq + n, n - m + 1; -|b|^2\right) \end{aligned} \quad (3.61)$$

für $n \geq m$ und durch

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{mn}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T}) &= \Theta_{mn} \left(-\frac{1}{2} + iq \right) a^{*-(m+n)} b^{*n-m} \times \\ &\times {}_2F_1\left(\frac{1}{2} + iq - n, \frac{1}{2} - iq - n, m - n + 1; -|b|^2\right) \end{aligned} \quad (3.62)$$

für $n \leq m$ mit

$$\Theta_{mn} \left(-\frac{1}{2} + iq \right) = \frac{1}{(n-m)!} \frac{\Gamma(-\frac{1}{2} + iq + n + 1)}{\Gamma(-\frac{1}{2} + iq + m + 1)} \quad n \geq m \quad (3.63)$$

und

$$\Theta_{mn} = (-)^{n-m} \Theta_{nm} \quad (3.64)$$

gegeben [VILENKIN(1969), Chap.VII, §1.4, Gl.(6) oder auch BARGMANN (1947), §10, aber verschiedene Basis beachten!]. Eine Integraldarstellung der ME bekommen wir, indem wir in (3.4) $\nu = -\frac{1}{2} + iq$ setzen

$$\mathcal{P}_{mn}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (be^{i\theta} + \bar{a})^{-\frac{1}{2}+iq+n} (\bar{b}e^{-i\theta} + a)^{-\frac{1}{2}+iq-n} e^{i(m-n)\theta} d\theta. \quad (3.65)$$

Weitere Integraldarstellungen, Reihenentwicklungen und andere u.U. nützliche Formeln findet man bei VILENKIN(1969).

Die beiden Verteilungsfunktionen $p_N(\rho)$ und $\tilde{p}_N(\ln(1 + \rho))$ sind durch

$$p_N(\rho) = \int_0^\infty [\langle \mathcal{P}^{+, -\frac{1}{2}+iq}(\mathbf{T}) \rangle^N]_{00} P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho) 2q \tanh(\pi q) dq \quad (3.66)$$

und

$$\tilde{p}_N(z = \ln(1 + \rho)) = e^z p_N(e^z - 1) \quad (3.67)$$

gegeben.

Berücksichtigen wir $|t|^2 = 1/(1 + \rho)$ und $|r|^2 = \rho/(1 + \rho)$, so lassen sich alle derzeit interessierenden und nun aufgelisteten Momente

1. $\langle |t|^2 \rangle_N, \langle |t|^4 \rangle_N$
2. $\langle |r|^2 \rangle_N, \langle |r|^4 \rangle_N$
3. $\langle \rho \rangle_N, \langle \rho^2 \rangle_N$
4. $\langle \sigma = 1/\rho \rangle_N, \langle \sigma^2 \rangle_N$
5. $\langle \ln(1 + \rho) \rangle_N, \langle \ln^2(1 + \rho) \rangle_N$
6. $\langle \ln \rho \rangle_N, \langle \ln^2 \rho \rangle_N,$

gemäß dem vorher Gesagten, aus der spektralen Analyse einer einzigen Funktion

$$g(\mu, \nu, s, \delta, \xi) = (\delta + \rho)^\mu (1 + \rho)^\nu e^{-(\xi + \rho)s} \quad (3.68)$$

mit $\delta, \xi \geq 0$; $\mu, \nu \in \mathbb{C}$ und $\text{Re}(s) > 0$ in Verbindung mit geeigneter Differentiation oder Integration sowie gewisser Grenzübergänge gewinnen.

4

Explizite Formeln: Das Problem der N -ten Potenz einer Matrix

4.1 Introduction

Im vorhergehenden Abschnitt habe ich gezeigt, wie sich die Berechnung des Mittelwertes einer beliebigen Funktion des Widerstandes auf die Berechnung des $(0,0)$ -ME der N -ten Potenz einer Matrix zurückführen läßt. Doch wie berechnet man das $(0,0)$ -ME der N -ten Potenz einer Matrix?

Üblicherweise [s. z.B. ERDÖS & HERNDON(1982), KIRKMAN & PENDRY(1984b), FELDERHOF & FORD(1986)] bestimmt man lediglich den betragsmäßig größten EW λ_{\max} der Matrix $\langle \mathcal{P}^{+, \nu}(\mathbf{T}) \rangle_N$ und sagt dann im thermodynamischen Limes sei $\langle f(\rho) \rangle_N \sim \lambda_{\max}^N$. Einzig die Arbeit von EBERLE (1982) bildet eine Ausnahme. Eberle benutzte die von Erdös & Herndon gewonnenen 3D bzw. 5D Darstellungen. In deren Basis steckt der Widerstand im $(1,1)$ -ME der 3D und das Quadrat des Widerstandes im $(2,2)$ -ME der 5D Darstellung. Eberles Gln.(3.27) und (C.10) sind nun die exakten und expliziten Ausdrücke für das $(1,1)$ bzw. $(2,2)$ Element der N -ten Potenz einer beliebigen 3D bzw. 5D Matrix für den Spezialfall, daß alle EW verschieden sind. Eberles Formeln lassen sich aber noch einfacher schreiben (s. IV.2). Unter explizit verstehen wir, daß das ME der N -ten Potenz \mathbf{A}^N einer Matrix \mathbf{A} allein durch die EW und ME von \mathbf{A} ausgedrückt ist.

Bemerkenswert ist noch, daß es Eberle mit Hilfe der *Theorie symmetrischer Funktionen* gelungen ist, die EW zu eliminieren und durch die Koeffizienten des charakteristischen Polynoms von \mathbf{A} zu ersetzen. Seine resultierenden Gln.(3.28)-(3.31) sowie (C.11) und (C.12) sind vermutlich unabhängig von der Einschränkung der EW gültig, aber sehr unhandlich, kompliziert und was am schwerwiegendsten ist, das charakteristische Verhalten im thermodynamischen Limes ist nicht mehr

ersichtlich. Ich erwähne dies dennoch, da eine Fortentwicklung dieser Gedanken u.U. weiterführen und sehr nützliche Formeln liefern kann. Kehren wir jetzt zum Anfang zurück:

Es genügt nicht, lediglich den größten EW λ_{\max} zu bestimmen. Zur Bestimmung von $\langle f(\rho) \rangle_N$ wird nur das (0,0)-ME benötigt. Dieses muß λ_{\max} nicht enthalten!

Triviales Beispiel: Die N -te Potenz einer Diagonalmatrix

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_k \end{pmatrix}^N = \begin{pmatrix} \lambda_1^N & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_k^N \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

Hier taucht jeder EW einzeln, entsprechend seiner Vielfachheit, ausschließlich in der Diagonalen auf.

Um entscheiden zu können, ob ein bestimmter EW in einem bestimmten ME auftaucht, benötigen wir i.a. exakte Formeln für die N -te Potenz einer Matrix. Nur manchmal läßt sich dies umgehen, z.B., wenn wir wissen, daß, wie für die endlichdimensionalen Darstellungen der Fall, das (0,0)-ME größer Eins sein muß und nur ein EW vom Betrag größer gleich 1 ist. Dann muß dieser zwangsläufig vorkommen und das Verhalten für große N bestimmen(s. IV.5).

4.2 Cauchy's integral formula

Nach einigen Mühen fand ich, daß die Cauchysche Integralformel auch für Funktionen beschränkter linearer Operatoren gültig ist. Wenn \mathbf{A} ein beschränkter linearer Operator und $f(\lambda)$ eine analytische Funktion ist, dann gilt

$$f(\mathbf{A}) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(\lambda)}{\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}} d\lambda, \quad (4.2)$$

wobei die Integrationskurve das Spektrum von \mathbf{A} im Inneren enthält. Für den endlichdimensionalen Fall findet man diese, dann auf STICKELBERGER(1881) [s.a. FROBENIUS(1896) S.11] zurückgehende Formel, in den Arbeiten von RINHART(1955) und AFRIAT(1959) erläutert. Im unendlichdimensionalen Fall findet man den Einstieg in den Originalarbeiten von LORCH(1942), DUNFORD(1943) und TAYLOR(1943), dann in dem Buch von LORCH(1962).

Ob, und wenn ja, wie (4.2) im unendlichdimensionalen Fall zur Erzielung konkreter Ergebnisse herangezogen werden kann, habe ich bisher nicht herausgefunden. Der Ansatz von EBERLE(1982) mit den symmetrischen Funktionen scheint aber unabhängig von der Dimension zu sein und könnte daher u.U. weiterhelfen.

Der endlichdimensionale Fall ist mit der Cramerschen Regel und dem Residuensatz einfach zu behandeln. Nach der Cramerschen Regel gilt

$$(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} = \frac{\mathbf{B}(\lambda)}{\Delta(\lambda)}. \quad (4.3)$$

$\mathbf{B}(\lambda)$ ist die **adjungierte Matrix**¹ zu $\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}$ und

$$\Delta(\lambda) = \prod_{k=1}^s (\lambda - \lambda_k)^{n_k} \quad (4.4)$$

ist die Determinante von $\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}$. λ_k sind die EW von \mathbf{A} mit der Vielfachheit n_k , so daß wir

$$\dim \mathbf{A} = \sum_{k=1}^s n_k \quad (4.5)$$

haben. Setzen wir (4.3) und (4.4) in (4.2) ein und wenden den Residuensatz an, dann bekommen wir die explizite Formel

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{k=1}^s \left[\mathbf{Z}^{k1} f^{(0)}(\lambda_k) + \mathbf{Z}^{k2} f'(\lambda_k) + \cdots + \mathbf{Z}^{kn_k} f^{(n_k-1)}(\lambda_k) \right]. \quad (4.6)$$

Die durch Differenzieren entstehenden Matrizen

$$\mathbf{Z}^{kj} = \frac{1}{(j-1)!(n_k-j)!} \left[\frac{\mathbf{B}(\lambda)}{\Delta_k(\lambda)} \right]_{\lambda=\lambda_k}^{(n_k-j)} \quad (4.7)$$

sind die **Komponenten**¹ von \mathbf{A} . $\Delta_k(\lambda)$ ist definiert als

$$\Delta_k(\lambda) := \frac{\Delta(\lambda)}{(\lambda - \lambda_k)^{n_k}}. \quad (4.8)$$

(4.3)-(4.8) stimmen mit den Ergebnissen von GANTMACHER(1959), Kap.V überein.

¹In der älteren Literatur findet man auch die Bezeichnungen:

adjungierte Matrix $\hat{=}$ Resolvente $\hat{=}$ Resultante
Komponente $\hat{=}$ Frobeniussche Kovariante

Weitere umfassende und klare Darstellungen der Theorie der Funktionen von Matrizen endlicher Dimension findet man bei GANTMACHER(1959), LAPPO-DANILEWSKY(1953) und SCHWERDTFEGER(1938). Diese Autoren wählen andere Zugänge als die Cauchysche Integralformel.

4.3 A simple condition for the occurrence of λ_{\max} in the (0,0)-matrix element

Gl.(4.6) entnimmt man für den Spezialfall $f(\mathbf{A}) = \mathbf{A}^N$, daß der EW λ_k genau dann für $N \rightarrow \infty$ (thermodynamischer Limes)² im (0,0)-ME vorkommt, wenn

$$\mathbf{Z}_{00}^{kj} \neq 0$$

für wenigstens ein $1 \leq j \leq n_k$ gilt. \mathbf{Z}_{00}^{kj} bezeichnet das (0,0)-ME der Komponente \mathbf{Z}^{kj} . Nach (4.7) bedeutet dies

$$\left[\frac{\mathbf{B}_{00}(\lambda)}{\Delta_k(\lambda)} \right]_{\lambda=\lambda_k}^{(n_k-j)} \neq 0. \quad (4.9)$$

Für einfache EW ($n_k = 1$) vereinfacht sich (4.9) zu

$$\mathbf{B}_{00}(\lambda_k) \neq 0, \quad (4.10)$$

und wir halten fest

Ist λ_{\max} ein einfacher EW von \mathbf{A} und $\mathbf{B}_{00}(\lambda_{\max}) \neq 0$, so dominiert λ_{\max} im thermodynamischen Limes und es gilt

$$[\mathbf{A}^N]_{00} \underset{N \rightarrow \infty}{\approx} \frac{\mathbf{B}_{00}(\lambda_{\max})}{\Delta_{\max}(\lambda_{\max})} \lambda_{\max}^N. \quad (4.11)$$

Der einfachste Fall von Interesse ist die 3D Darstellung der Transfermatrix $\mathcal{P}_f^{+,1}(\mathbf{T})$ bzw. $\mathcal{P}_f^{+,-2}(\mathbf{T})$ (s. III.2), die für den Mittelwert des Widerstandes maßgebend ist. Da die Eigenschaft (2.6) auch bei Mittelung erhalten bleibt (s. Anhang B), hat $\mathcal{P}_f^{+,1}(\mathbf{T})$ stets die Gestalt [s. a. (3.26)]

$$\mathcal{P}_f^{+,1}(\mathbf{T}) = \begin{pmatrix} a & b & c \\ e^* & d & e \\ c^* & b^* & a^* \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Damit bekommen wir

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{00}(\lambda) &= \begin{vmatrix} a - \lambda & b & c \\ e^* & d - \lambda & e \\ c^* & b^* & a^* - \lambda \end{vmatrix} \\ &= \lambda^2 - 2\text{Re}(a)\lambda + |a|^2 - |c|^2. \end{aligned} \quad (4.13)$$

²Es kann passieren, daß λ_k erst ab einer bestimmten Potenz von \mathbf{A} vorkommt.

Unter den Voraussetzungen von (4.11) liefert dies für das asymptotische Verhalten des Widerstandes [s. (3.28)]

$$\langle \rho \rangle_N \underset{N \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{2} \frac{\lambda_{\max}^2 - 2\operatorname{Re}(a)\lambda_{\max} + |a|^2 - |c|^2}{(\lambda_{\max} - \lambda_1)(\lambda_{\max} - \lambda_2)} \lambda_{\max}^N, \quad (4.14)$$

wobei λ_1 und λ_2 die beiden anderen EW von $\mathcal{P}_f^{+,1}(\mathbf{T})$ sind.

4.4 Special cases for \mathbf{A}^N

In diesem Abschnitt liste ich einige Spezialfälle für \mathbf{A}^N auf, in denen die allgemeine Formel (4.6) eine besonders einfache Gestalt annimmt, oder in denen es gar möglich ist, für unendlichdimensionale \mathbf{A} die N -te Potenz zu bestimmen.

1. \mathbf{A} endlichdimensional mit paarweise verschiedenen EW:

Da alle EW λ_k lediglich die Vielfachheit $n_k = 1$ besitzen, schrumpfen (4.6) und (4.7) zu

$$\mathbf{A}^N = \sum_{k=1}^s \mathbf{Z}^{k1} \lambda_k^N \quad (4.15)$$

und

$$\mathbf{Z}^{k1} = \frac{\mathbf{B}(\lambda_k)}{\Delta_k(\lambda_k)}. \quad (4.16)$$

Es gilt (4.4)

$$\Delta(\lambda) = \prod_{u=1}^s (\lambda - \lambda_u) \quad (4.17)$$

und (4.8)

$$\Delta_k(\lambda) = \prod_{\substack{u=1 \\ u \neq k}}^s (\lambda - \lambda_u). \quad (4.18)$$

Einsetzen in (4.15) gibt

$$\mathbf{A}^N = \sum_{k=1}^s \frac{\mathbf{B}(\lambda_k)}{\prod_{\substack{u=1 \\ u \neq k}}^s (\lambda_k - \lambda_u)} \lambda_k^N \quad (4.19)$$

oder auf gemeinsamen Hauptnenner gebracht

$$\mathbf{A}^N = \frac{\sum_{k=1}^s \prod_{\substack{i>j \\ i,j \neq k}} (\lambda_i - \lambda_j) \mathbf{B}(\lambda_k) \lambda_k^N}{\prod_{i>j} (\lambda_i - \lambda_j)} \quad (4.20)$$

Für den Fall einer 3×3 bzw. 5×5 Matrix sind dies genau Eberles Gln.(3.27) und (C.10).

2. Landauer-Limes:

Wie aus den vorangegangenen Abschnitten hervorgeht, ist eine **exakte** Lösung des Streuproblems äußerst schwierig. Um überhaupt irgendein Ergebnis zu erzielen, greifen die meisten Autoren daher zu groben Vereinfachungen. Betrachten wir dazu die in II.2 gefundene Zerlegung der Gesamttransfermatrix

$$\mathcal{P}_{00}^{+,\nu}(\mathbf{T}_{\text{ges}}) = \left[\mathcal{P}^{+,\nu}(\mathbf{A}_N) \mathcal{P}^{+,\nu}(e^{ik\xi_N \sigma_z}) \dots \mathcal{P}^{+,\nu}(e^{ik\xi_2 \sigma_z}) \mathcal{P}^{+,\nu}(\mathbf{A}_1) \right]_{00}. \quad (4.21)$$

Da nur das (0,0)-ME von Interesse ist, fallen, wie schon in III erwähnt, die beiden Phasenmatrizen am Rande von (2.45) weg. Wegen (2.24) und (3.7) gilt

$$\mathcal{P}_{qr}^{+,\nu}(e^{ik\xi_\ell \sigma_z}) = e^{iq2k\xi_\ell} \delta_{qr}. \quad (4.22)$$

Als Landauer-Limes bezeichnet man nun die Annahme, daß man über Abstand und Potentialform getrennt mitteln kann und daß bei der Mittelung über den Abstand alle Phasen mit gleicher Wahrscheinlichkeit vorkommen. Daß die erste Annahme das effektive Potential einer Atomkette nur unzulänglich beschreibt, wurde in III.1 gezeigt. Die Mängel der zweiten Annahme sind bei ERDÖS & HERNDON(1982) S.85 und 86 beschrieben. Sie läßt sich aber als Grenzfall bestimmter Verteilungen rechtfertigen. Dazu betrachten wir die im nächsten Kapitel näher untersuchte Poisson-Verteilung der Abstände

$$p(\xi_j) = p(\xi) = n e^{-n\xi} \quad j = 2, \dots, N, \quad (4.23)$$

mit $n = 1/\langle \xi \rangle$ der Dichte der Streuer und $\langle \xi \rangle$ dem mittleren Abstand benachbarter Streuer. Mitteln wir mit dieser Verteilung (4.22), dann folgt

$$\langle \mathcal{P}_{qr}^{+,\nu}(e^{ik\xi_\ell \sigma_z}) \rangle = \frac{n}{n + iq2k} \delta_{qr}. \quad (4.24)$$

Für $n/k = 2\pi\lambda/\langle \xi \rangle \ll 1$, was wir als Grenzfall kleiner Dichte bezeichnen, werden die Diagonalmatrixelemente, ausgehend vom (0,0)-ME, nach außen hin schnell

kleiner, so daß es nach LANDAUER(1970) gerechtfertigt erscheint, alle ME, bis auf das zentrale ME, durch Null zu ersetzen. (4.24) vereinfacht sich dann zu

$$\langle \mathcal{P}_{qr}^{+, \nu}(e^{ik\xi_\ell \sigma_z}) \rangle = \delta_{q0} \delta_{r0}, \quad (4.25)$$

d.h. einzig das (0,0)-ME $\langle \mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(e^{ik\xi_\ell \sigma_z}) \rangle$ hat den Wert 1, die übrigen ME sind identisch Null.

(4.25) führt dazu, daß sich in (4.21) lediglich die (0,0)-ME der Potentialmatrizen miteinander multiplizieren und damit skalares Verhalten bekommt

$$\langle \mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(\mathbf{T}_{\text{ges}}) \rangle = \mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(\mathbf{A}_N) \mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(\mathbf{A}_{N-1}) \cdots \mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(\mathbf{A}_1). \quad (4.26)$$

Mittelt man noch über die Potentialform oder nimmt lauter gleiche Potentiale an, so lautet das Resultat

$$\langle \mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(\mathbf{T}_{\text{ges}}) \rangle = \langle \mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(\mathbf{A}) \rangle^N. \quad (4.27)$$

Im Landauer-Limes läßt sich daher das (0,0)-ME der N -ten Potenz in allen, d.h. auch den unendlichdimensionalen Darstellungen, exakt angeben.

3. \mathbf{A} ist Darstellung einer niederdimensionalen Matrix:

Es gilt

$$\mathbf{A} = \Phi(\mathbf{T}) \quad (4.28)$$

und wegen der Darstellungseigenschaft

$$\mathbf{A}^N = \Phi(\mathbf{T})^N = \Phi(\mathbf{T}^N). \quad (4.29)$$

Die Bestimmung der N -ten Potenz von \mathbf{A} kann daher auf die Berechnung der N -ten Potenz von \mathbf{T} zurückgeführt werden. Dies ist um so lohnender, je niedriger die Dimension von \mathbf{T} ist.

Dieser Fall tritt z.B. beim periodischen Potential und bei dem im nächsten Kapitel betrachteten Limes hoher Streuerdichte auf. In beiden Fällen kann die Berechnung der N -ten Potenz von \mathbf{A} auf die Berechnung der N -ten Potenz der 2D Darstellung zurückgeführt werden.

wobei $\mathbf{Z}_{\mu\nu}^{kj}$ das $\mu\nu$ -te Element der Komponente \mathbf{Z}^{kj} ist. (4.32) können wir auch so schreiben:

$$[\mathbf{A}^N]_{\mu\nu} = \sum_{k=1}^s p_{\mu\nu}^k(N) \lambda_k^N \quad (4.33)$$

und $p_{\mu\nu}^k(N)$ sind Polynome in N zum EW λ_k . Da $\mathbf{B}(\lambda)$ und dessen Ableitungen in (4.7) nur linear auftauchen, lassen sich zu Satz 1 und 2 analoge Aussagen über den Grad der Polynome $p_{\mu\nu}^k$ gewinnen. Aus (4.32) folgt unmittelbar

Satz 3:

$$\text{Grad} p_{\mu\nu}^k = j - 1 \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{Z}^{kj} \neq 0 \\ \mathbf{Z}^{k\ell} = 0 \quad \forall \ell > j \end{array} \right\}. \quad (4.34)$$

Der zu Satz 2 analoge und wichtigste Satz lautet:

Satz 4:

$$\text{Grad} p_{\mu\nu}^k = n_k - 1 - m \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{B}_{\mu\nu}^{(m)}(\lambda_k) \neq 0 \\ \mathbf{B}_{\mu\nu}^{(m)}(\lambda_k) = 0 \quad \forall 0 \leq \ell < m \end{array} \right\}. \quad (4.35)$$

n_k ist die Vielfachheit des EW λ_k und m **die erste von Null verschiedene Ableitung von $\mathbf{B}_{\mu\nu}(\lambda_k)$** . $\mathbf{B}_{\mu\nu}(\lambda_k)$ ist das $\mu\nu$ -te Element der Adjungierten zu $(\mathbf{A} - \lambda_k \mathbf{I})$.

j und m in (4.34) und (4.35) sind im allgemeinen von j und m in (4.30) und (4.31) verschieden, und es gelten die Ungleichungen

$$\left. \begin{array}{l} j(4.34) \leq j(4.30) \\ m(4.35) \geq m(4.31) \end{array} \right\}. \quad (4.36)$$

Linearer Widerstand:

Für den 3D Fall bereitet es nun keine Schwierigkeiten, explizit die Bedingungen hinzuschreiben unter denen es ein vom exponentiellen Wachstum abweichendes Verhalten des Widerstandes gibt.

Nimmt man an, daß in 0-ter Näherung der Abstand benachbarter Streuer nicht mit der Potentialform gekoppelt ist, dann ist der Widerstand direkt proportional

zum (0,0)-ME der N -ten Potenz einer 3D Matrix \mathbf{A} . Es gilt also

$$\langle \rho \rangle_N \sim [\mathbf{A}^N]_{00}. \quad (4.37)$$

Mit Anhang B und den Ergebnissen des nächsten Abschnittes sind die EW von \mathbf{A} entweder reell oder konjugiert komplex, und ein EW von \mathbf{A} , der größte, der in das (0,0)-ME eingeht, ist reell und größer gleich 1. \mathbf{A} hat außerdem stets eine besondere Gestalt [s.(4.12)] und es gilt [s.(4.13)]

$$\mathbf{B}_{00}(\lambda) = \lambda^2 - 2\operatorname{Re}(a)\lambda + |a|^2 - |c|^2 \quad (4.38)$$

und

$$\mathbf{B}'(\lambda) = 2[\lambda - \operatorname{Re}(a)]. \quad (4.39)$$

Bezeichnen wir jetzt noch die EW von \mathbf{A} mit λ_1, λ_2 und λ_3 , dann sind genau die in den Tabellen (4.1) bis (4.4) klassifizierten Fälle nicht-exponentiellen Wachstums möglich.

Fall	Verwirklicht in den Jordan-Typen	Bedingung an die EW $1, -1$	Wachstum des Widerstandes für $N \rightarrow \infty$
$\lambda_1 = \lambda_2 = 1$ und $\lambda_3 \in \mathbb{R}$ mit $ \lambda_3 > 1$ und $\mathbf{B}(\lambda_3) = 0$, oder $ \lambda_3 < 1$.	$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \lambda_3 & \\ & & & \lambda_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}$	$\mathbf{B}_{00}(1) \neq 0$	$\rho \sim N$
		$\mathbf{B}_{00}(1) = 0$	$\rho = \text{konst.}$
$\lambda_1 = \lambda_2 = 1,$ $\lambda_3 = -1.$	$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & 0 \\ & & & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\mathbf{B}_{00}(1) \neq 0 \wedge \mathbf{B}_{00}(-1) = 0$	$\rho \sim N$
		$\mathbf{B}_{00}(1) \neq 0 \wedge \mathbf{B}_{00}(-1) \neq 0$	ρ steigt linear in Zackenlinie an.
		$\mathbf{B}_{00}(1) = 0 \wedge \mathbf{B}_{00}(-1) = 0$	$\rho = \text{konst.}$
		$\mathbf{B}_{00}(1) = 0 \wedge \mathbf{B}_{00}(-1) \neq 0$	ρ springt zwischen 2 Werten, je nachdem, ob N gerade oder ungerade ist.

Table 4.1 : Alle möglichen Fälle nicht-exponentiellen Wachstums des Widerstandes für 2 EW $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$.

Fall	Verwirklicht in den Jordan-Typen	Bedingung an die EW $1, -1$	Wachstum des Widerstandes für $N \rightarrow \infty$
$\lambda_1 = 1, \lambda_2 \neq \lambda_3;$ $\lambda_2, \lambda_3 \in \mathbb{R} \setminus \{1, -1\};$ $ \lambda_2 < 1$ oder $ \lambda_2 > 1$ und $\mathbf{B}_{00}(\lambda_2) = 0;$ $ \lambda_3 < 1$ oder $ \lambda_3 > 1$ und $\mathbf{B}_{00}(\lambda_3) = 0.$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \lambda_3 \end{pmatrix}$	<p>In diesem Fall ist wegen $\rho > 0$, stets $\mathbf{B}_{00}(1) \neq 0$ erfüllt.</p>	$\rho = konst.$
$\lambda_1 = 1, \lambda_2 = \lambda_3;$ $\lambda_2, \lambda_3 \in \mathbb{R} \setminus \{1, -1\};$ $ \lambda_2 < 1$ oder $ \lambda_2 > 1$ und $\mathbf{B}_{00}(\lambda_2) = \mathbf{B}'_{00}(\lambda_2) = 0.$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \lambda_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 1 \\ 0 & 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$	<p>In diesem Fall ist wegen $\rho > 0$, stets $\mathbf{B}_{00}(1) \neq 0$ erfüllt.</p>	$\rho = konst.$
$\lambda_1 = 1, \lambda_2 = -1,$ $\lambda_3 \in \mathbb{R} \setminus \{1, -1\};$ $ \lambda_3 < 1$ oder $ \lambda_3 > 1$ und $\mathbf{B}_{00}(\lambda_3) = 0.$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ & -1 & \\ & & \lambda_3 \end{pmatrix}$	<p>$\mathbf{B}_{00}(1) \neq 0 \wedge \mathbf{B}_{00}(-1) = 0$ $\mathbf{B}_{00}(1) \neq 0 \wedge \mathbf{B}_{00}(-1) \neq 0$</p>	$\rho = konst.$ ρ springt.

Table 4.3 : Alle möglichen Fälle nicht-exponentiellen Wachstums des Widerstandes für 1 EW $\lambda_1 = 1$.

Fall	Verwirklicht in den Jordan-Typen	Bedingung an die EW $1, -1$	Wachstum des Widerstandes für $N \rightarrow \infty$
$\lambda_1 = 1, \lambda_2 = \lambda_3 = -1;$ $\mathbf{B}_{00}(-1) = 0.$	$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\mathbf{B}'_{00}(-1) = 0$	$\rho = \textit{konst.}$
		$\mathbf{B}'_{00}(-1) \neq 0$	$\rho \textit{ springt.}$
$\lambda_1 = 1, \lambda_2 = \lambda_3^*;$ $\lambda_2, \lambda_3 \notin \mathbb{R} \setminus \{1, -1\};$ $ \lambda_2 < 1$ oder $ \lambda_2 > 1$ und $\mathbf{B}_{00}(\lambda_2) = 0.$	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \lambda_3^* \end{pmatrix}$	In diesem Fall ist wegen $\rho > 0,$ stets $\mathbf{B}_{00}(1) \neq 0$ erfüllt.	$\rho = \textit{konst.}$
$\lambda_1 = 1, \lambda_2 = \lambda_3^*;$ $\lambda_2, \lambda_3 \notin \mathbb{R} \setminus \{1, -1\};$ $ \lambda_2 = 1$ [s.a. Tabelle(2.1): periodisches Potential, Energie der Elektronen im Energieband.]	$\begin{pmatrix} 1 & & \\ & \lambda_2 & \\ & & \lambda_3^* \end{pmatrix}$	In diesem Fall ist wegen $\rho > 0,$ stets $\mathbf{B}_{00}(1) \neq 0$ erfüllt.	$\rho \textit{ oszilliert.}$

Table 4.3 : Fortsetzung

4.6 Bounds for the eigenvalues which occur in the (0,0)-matrix element

Aus den Eigenschaften der Legendre-Polynome und den konischen Funktionen lassen sich einige Einschränkungen für die EW, die im (0,0)-ME vorkommen angeben, die weitgehend **unabhängig** vom konkreten Mittelungsprozeß sind. Einzige Voraussetzung ist, daß die Mittelung auf die Berechnung der N -ten Potenz einer Matrix führt, und daß N ausschließlich im Exponenten dieser Matrix auftaucht.

Eine Integraldarstellung der Legendre-Funktionen ist [VILENKIN(1969)]

$$P_\nu(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (z - \sqrt{z^2 - 1} \cos \varphi)^\nu d\varphi, \quad (4.40)$$

woraus wir als erstes für **alle** Legendre-Funktionen

$$P_\nu(1) = 1 \quad (4.41)$$

ablesen. Für $|z| \gg 1$ finden wir das asymptotische Verhalten zu

$$P_\nu(z) \sim z^\nu. \quad (4.42)$$

Insbesondere gilt daher für $z = 1 + 2\rho$

$$P_\nu(1 + 2\rho) \sim \rho^\nu, \quad \rho \gg 1. \quad (4.43)$$

Für die Legendre-Polynome und damit für das (0,0)-ME der endlichdimensionalen Darstellungen heißt das

$$P_n(1 + 2\rho) \sim \rho^n, \quad \rho \gg 1 \quad (4.44)$$

und für das (0,0)-ME der unitären Darstellungen zum Index $\nu = -\frac{1}{2}$

$$P_{-\frac{1}{2}}(1 + 2\rho) \sim \frac{1}{\sqrt{\rho}}, \quad \rho \gg 1. \quad (4.45)$$

Für den Limes $\rho \rightarrow \infty$ hat dies

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} P_n(1 + 2\rho) = \infty \quad (4.46)$$

und

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} P_{-\frac{1}{2}}(1 + 2\rho) = 0 \quad (4.47)$$

zur Folge.

Ich zeige jetzt, daß für $\rho \in]0, \infty[$ $P_n(1 + 2\rho)$ streng monoton wächst und $P_{-\frac{1}{2}}(1 + 2\rho)$ streng monoton fällt. Dazu differenzieren wir (4.40) nach z

$$P'_\nu(z) = \frac{\nu}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} (z - \sqrt{z^2 - 1} \cos \varphi)^{\nu-1} \left(1 - \frac{z}{\sqrt{z^2 - 1}} \cos \varphi\right) d\varphi. \quad (4.48)$$

Für $z \in]1, \infty[$, was $\rho \in]0, \infty[$ entspricht, ist der Integrand für alle φ positiv. Wir haben daher

$$\text{sign}(P'_\nu(z)) = \text{sign}(\nu), \quad (4.49)$$

oder anders ausgedrückt

$$P'_n(1 + 2\rho) > 0 \quad \forall \rho \in]0, \infty[, \quad (4.50)$$

$$P'_{-\frac{1}{2}}(1 + 2\rho) < 0 \quad \forall \rho \in]0, \infty[, \quad (4.51)$$

was die strenge Monotonie beweist. Zusammen mit (4.41), (4.46) und (4.47) heißt das für den Wertebereich der Legendre-Polynome und der konischen Funktion zum Index $\nu = -\frac{1}{2}$

$$1 \leq P_n(1 + 2\rho) < \infty \quad \forall \rho \in [0, \infty[, \quad (4.52)$$

$$0 < P_{-\frac{1}{2}}(1 + 2\rho) \leq 1 \quad \forall \rho \in [0, \infty[. \quad (4.53)$$

Wendet man auf (4.40) die Dreiecksungleichung an, d.h.

$$\left| \int f(z) dz \right| \leq \int |f(z)| dz, \quad (4.54)$$

so folgt noch für die konischen Funktionen

$$0 \leq \left| P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho) \right| \leq P_{-\frac{1}{2}}(1 + 2\rho) \leq 1 \quad \forall \rho \in [0, \infty[. \quad (4.55)$$

Ebenso folgt mit Induktion für die Legendre-Polynome aus der bekannten Rekursionsgleichung

$$(n + 1)P_{n+1}(1 + 2\rho) = (2n + 1)(1 + 2\rho)P_n(1 + 2\rho) - nP_{n-1}(1 + 2\rho) \quad (4.56)$$

die Ungleichung

$$P_{n+1}(1 + 2\rho) \geq P_n(1 + 2\rho) \quad \forall \rho \in [0, \infty[, \quad (4.57)$$

wobei das Gleichheitszeichen nur für $\rho = 0$ erfüllt ist. Mit erneuter Induktion bekommen wir die noch schärfere Ungleichung

$$P_{n+1}(1 + 2\rho) \geq P_1(1 + 2\rho)P_n(1 + 2\rho) \quad \forall \rho \in [0, \infty[\quad (4.58)$$

und damit letztendlich

$$P_n(1 + 2\rho) \geq [P_1(1 + 2\rho)]^n \quad \forall \rho \in [0, \infty[, \quad (4.59)$$

wobei das Gleichheitszeichen wieder nur für $\rho = 0$ erfüllt ist.

Da die Ungleichungen (4.52), (4.53), (4.55), (4.57) und (4.59) $\forall \rho \in [0, \infty[$ gelten, sind sie sicher auch für die Mittelwerte richtig. Daher gilt

$$0 \leq \left| \langle P_{-\frac{1}{2}+iq}(1 + 2\rho) \rangle_N \right| \leq \langle P_{-\frac{1}{2}}(1 + 2\rho) \rangle_N \leq 1, \quad (4.60)$$

$$1 \leq \langle P_n(1 + 2\rho) \rangle_N \leq \langle P_{n+1}(1 + 2\rho) \rangle_N < \infty, \quad (4.61)$$

$$1 \leq \langle [P_1(1 + 2\rho)]^n \rangle_N \leq \langle P_n(1 + 2\rho) \rangle_N \quad (4.62)$$

(4.60) erhalten wir aus (4.53) und (4.55), wenn wir

$$\left| \int p_N(\rho) f(\rho) d\rho \right| \leq \int p_N(\rho) |f(\rho)| d\rho \quad (4.63)$$

berücksichtigen.

Die Ungleichungen (4.61) und (4.60) haben nun drastische Einschränkungen für die EW, die im (0,0)-ME auftauchen können, zur Folge. Für das (0,0)-ME der endlichdimensionalen Darstellungen haben wir mit (4.33)

$$\langle P_n(1 + 2\rho) \rangle_N = \sum_{k=1}^s p_{00}^k(N) \lambda_k^N. \quad (4.64)$$

Da (4.64) für alle N gültig ist, erzwingt diese, zusammen mit der Ungleichung (4.61), für die EW, die im (0,0)-ME vorkommen:

Die EW, die im (0,0)-ME der gemittelten endlichdimensionalen Darstellungen vorkommen, sind entweder reell oder konjugiert komplex.

Der größte EW, der im (0,0)-ME der gemittelten endlichdimensionalen Darstellungen der Gesamttransfermatrix vorkommt, ist stets reell und größer gleich 1, und es gilt die Ungleichung³

$$\lambda_{\max}^{[n+1]} \geq \lambda_{\max}^{[n]} \geq 1. \quad (4.65)$$

Mit $\lambda_{\max}^{[n]}$ bezeichne ich den größten EW, der in $\langle P_n(1+2\rho) \rangle_N$ vorkommt. Berücksichtigen wir jetzt, daß $P_n(1 + 2\rho)$ ein Polynom in ρ vom Grad n , und somit $\langle P_n(1 + 2\rho) \rangle_N$ eine Summe von Momenten ist, so heißt dies für die Momente des Widerstandes:

Die Momente des Widerstandes wachsen stets exponentiell mit N , es sei denn, "Eins" ist EW der in die N -te Potenz zu erhebenden Matrix. (4.66)

(4.66) ist das Analogon zu dem bekannten Theorem von FURSTENBERG (1963).

Ich bemerke zuerst, daß das Furstenberg Theorem nur eine Aussage über die Norm des Produktes von Zufallsmatrizen der $SL(n, \mathbb{R})$ liefert. Nicht so für deren Darstellungen!!

Dann weise ich an dieser Stelle noch einmal darauf hin, daß es für exponentielles Wachstum der Momente des Widerstandes zwar notwendig, aber nicht

³Falls man noch $\langle [P_1(1 + 2\rho)]^n \rangle_N \geq \langle P_1(1 + 2\rho) \rangle_N^n$ [s.(4.62)] zeigen kann, gilt zusätzlich $\lambda_{\max}^{[n]} \geq \left[\lambda_{\max}^{[1]} \right]^n \geq 1$.

hinreichend ist, daß ein EW, der in die N -te Potenz zu erhebenden Matrix reell und größer 1 ist. Dieser braucht ja im (0,0)-ME gar nicht vorzukommen. Dagegen liefert (4.66) eine hinreichende Bedingung, wenn wir "Eins" als EW ausschließen können. Dann bleibt nur noch die Frage offen, welcher der reellen EW größer 1 dominiert.

Für die unitären Darstellungen ist die Argumentation noch nicht völlig klar, wobei ich feststelle, daß die gemittelten Matrizen, außer der in Anhang B genannten Symmetrie, i.a. keine besonderen Eigenschaften besitzen. Insbesondere sind sie weder hermitesch noch unitär, aber beschränkt. Über die Art des Spektrums ist bisher auch nichts bekannt. Unter der Annahme, daß eine Spektralzerlegung existiert, gilt aber eine zu dem endlichdimensionalen Fall analoge Überlegung. Die Ungleichung (4.60) liefert dann für alle EW $\lambda^{[-\frac{1}{2}+iq]}$, die im (0,0)-ME der gemittelten unitären Darstellungen der Gesamttransfermatrix auftauchen

$$\left| \lambda^{[-\frac{1}{2}+iq]} \right| \leq 1. \quad (4.67)$$

Dabei müssen die zu den EW mit Betrag 1 gehörenden Jordan-Blöcke entweder diagonalisierbar sein oder dürfen keinen Beitrag liefern.⁴ Analog dem endlichdimensionalen Fall schließen wir:

Die EW, die im (0,0)-ME der gemittelten unendlichdimensionalen Darstellung $\mathcal{P}^{+,-\frac{1}{2}}(\mathbf{T}_{\text{ges.}})$ der Gesamttransfermatrix vorkommen sind entweder reell oder konjugiert komplex.

Der größte in $\langle P_{-\frac{1}{2}}(1+2\rho) \rangle_N$ vorkommende EW ist reell und

$$0 < \lambda_{\max}^{[-\frac{1}{2}]} \leq 1. \quad (4.68)$$

Daß $\lambda_{\max}^{[-\frac{1}{2}]}$ echt größer Null sein muß, folgt aus der schärferen Ungleichung (4.53). Nicht zuletzt gilt

$$0 \leq \left| \lambda_{\max}^{[-\frac{1}{2}+iq]} \right| \leq \lambda_{\max}^{[-\frac{1}{2}]} \leq 1. \quad (4.69)$$

Der mittlere Teil von Gl.(4.69) wurde bereits von KIRKMAN & PENDRY (1984b) gefunden.

Bisher ist nicht klar, welche Konsequenzen (4.69) nach sich zieht, wobei man berücksichtigen muß, daß man über q noch zu integrieren hat. Unklar ist weiter, wie sich bei den unitären Darstellungen, die bei den endlichdimensionalen Darstellungen gefundene Besonderheit des EW "Eins" äußert. Hierzu sind noch weitergehende Überlegungen notwendig.

⁴Bei unendlichfacher Entartung gilt dies auch für alle EW mit $\left| \lambda^{[-\frac{1}{2}+iq]} \right| < 1$. Ich möchte bemerken, daß es im unendlichdimensionalen Fall, auch wenn alle EW Null sind, zu Wachstum einzelner ME proportional $N!$ kommen kann.

5

The resistance at high density of scatterers¹

5.1 Introduction

In diesem Abschnitt betrachte ich ein Modell [s. Bild (5.1)], in dem N δ -Potentiale der Stärke V_δ so auf ein Längenelement der Länge L verteilt sind, daß die Wahrscheinlichkeit, daß ein Potential an einem bestimmten Punkt sitzt, für alle Punkte gleich ist. ObdA können wir 0 als linkes Ende des Segmentes wählen.

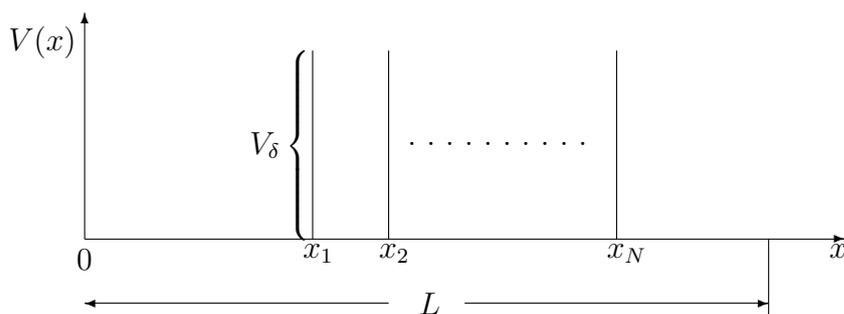


Figure 5.1 : N δ -potentials of strength V_δ distributed onto a length element with the fixed length L .

¹Der Inhalt dieses Kapitels entspricht im wesentlichen einer ausgearbeiteten und erweiterten Version eines Vortrages, den ich in Lausanne, bzw. des ersten Teils eines Vortrages, den ich in Aachen hielt.

Für die Verteilungsfunktion gilt dann

$$p_N(x_1, \dots, x_N) = \frac{N!}{L^N} \quad \forall 0 \leq x_1 < x_2 \dots < x_N \leq L. \quad (5.1)$$

Diese ist normiert, wie man leicht an dem Normierungsintegral

$$\int_0^L dx_N \int_0^{x_N} dx_{N-1} \dots \int_0^{x_2} dx_1 p_N(x_1, \dots, x_N) = 1 \quad (5.2)$$

erkennen kann.

Dieses Modell wurde bereits, ohne Angabe von Ergebnissen, von ERDÖS & HERNDON(1972) (Modell A) erwähnt. Dann wurde es von SAK & KRAMER(1981) (Ensemble 1) in dem Grenzfall niedriger Dichte der Streuer ($\frac{N}{kL} \ll 1$) untersucht, ohne daß Abweichungen vom Landauer-Verhalten (s. Einleitung) beobachtet wurden.

Der andere Grenzfall hoher Dichte der Streuer ($\frac{N}{kL} \gg 1$) wird dann erstmals wieder von ERDÖS & HERNDON(1982) (jetzt Modell C) erwähnt. Nach beiden Autoren weist dieser Grenzfall einige besondere Eigenschaften auf. So zitieren sie numerische Studien von EBERLE & ERDÖS(1981), die zeigen würden, daß bei wachsender Konzentration der Streuer

$$\langle \rho \rangle_{N,L} \underset{\frac{N}{L} \rightarrow \infty}{\sim} e^{\beta\sqrt{N}}, \quad (5.3)$$

und noch überraschender, daß

$$\frac{\langle \rho^2 \rangle_{N,L} - \langle \rho \rangle_{N,L}^2}{\langle \rho \rangle_{N,L}^2} \underset{\frac{N}{L} \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\gamma\sqrt[4]{N}} \quad (5.4)$$

gelten soll, wobei wir mit $\langle \rho \rangle_{N,L}$ den Mittelwert des Widerstandes bei fester Systemlänge bezeichnen. D.h., daß in diesem Limes die Standardabweichung bezogen auf den Mittelwert gegen Null geht, so daß in diesem Grenzfall der mittlere Widerstand stellvertretend für die einzelnen Mitglieder des Ensembles wäre.

Der Widerstand hoher Dichte ist dann ausführlich von EBERLE(1982) in dessen Dissertation (unveröffentlicht) untersucht worden. Eberle gelang es, aufgrund des ungünstigen Zuganges aber lediglich (5.3) analytisch zu verifizieren. Für die relative Varianz gab er numerische Studien an, ohne diese zu belegen.

Zuletzt wurde das Modell von FELDERHOF & FORD(1986) aufgegriffen. Für den Grenzfall hoher und niedriger Dichte erzielten sie analytische Ergebnisse für das charakteristische Wachstum des mittleren und des quadratisch gemittelten Widerstandes. Für den mittleren Widerstand konnten sie (5.3) bestätigen und für $\langle \rho^2 \rangle_{N,L}$ fanden sie, daß $\langle \rho^2 \rangle_{N,L}$ im Limes hoher Dichte mit derselben Rate wächst, wie $\langle \rho \rangle_{N,L}^2$. Dies ließ ein Verhalten der relativen Standardabweichung gemäß (5.4) für möglich erscheinen.

In den nun folgenden Zeilen möchte ich den Hintergrund für dieses merkwürdige Verhalten aufdecken. FELDERHOF & FORD(1986) haben bereits vermutet, daß für $\frac{N}{kL} \gg 1$ der Widerstand dem des **optischen Potentials** entspricht. Das optische Potential ist das Rechteckpotential, das zu dem mittleren Potential der Kette von δ -Potentialen gehört. Diese Vermutung werde ich voll und ganz bestätigen, indem ich zeige, daß die Gesamttransfermatrix des betrachteten Systems asymptotisch für $N \rightarrow \infty$, L fest gegen die Transfermatrix des Rechteckpotentials konvergiert.

5.2 Probability distributions

Die größte Schwierigkeit bei der analytischen Behandlung dieses Modells ist, daß die Verteilungsfunktion weder in Verteilungsfunktionen für die Abstände benachbarter Streuer, d.h.

$$p_N(x_1, \dots, x_N) = p_1(x_2 - x_1) \cdots p_{N-1}(x_N - x_{N-1})$$

noch in Verteilungsfunktionen für die einzelnen Orte der Streuer, d.h.

$$p_N(x_1, \dots, p_N) = p_1(x_1) \cdots p_N(x_N)$$

faktoriisiert, so daß sich das Mittelungsproblem vorerst nicht auf die Berechnung der N -ten Potenz einer Matrix zurückführen läßt.

Entschieden vereinfacht wurde das Problem durch die Überlegungen von FELDERHOF & FORD(1986). Beide Autoren zeigten, wie man bei Verteilungsfunktionen der Gestalt

$$p_N(x_1, \dots, x_N) = \prod_{j=2}^N f(x_j - x_{j-1}), \quad (5.5)$$

die Systeme beschreiben, in denen die Abstände benachbarter Streuer **unabhängige** Zufallsvariablen sind, über Unterensemble fester Länge, d.h.

$$p_{N,L}(x_1, \dots, x_N) = \delta(x_1) \delta(x_N - L) \frac{p_N(x_1, \dots, x_N)}{p_N(L)} \quad (5.6)$$

mittelt. Der Normierungsfaktor $p_N(L)$ ist dabei einfach die *Längenverteilung* der Verteilung (5.5). Das Verfahren läuft letztendlich auf die Berechnung einer inversen Laplace-Transformation des (0,0)-ME der N -ten Potenz einer Matrix hinaus.

In ihren weiteren Überlegungen nutzten Felderhof & Ford aus, daß die Verteilungsfunktion (5.1) im Limes $N \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$, $N/L = konst.$ einen Poisson-Prozeß beschreiben würde. Bei diesem sind auch die Abstände benachbarter Streuer

(Ereignisse) unabhängige Zufallsvariablen und die Verteilungsfunktion des Abstandes $\xi = x_j - x_{j-1}$ zweier benachbarter Streuer ist durch eine Exponentialverteilung

$$f(\xi) = ne^{-n\xi} \quad (5.7)$$

gegeben. n ist die mittlere Dichte der Streuer, und es gilt

$$n = \frac{1}{\langle \xi \rangle}, \quad (5.8)$$

wobei $\langle \xi \rangle$ der mittlere Abstand zweier benachbarter Streuer ist. Ich zeige jetzt, den Überlegungen FELDERHOF & FORD's(1986) folgend, daß man aus (5.7) durch Einschränkung auf ein festes Längensegment die Verteilungsfunktion (5.1) erhält.

Die Längenverteilung zu (5.7) bekommen wir, wie üblich, aus (5.5) mittels der inversen Laplace-Transformation der charakteristischen Funktion $\langle e^{-sL} \rangle_N$ (s. a. die Berechnung von $p_N(\rho)$ in III.4),

$$p_N(L) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} e^{sL} \langle e^{-sL} \rangle_N ds. \quad (5.9)$$

Aufgrund der Faktorisierung von (5.5) ist die Berechnung von (5.9) sehr einfach, und das Ergebnis lautet

$$p_N(L) = n^{N-1} e^{-nL} \frac{L^{N-2}}{(N-2)!}. \quad (5.10)$$

Setzen wir jetzt (5.10), (5.7) und (5.5) in (5.6) ein und berücksichtigen, daß sich wegen

$$e^{-n(x_{j+1}-x_j)} e^{-n(x_j-x_{j-1})} = e^{-n(x_{j+1}-x_{j-1})}$$

die inneren Streuer alle wegheben, so finden wir²

$$p_{N,L}(x_1, \dots, x_N) = \frac{(N-2)!}{L^{N-2}} \frac{e^{n(x_N-x_1)}}{e^{-nL}} \delta(x_1) \delta(x_N - L). \quad (5.11)$$

Führen wir noch an der Stelle x_1 und x_N "virtuelle" ($\beta = 0$) Streuer ein und integrieren (5.11) über x_1 und x_N , dann resultiert **exakt** die Verteilungsfunktion (5.1) für $N-2$ Streuer. Damit ist die vollkommene Übereinstimmung des Modells C von ERDÖS & HERNDON(1982) und EBERLE(1982) mit dem N, L -Ensemble des $P\delta$ -Modells von FELDERHOF & FORD(1986) gezeigt.

²Für die Verteilungsfunktion (5.11) sind die Abstände benachbarter Streuer keine unabhängigen Zufallsvariablen mehr. Die Nächste-Nachbar-Verteilung von (5.11) ist nicht mehr durch (5.7), sondern durch $f_{N,L}(\xi) = [1 - \Theta(\xi - L)] n \left(1 - \frac{n\xi}{N}\right)^{N-1}$ gegeben, und es gilt

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ n = \text{konst.}}} f_{N,L}(\xi) = ne^{-n\xi}.$$

Da wir im 4-ten Kapitel gesehen haben, wie sich die N -te Potenz einer Matrix berechnen läßt, würde es uns prinzipiell keine Schwierigkeit bereiten, die Rechnungen von FELDERHOF & FÖRD zu vervollständigen. Auf diesem Weg wurden zwischenzeitlich auch von VOSSEN(1989) Fortschritte erzielt. Der besonders interessante Limes hoher Dichte läßt sich jedoch mit einem Trick noch einfacher auf andere Art und Weise berechnen.

Dazu schauen wir uns die Längenverteilung (5.10) des freien Systems genauer an. Mit dieser Verteilung finden wir

$$\langle L \rangle = \frac{N-1}{n}, \quad (5.12)$$

$$\langle L^2 \rangle = \frac{N(N-1)}{n^2} \quad (5.13)$$

und damit

$$\sigma_L^2 = \frac{\langle L^2 \rangle - \langle L \rangle^2}{\langle L \rangle^2} = \frac{1}{N-1}. \quad (5.14)$$

Aus (5.14) ziehen wir den Schluß:

Die Modelle mit freien und festen Enden kommen sich im Limes $N \rightarrow \infty$, $\langle L \rangle = konst.$ beliebig nahe.

Es genügt also, das freie Modell im Limes $N \rightarrow \infty$, $\langle L \rangle = konst.$ zu betrachten.

5.3 Averaging and optical potential

Die Gesamttransfermatrix des freien Modells ist in allen Darstellungen durch [s. (2.45) und (3.13)]

$$\mathcal{P}^{\pm, \nu}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) = e^{-ikx_N \hat{\sigma}_z} e^{i\beta \hat{\mathbf{Q}}} e^{-ik\xi_N \hat{\sigma}_z} e^{i\beta \hat{\mathbf{Q}}} \dots e^{-ik\xi_2 \hat{\sigma}_z} e^{i\beta \hat{\mathbf{Q}}} e^{-ikx_1 \hat{\sigma}_z} \quad (5.15)$$

gegeben. $\hat{\sigma}_z$ und $\hat{\mathbf{Q}}$ sind die zu $\mathcal{P}^{\pm, \nu}$ gehörenden Darstellungen von σ_z und \mathbf{Q} und durch

$$\hat{\sigma}_z = \frac{\partial}{\partial(it)} \mathcal{P}^{\pm, \nu}(e^{it\sigma_z}) \Big|_{t=0}, \quad (5.16)$$

$$\hat{\mathbf{Q}} = \frac{\partial}{\partial(i\beta)} \mathcal{P}^{\pm, \nu}(e^{i\beta\mathbf{Q}}) \Big|_{\beta=0} \quad (5.17)$$

definiert.

Mitteln wir jetzt das (0,0)-ME der ganzzahligen Darstellungen der Gesamttransformmatrix mit der durch (5.5) und (5.7) definierten Verteilungsfunktion, dann bekommen wir

$$\langle \mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) \rangle = \left[\left(\langle e^{ik\xi_j \hat{\sigma}_z} \rangle e^{i\beta \hat{\mathbf{Q}}} \right)^N \right]_{00} \quad (5.18)$$

mit

$$\langle e^{ik\xi_j \hat{\sigma}_z} \rangle = \int_0^\infty n e^{-n\xi_j} e^{ik\xi_j \hat{\sigma}_z} d\xi_j = \frac{n}{n - ik\hat{\sigma}_z}. \quad (5.19)$$

Dabei wurde berücksichtigt, daß

$$\left[e^{-ikx_N \hat{\sigma}_z} \right]_{00} = \left[e^{-ikx_1 \hat{\sigma}_z} \right]_{00} = \langle e^{-ik\xi_N \hat{\sigma}_z} \rangle_{00} = 1$$

gilt, so daß die Randmatrizen wegfallen und ein $\langle e^{-ik\xi_N \hat{\sigma}_z} \rangle$ ergänzt werden kann. Wir verwenden noch (5.12) für große N , und erhalten

$$\langle \mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) \rangle = \left[\left(\frac{\frac{N}{\langle L \rangle}}{\frac{N}{\langle L \rangle} - ik\hat{\sigma}_z} e^{i\beta \hat{\mathbf{Q}}} \right)^N \right]_{00}. \quad (5.20)$$

(5.20) ist die Basis für alle im folgenden betrachteten Grenzwerte.

Zuvor schauen wir uns das optische Potential, das zu N δ -Potentialen auf dem Längensegment der Länge L gehört an. Für jedes Mitglied des Ensembles gilt

$$V(x) = V_\delta \sum_{j=1}^N \delta(x - x_j) \quad 0 \leq x_1 < x_2 \dots < x_N \leq L. \quad (5.21)$$

Das optische Potential ist dann der räumliche Mittelwert von $V(x)$

$$U_{\text{opt.}} = \frac{1}{L} \int_0^L V(x) dx = \frac{N}{L} V_\delta. \quad (5.22)$$

Es ist sehr nützlich sich zu vergewissern, daß sich das optische Potential auch als Ensemble-Mittel mit der Verteilungsfunktion (5.1) ergibt

$$\begin{aligned} \langle V(x) \rangle_{N,L} &= \frac{N!}{L^N} \int_0^L dx_N \int_0^{x_N} dx_{N-1} \dots \int_0^{x_2} dx_1 V(x) \\ &= \frac{N}{L} V_\delta. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Das gleiche Ergebnis erhält man auch, wenn man (5.5), (5.6) und (5.7) benutzt, wobei man zweckmäßigerweise eine Laplace-Transformation zwischenschaltet und den Faltungssatz verwendet. Einsetzen von $\beta = mV_\delta/\hbar^2 k$ [s. (2.55)] in (5.22) gibt

$$U_{\text{opt.}} = \frac{N}{L} \frac{\hbar^2 k}{m} \beta. \quad (5.24)$$

Aufgrund der Eigenschaften der Längenverteilung (5.10) können wir in (5.22)-(5.24) im Limes $N \rightarrow \infty$, $\langle L \rangle = \text{konst. } L$ durch $\langle L \rangle$ ersetzen und bemerken, daß im gleichen Limes das optische Potential linear mit der Anzahl der Streuer wächst. In den nächsten beiden Abschnitten betrachten wir einen Grenzwert und eine asymptotische Entwicklung.

5.4 Statistical properties of the resistance in limit

$$N \rightarrow \infty, \langle L \rangle_N = \text{konst.}, U_{\text{opt.}} = \text{konst.}$$

Um bei wachsender Anzahl der Potentiale das optische Potential konstant zu halten, müssen wir die Stärke der δ -Potentiale reskalieren. Dazu setzen wir

$$\beta = \frac{\tilde{\beta}}{N}, \quad (5.25)$$

$$\tilde{U}_{\text{opt.}} = \frac{\hbar^2 k}{m} \frac{\tilde{\beta}}{\langle L \rangle} \quad (5.26)$$

und lassen \sim wieder weg. Damit gilt

$$\langle \mathcal{P}_{00}^{+, \nu}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) \rangle = \left[\left(\frac{1}{1 - i \frac{k \langle L \rangle}{N} \hat{\sigma}_z} e^{i \frac{\beta}{N} \hat{\mathbf{Q}}} \right)^N \right]_{00}. \quad (5.27)$$

Entscheidend ist jetzt, daß für $k \langle L \rangle / N \stackrel{!}{=} 2\pi \langle \xi \rangle / \lambda \ll 1$ [für das Gleichheitszeichen siehe (5.8) und (5.12)] in erster Ordnung

$$\frac{1}{1 - i \frac{k \langle L \rangle}{N} \hat{\sigma}_z} = e^{i \frac{k \langle L \rangle}{N} \hat{\sigma}_z} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \quad (5.28)$$

Darstellung einer $SU(1,1)$ -Matrix ist. (5.28) ist allerdings nur für die endlichdimensionalen Darstellungen richtig, da $\hat{\sigma}_z$ für die unendlichdimensionalen Darstellungen **unbeschränkt** ist [PESCHEL(1989)]³. Mit (5.28) und (5.27) können wir daher für die endlichdimensionalen Darstellungen

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L \rangle = \text{konst.} \\ U_{\text{opt.}} = \text{konst.}}} \langle \mathcal{P}_{f,00}^{+, n}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \left[e^{i \frac{k \langle L \rangle}{N} \hat{\sigma}_z} e^{i \frac{\beta}{N} \hat{\mathbf{Q}}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \right]^N \right\}_{00}$$

³Bisher ist nicht klar, inwieweit sich (5.28) bzw. die im folgenden für die endlichdimensionalen Darstellungen erzielten Ergebnisse für die unendlichdimensionalen Darstellungen retten lassen, und dies, obwohl man zumindest für die unitären Darstellungen richtige Ergebnisse erzielt, wenn man die Schwierigkeit, daß $\hat{\sigma}_z$ unbeschränkt ist, einfach ignoriert. Womöglich hängt dies damit zusammen, daß man, wie numerische Studien von KIRKMAN & PENDRY(1984b) zeigen, die gemittelten unitären Darstellungen sehr gut dadurch approximieren kann, daß man an Stelle der ganzen Matrix nur eine endlichdimensionale Teilmatrix um das zentrale (0,0)-ME betrachtet.

$$\begin{aligned}
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \left[e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} \hat{\sigma}_z e^{i \frac{\beta}{N} \hat{\mathbf{Q}}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \right]^N \right\}_{00} \\
&\quad \vdots
\end{aligned} \tag{5.29}$$

schreiben. Aufgrund der Darstellungseigenschaften gilt

$$\left[e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} \hat{\sigma}_z e^{i \frac{\beta}{N} \hat{\mathbf{Q}}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \right]^N = \mathcal{P}_f^{+,n} \left[\left(e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} \sigma_z e^{i \frac{\beta}{N} \mathbf{Q}} \right)^N \right],$$

und damit

$$\begin{aligned}
\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathcal{P}_{f,00}^{+,n}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{P}_{f,00}^{+,n} \left[\left(e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} \sigma_z e^{i \frac{\beta}{N} \mathbf{Q}} \right)^N \right] \\
\vdots &\quad \vdots \\
&= \mathcal{P}_{f,00}^{+,n} \left[\lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} \sigma_z e^{i \frac{\beta}{N} \mathbf{Q}} \right)^N \right] \\
&\quad \vdots
\end{aligned} \tag{5.30}$$

Wir bekommen daher den Mittelwert des (0,0)-ME einer beliebigen endlichdimensionalen Darstellung der Gesamttransfermatrix als (0,0)-ME der gleichen Darstellung, der, in geschweiften Klammern stehenden, SU(1,1)-Matrix auf der rechten Seite.⁴

Der Widerstand ist scharf, was am einfachsten zu verstehen ist, wenn wir

$$\left(e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} \sigma_z e^{i \frac{\beta}{N} \mathbf{Q}} \right)^N$$

als Transfermatrix eines **periodischen Potentials** [vgl. (2.75)] von N δ -Potentialen der Stärke β/N und des Abstandes $k\langle L \rangle/N$ auffassen. Die weitere Auswertung von (5.30) bereitet, auch ohne Rückgriff auf die Ergebnisse von II.4, keine Schwierigkeiten. Es gilt

$$\begin{aligned}
\lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} \sigma_z e^{i \frac{\beta}{N} \mathbf{Q}} \right)^N &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\mathbf{1} + i \frac{k\langle L \rangle \sigma_z + \beta \mathbf{Q}}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \right]^N \\
\vdots &\quad \vdots \\
&= e^{ik\langle L \rangle \sigma_z + \beta \mathbf{Q}}.
\end{aligned} \tag{5.31}$$

⁴Der Trick, auf niederdimensionale Darstellungen zurückzugehen, wurde mit großem Erfolg auch von KAUFMAN(1949) am **Ising-Modell** angewendet. Hier wie dort wird das Problem dadurch entscheidend vereinfacht.

Damit ist der Grenzübergang wirklich ausgeführt.

(5.31) ist im wesentlichen die Transfermatrix für das optische Potential. Um dies zu sehen, schreiben wir, angeleitet von den Ergebnissen aus II.3, den Exponenten aus

$$k\langle L\rangle\sigma_z + \beta\mathbf{Q} \stackrel{(2.57)}{=} \frac{\langle L\rangle}{2k} \begin{pmatrix} 2k^2 - \frac{2k\beta}{\langle L\rangle} & -\frac{2k\beta}{\langle L\rangle} \\ \frac{2k\beta}{\langle L\rangle} & -2k^2 - \frac{2k\beta}{\langle L\rangle} \end{pmatrix}.$$

Vergleichen wir dies mit (2.50), dann sehen wir, daß

$$\begin{aligned} k^2 + \kappa^2 &= \frac{2m}{\hbar^2}E + \frac{2m}{\hbar^2}(U_{\text{opt.}} - E) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2}U_{\text{opt.}} \stackrel{(5.26)}{=} \frac{2k\beta}{\langle L\rangle} \end{aligned} \quad (5.32)$$

gilt. (5.31) ist also in der Tat, bis auf die beiden Phasenmatrizen am Rande [s.(2.49)] die Transfermatrix des optischen Potentials. Der Widerstand ist daher [s.(2.53)]

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L\rangle = \text{konst.} \\ U_{\text{opt.}} = \text{konst.}}} \langle \rho \rangle_N = \rho_{\text{opt.}} = \frac{1}{4} \left(\frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \right)^2 \sinh^2(\kappa\langle L\rangle) \quad (5.33)$$

mit

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_{\text{opt.}} - E)} = \sqrt{\frac{2k\beta}{\langle L\rangle} - k^2} \quad (5.34)$$

und es gilt, wie bereits zu (5.30) erwähnt

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L\rangle = \text{konst.} \\ U_{\text{opt.}} = \text{konst.}}} p_N(\rho) = \delta(\rho - \rho_{\text{opt.}}) \quad (5.35)$$

5.5 Statistical properties of the resistance for $N \rightarrow \infty$, $\langle L \rangle_N = \text{konst.}$

Alle Überlegungen des vorhergehenden Limes bis einschließlich (5.30) bleiben richtig, wenn wir auf die Reskalierung der Potentiale verzichten, d.h. wenn wir

β/N durch β ersetzen. (5.30) lautet dann

$$\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L \rangle = \text{konst.}}} \langle \mathcal{P}_{f,00}^{+,n}(\mathbf{T}_{\text{ges.}}) \rangle = \mathcal{P}_{f,00}^{+,n} \left[\lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L \rangle = \text{konst.}}} \left(e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} \boldsymbol{\sigma}_z e^{i \frac{\beta}{N} \mathbf{Q}} \right)^N \right]. \quad (5.36)$$

Wie vorher ist der Widerstand asymptotisch scharf, doch lassen sich die Exponenten in (5.36) nicht einfach zusammenziehen, und wir müssen jetzt auf die Ergebnisse von II.4 zurückgreifen. Mit (2.97) und (2.79) finden wir

$$\begin{aligned} \text{Re}(ga) &= \cos\left(\frac{k\langle L \rangle}{N}\right) + \beta \sin\left(\frac{k\langle L \rangle}{N}\right) \\ &= 1 + \frac{k\langle L \rangle}{N} \beta + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right), \end{aligned} \quad (5.37)$$

$$\lambda_{\pm} = 1 \pm \sqrt{\frac{2\beta k\langle L \rangle}{N}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (5.38)$$

Weiter gilt dann

$$\ln(\lambda_+) = \sqrt{\frac{2\beta k\langle L \rangle}{N}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right), \quad (5.39)$$

$$\begin{aligned} \text{Im}(ga) &= \text{Im}\left[e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} (1 - i\beta)\right] \\ &= \frac{k\langle L \rangle}{N} - \beta + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right), \end{aligned} \quad (5.40)$$

und

$$gb = e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} (-i\beta) = -i\beta + \frac{\beta k\langle L \rangle}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (5.41)$$

Setzen wir (5.39)-(5.41) in (2.92) und (2.93) ein, dann bekommen wir zuerst

$$\tilde{\mathbf{M}} = i\beta \mathbf{Q} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right), \quad (5.42)$$

und damit

$$\begin{aligned} \left(e^{i \frac{k\langle L \rangle}{N}} \boldsymbol{\sigma}_z e^{i \frac{\beta}{N} \mathbf{Q}} \right)^N &\stackrel{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L \rangle = \text{konst.}}}{=} \cosh\left(\sqrt{2\beta k\langle L \rangle N}\right) \mathbf{I} \\ &+ i \text{sign}(\beta) \sqrt{\frac{N\beta}{2k\langle L \rangle}} \sinh\left(\sqrt{2\beta k\langle L \rangle N}\right) \mathbf{Q} + \text{hot} \end{aligned} \quad (5.43)$$

hot: higher order terms (Terme höherer Ordnung).

Beim Vergleich von (5.43) mit (2.52) ist zu beachten, daß in dem jetzigen Limes $U_{\text{opt.}}$ linear [s. (5.24)] mit der Anzahl der Streuer wächst und in asymptotischer Näherung

$$\begin{aligned} \kappa & \underset{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L \rangle = \text{konst.}}}{=} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} U_{\text{opt.}} + \text{hot} \\ & = \sqrt{\frac{2\beta k N}{\langle L \rangle}} + \text{hot} \end{aligned} \quad (5.44)$$

und

$$\frac{k}{\kappa} \underset{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L \rangle = \text{konst.}}}{=} 0 + \text{hot} \quad (5.45)$$

folgt, so daß (5.43) analog (5.31) im wesentlichen die Transfermatrix für das optische Potential ist. Daher bekommen wir für den Widerstand

$$\langle \rho \rangle \underset{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L \rangle = \text{konst.}}}{=} \rho_{\text{opt.}} + \text{hot} \quad (5.46)$$

$$= \left(\frac{\kappa}{2k} \right)^2 \sinh^2(\kappa \langle L \rangle) + \text{hot} \quad (5.47)$$

$$= \frac{N\beta}{2k\langle L \rangle} \sinh^2\left(\sqrt{2\beta k \langle L \rangle N}\right) + \text{hot}, \quad (5.48)$$

$$p_N(\rho) \underset{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L \rangle = \text{konst.}}}{=} \delta(\rho - \rho_{\text{opt.}}) + \text{hot} \quad (5.49)$$

5.6 Remarks

1. Wie ich anfangs gezeigt habe, ist das Modell mit freiem Ende im Limes $N \rightarrow \infty$, $\langle L \rangle = \text{konst.}$ asymptotisch gleich dem Modell mit festem Ende im Limes $N \rightarrow \infty$. Asymptotisch gleich heißt in **0-ter Ordnung**.

Man muß daher erwarten, daß beide Modelle in den Korrekturtermen höherer Ordnung in N/kL verschieden sind, d.h.

$$\text{hot}_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \langle L \rangle = \text{konst.}}} \neq \text{hot}_{\substack{N \rightarrow \infty \\ L = \text{konst.}}} \quad (5.50)$$

Dies bedeutet, wir können zwar bestimmen, wie schnell die relative Varianz im Limes $N \rightarrow \infty$, $\langle L \rangle = \text{konst.}$, ($U_{\text{opt.}} = \text{konst.}$), aber nicht, wie schnell die relative Varianz im Limes $N \rightarrow \infty$, $L = \text{konst.}$, ($U_{\text{opt.}} = \text{konst.}$) gegen Null geht. Beide Raten können durchaus verschieden sein und, wenn man die relative Varianz nicht als Funktion des Widerstandes auffassen kann, dann läßt sich die Konvergenzgeschwindigkeit im N, L -Ensemble nur mit der, allerdings viel aufwendigeren, Methode von FELDERHOF & FORD(1986) berechnen.

Im Rahmen meiner Rechnung läßt sich also bisher, das von EBERLE & ERDÖS(1981) numerisch ermittelte asymptotische Verhalten der relativen Varianz gemäß (5.4) **nicht überprüfen**.

2. Beide Grenzwerte gelten sowohl für abstoßende ($\beta > 0$) als auch für anziehende ($\beta < 0$) δ -Potentiale. Für $\beta < 0$ (κ rein imaginär) wird das Argument des Sinus - Hyperbolicus in (5.33), (5.47) und (5.48) rein imaginär, und der Sinus - Hyperbolicus geht in den Sinus über, d.h. der Widerstand **oszilliert**, wie dies bei einer Potentialmulde auch sein muß. Die Amplitude der Oszillationen wächst dabei **linear** mit der Anzahl der Streuer.

Dieses Ergebnis findet man bereits bei EBERLE(1982). Seine Gleichung (4.65), die dies beinhaltet, verwirft er jedoch. Er konnte nicht glauben, daß der mittlere Widerstand nicht exponentiell wächst und hatte auch noch keine Vorstellung davon entwickelt, daß der Widerstand etwas mit dem Widerstand des dazugehörigen optischen Potentials zu tun haben könnte.

Das gleiche scheint mir im seinen letzten Absatz auf S.53 der Fall zu sein, wo er den Fall beschreibt, in dem er, bei konstanter Konzentration der Streuer, die Länge des Systems vergrößert.

Dort studiert er erneut seine Grenzen (4.62) und (4.63) und sagt dann, diese würden eine obere Grenze $\langle \rho \rangle_N \sim e^{\alpha N}$ und eine untere Grenze von $\langle \rho \rangle_N \sim e^{\alpha \sqrt{N}}$ liefern. Die untere Grenze erklärt er daraufhin als zu "schlecht".

Ich habe aber den Eindruck, daß sich in den beiden Grenzen lediglich das Verhalten des Widerstandes bei niedriger und hoher Dichte ausdrückt, wie es von FELDERHOF & FORD(1986) gezeigt wurde, doch sind Eberles Angaben zu dürftig, bzw. die von ihm gewonnenen Formeln zu komplex, um dies zweifelsfrei klären zu können.

3. Man erhält die Ergebnisse (5.43)-(5.48) der zweiten Grenzwertbetrachtung auch dadurch, daß man in den Ergebnissen (5.31)- (5.34) der ersten Grenzwertbetrachtung $U_{\text{opt.}}$ durch $NU_{\text{opt.}}$ ersetzt und für große N entwickelt.

Mir ist es aber trotz intensiver Bemühungen nicht gelungen, diese "banale" Ersetzung im Rahmen erlaubter mathematischer Schlüsse zu rechtfertigen. Wie man an einfachen Gegenbeispielen sehen kann, führt eine derartige Ersetzung i.a. auch zu falschen Ergebnissen. Umgekehrt erhält man (5.31)-(5.34) auch nicht durch nachträgliche Reskalierung des optischen Potentials in (5.43)-(5.48).

Alle Versuche die beiden Exponentialfunktionen in (5.36), z.B. durch Baker

- Campbell - Hausdorff-artige Formeln zusammenzufassen — dies hätte die obige Ersetzung u.U. rechtfertigt — brachten keine brauchbaren Ergebnisse.

A

Landauer's formula

Die Grundidee bei der Ableitung von Landauers Formel besteht darin, daß aufgrund des Ohmschen Gesetzes

$$U = RI, \quad (\text{A.1})$$

sowohl der Strom I als Folge einer angelegten Spannung U als auch die Spannung als Folge eines fließenden Stromes angesehen werden kann. R ist der (Ohmsche-) Widerstand.

Während man üblicherweise als Physiker bei der Berechnung von Leitfähigkeiten (z.B. die einfache Drude-Theorie) dazu neigt, die erste Betrachtungsweise einzunehmen, geht Landauer von der anderen Betrachtungsweise aus, d.h. der Strom wird vorgegeben und die sich einstellende Spannung muß berechnet werden.

Die wesentlichen Züge, wie man gegenwärtig den Zusammenhang zwischen elektrischem Widerstand bei $T = 0K$ und dem Verhältnis von Reflexion zu Transmission herleitet, findet man im Anhang A3 bei ERDÖS & HERNDON(1982) und sollen hier wiedergegeben werden. Für tiefgehendere Begründungen verweise ich auf die in der Einleitung/Übersicht genannten Arbeiten.

Betrachten wir den in Bild 1.1 in der Einleitung/Übersicht skizzierten 1D Leiter. Der einfallende Strom sei j_i , der reflektierte j_r und der transmittierte j_t . Verknüpft mit den Strömen ist eine Elektronendichte n_ℓ auf der linken, n_r auf der rechten Seite des Hindernisses gemäß

$$n_r = \frac{j_t}{ve} \quad (\text{A.2})$$

und

$$n_\ell = \frac{j_i + j_r}{ve}, \quad (\text{A.3})$$

wobei man auf der linken Seite einfallenden und reflektierten Strom berücksichtigen muß. Für die Differenz der Elektronendichte Δn zwischen linker und rechter Seite

bekommen wir damit

$$\Delta n = n_\ell - n_r = \frac{j_i + j_r - j_t}{ve} = \frac{2|r|^2 j_i}{ve}, \quad (\text{A.4})$$

wenn wir

$$j_t = |t|^2 j_i, \quad (\text{A.5})$$

$$j_r = |r|^2 j_i \quad (\text{A.6})$$

und

$$|r|^2 + |t|^2 = 1 \quad (\text{A.7})$$

beachten [s. Einleitung/Übersicht und (2.32) - (2.34)]. v ist die Fermi-Geschwindigkeit ($T = 0K$) und e die Ladung der Elektronen.

Die Schwierigkeit besteht jetzt darin, diese Dichtedifferenz in eine Potentialdifferenz ΔU umzumünzen. Dazu benutzt man die Relation

$$\Delta n = \frac{dn}{dE} \Delta E = \frac{dn}{dE} e\Delta U, \quad (\text{A.8})$$

da die Elektronen ihre Energie um ΔE beim Durchqueren des Leiters geändert haben. In 1D gilt jetzt

$$\frac{dn}{dk} = \frac{1}{\pi}, \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{dE}{dk} = \hbar v \quad (\text{A.10})$$

und daher

$$\frac{dn}{dE} = \frac{\frac{dn}{dk}}{\frac{dE}{dk}} = \frac{1}{\pi \hbar v}. \quad (\text{A.11})$$

Aus (A.4), (A.8) und (A.11) folgt dann

$$\Delta U = \frac{2\pi\hbar}{e^2} |r|^2 j_i. \quad (\text{A.12})$$

Einsetzen von (A.12) und (A.5) in (A.1) gibt

$$R = \frac{\Delta U}{j_t} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \frac{|r|^2}{|t|^2} = \frac{2\pi\hbar}{e^2} \rho. \quad (\text{A.13})$$

B

Simple conclusions from representation theory

In II.1 habe ich gezeigt, daß die Transfermatrizen die Eigenschaften

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma}_x^{-1} \mathbf{T}^* \boldsymbol{\sigma}_x, \quad (\text{B.1})$$

$$\mathbf{T}^\dagger = \boldsymbol{\sigma}_z^{-1} \mathbf{T}^{-1} \boldsymbol{\sigma}_z \quad (\text{B.2})$$

besitzen. Sei mit $\Phi(\mathbf{T})$ eine Darstellung von \mathbf{T} bezeichnet. Aufgrund der Darstellungseigenschaften gilt dann

$$\Phi(\mathbf{T}) = \Phi(\boldsymbol{\sigma}_x)^{-1} \Phi(\mathbf{T}) \Phi(\boldsymbol{\sigma}_x), \quad (\text{B.3})$$

$$\Phi(\mathbf{T})^\dagger = \Phi(\boldsymbol{\sigma}_z)^{-1} \Phi(\mathbf{T})^{-1} \Phi(\boldsymbol{\sigma}_z). \quad (\text{B.4})$$

Da die Pauli-Matrizen $\boldsymbol{\sigma}_x$ und $\boldsymbol{\sigma}_z$ **nicht** zur $SU(1,1)$ gehören, sind (B.3) und (B.4) nur für Darstellungen der $GL(2, \mathbb{C})$, die eingeschränkt auf $SU(1,1)$ irreduzibel bleiben, richtig. Dies ist insbesondere für alle endlichdimensionalen Darstellungen im Raum der homogenen Polynome $P_{2j}(\mathbf{x})$ vom Grad $2j$, j halbzahlig oder ganzzahlig der Fall. (B.3) und (B.4) bleiben vermutlich aber auch richtig, wenn wir für $\boldsymbol{\sigma}_x$ und $\boldsymbol{\sigma}_z$ die korrespondierenden Darstellungen in der Lie-Algebra der $SU(1,1)$ nehmen.

Mitteln wir jetzt (B.1) und (B.2)

$$\langle \mathbf{T} \rangle = \boldsymbol{\sigma}_x^{-1} \langle \mathbf{T}^* \rangle \boldsymbol{\sigma}_x, \quad (\text{B.5})$$

$$\langle \mathbf{T} \rangle^\dagger = \boldsymbol{\sigma}_z^{-1} \langle \mathbf{T}^{-1} \rangle \boldsymbol{\sigma}_z, \quad (\text{B.6})$$

dann stellen wir fest, daß die erste Eigenschaft auch für die gemittelten Matrizen gültig bleibt. Die zweite dagegen bleibt nicht erhalten, da i.a. $\langle \mathbf{T}^{-1} \rangle \neq \langle \mathbf{T} \rangle^{-1}$ ist. Analog verhält es sich mit den Darstellungen (B.3) und (B.4).

Die erste Eigenschaft hat eine Konsequenz für die EW und EV. Sei

$$\mathbf{T}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}, \quad (\text{B.7})$$

also λ EW zum EV \mathbf{v} . Dann gilt wegen (B.1)

$$\mathbf{T}\sigma_x\mathbf{v}^* = \lambda^*\sigma_x\mathbf{v}^*, \quad (\text{B.8})$$

d.h. λ^* ist EW zum EV $\sigma_x\mathbf{v}^*$. Dies überträgt sich wegen (B.3) und (B.5) auch auf sämtliche gemittelten Darstellungsmatrizen $\langle\Phi(\mathbf{T})\rangle$. Wir halten fest:

Die EW aller gemittelten Darstellungsmatrizen sind entweder reell oder konjugiert komplex. Ist λ ein EW von $\Phi(\mathbf{T})$ zum EV \mathbf{v} , dann ist λ^* EW zu $\Phi(\sigma_x)\mathbf{v}^*$.

Ergänzung:

Die 3D Darstellungen von σ_x und σ_z im Raum der homogenen Polynome $P_2(\mathbf{x})$ vom Grad 2 [s. z.B. BARGMANN(1947)] haben, wenn wir als Basis Monome der Gestalt $x_1^{1+m}x_2^{1-m}$ wählen und nach fallendem m anordnen, das Aussehen

$$\Phi^3(\sigma_x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.9})$$

und

$$\Phi^3(\sigma_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.10})$$

Bibliography

- [1] Abrahams, E., and Stephen, M.J., 1980, *J. Phys. C*, **13**, L377.
- [2] Abramowitz, M., and Stegun, I., 1965, *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover Publications, Inc., New York).
- [3] Abrikosov, A.A., 1981, *Solid St. Commun.*, **37**, 997.
- [4] Abrikosov, A.A. and Ryzhkin, I.A., 1978, *Adv. Phys.*, **27**, 147.
- [5] Afriat, S.N., 1959, *Proc. Cambridge. Phil. Soc.*, **55**, 51.
- [6] Andereck, B. and Abrahams, E., 1980, *J. Phys. C*, **13**, L383.
- [7] Anderson, P.W., Thouless, D.J., Abrahams, E., and Fischer, D.S., 1980, *Phys. Rev. B*, **22**, 3519.
- [8] Ashcroft, N.W. and Mermin, D.N., 1976, *Solid State Physics*, (Holt Saunders International edition, Tokyo).
- [9] Bargmann, V., 1947, *Ann. of Math.*, **48**, 568.
- [10] Berezinskii, V.L., 1974, *Soviet Phys. JETP*, **38**, 620.
- [11] Büttiker, M., Imry, Y., Landauer, R. and Pinhas, S., 1985, *Phys. Rev. B*, **31**, 6207.
- [12] Cvetič, M., and Pičman, L., 1981, *J. Phys. A*, **14**, 379.
- [13] Dunford, N., 1943, *Trans. Amer. Math. Soc.*, **54**, 185.
- [14] Eberle, G., 1982, *Etude théorique de modèles pour la résistance d'un conducteur unidimensionnel à structure désordonnée*, (Dissertation, Lausanne).
- [15] Eberle, G. and Erdős, P., 1981, *bei ERDÖS & HERNDON(1982) heißt es dazu "unpublished results". Das Ergebnis V.(1') für die rel. Varianz ist nicht in Eberles Dissertation [EBERLE(1982)] zu finden und auch im persönlichen Gespräch mit Herrn Prof. P.Erdős konnte keine Klärung erzielt werden, so daß man dieses Resultat als nicht gesichert einstufen muß.*

- [16] Erdős,P., 1967, *Quantum Mechanical Electrical Conductivity of the One-Dimensional Landauer Model of an Impure Metal*, (unpublished paper).
- [17] Erdős,P., and Herndon,R.C., 1972, *Computational Methods for Large Molecules and Localized States in Solids*, edited by F. Herman, A.D. Mclean and R. Nesbet, (Plenum, New York), p.275.
- [18] Erdős,P. and Herndon,R.C., 1982 *Advances in Physics*, **31**, No. 2, 65-163.
- [19] Felderhof,B.U., 1986, *J. Stat. Phys.*, **43**, 135.
- [20] Felderhof,B.U. and Ford,G.W., 1986, *J. Stat. Phys.*, **45**, 695.
- [21] Frobenius,G., 1896, *Berliner Sitzungsberichte*,, 7.
- [22] Furstenberg,H., 1963, *Trans. Am. Math. Soc.*, **108**, 377.
- [23] Gantmacher,F.R., 1958, *Matrizenrechnung Teil I*, (VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin).
- [24] Gradshteyn,I.S. and Ryzhik,I.M., 1965, *Table of Integrals, Series and Products*, (Academic Press, New York and London).
- [25] Heinrichs,J., 1986, *Phys. Rev. B*, **33**, 5261.
- [26] Ishii,K., 1973, *Supp. of the Prog. of Theor.Phys.*, **53**, 77.
- [27] Jayannavar,A.M., 1987, *Sol. Stat. Com.*, **62**, 355.
- [28] John,S., 1988, *Comments Cond. Mat. Phys.*, **14**, 193.
- [29] Kaufman,B., 1949, *Phys. Rev.*, **76**, 1232.
- [30] Kirkman,P.D. and Pendry,J.B., 1984a, *J. Phys. C*, **17**, 4327.
- [31] Kirkman,P.D. and Pendry,J.B., 1984b, *J. Phys. C*, **17**, 5707.
- [32] Knapp,A., 1986, *Representation Theory of Semisimple Groups*, (Princeton University Press).
- [33] Kree,R. and Schmid,A., 1981, *Z. Phys. B*, **42**, 297.
- [34] Kronig,R. and Penney,W.G., 1931, *Proc. R. Soc.*, **130**, 499.
- [35] Kumar,N., 1984, *Phys. Rev. B*, **31**, 5513.
- [36] Landauer,R., 1970, *Phil. Mag.*, **21**, 863.
- [37] Landauer,R., 1987, *Z. Phys. B*, **68**, 217.

- [38] Lappo-Danilewsky, J.A., 1953, *Memoires sur la Theorie des Systèmes Des Équations Differentielles Linéaires*, (Chelsea Publishing Company).
- [39] Lorch, E.R., 1962, *Spectral Theory*, (New York-Oxford University Press); 1942, *Trans. Amer. Math. Soc.*, **52**, 238.
- [40] Messiah, A., 1962, *Quantum Mechanics I*, (North-Holland Publishing Company, Amsterdam-Oxford), 5th printing 1975.
- [41] Mello, P.A., 1986, *J. Math. Phys.*, **27**, 2876.
- [42] Melnikov, V.I., 1980a, *Soviet Phys. Solid State*, **22**, 1398; 1980b, *Soviet Phys. JETP Lett.*, **32**, 197; 1981, *Soviet Phys. Solid State*, **23**, 444; 1982, *Soviet Phys. Solid State*, **24**, 598.
- [43] Oberhettinger, F., and Badii, L., 1973, *Tables of Laplace Transforms*, (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York).
- [44] Pendry, J.B., 1982, *J. Phys. C*, **15**, 4821.
- [45] Pendry, J.B., 1988, *IBM J. Res. Develop.*, **32**, 137.
- [46] Pendry, J.B. and Castaño, E., 1988, *J. Phys. C.*, **21**, 4333.
- [47] Peschel, I., 1989, *persönliche Mitteilung*.
- [48] Rammal, R. and Doucot, B., 1987, *J. Physique*, **48**, 509.
- [49] Rinehart, R.F., 1955, *Amer. Math. Monthly*, **62**, 395.
- [50] Sak, J. and Kramer, B., 1981, *Phys. Rev. B*, **24**, 1761.
- [51] Schwerdtfeger, H., 1938, *Les Fonctions Des Matrices I. Les Fonctions Univalentes*, (Actualités Scientifiques et Industrielles, No.649, Paris, Herman).
- [52] Stickelberger, L., 1881, *Zur Theorie der linearen Differentialgleichungen*, (Akademische Antrittsschrift, B.G. Teubner in Leipzig).
- [53] Stone, A.D. and Szafer, A., 1988, *IBM J. Res. Develop.*, **32**, 3??.
- [54] Strutt, M.J.O., 1928, *Ann. Physik*, **86**, 319.
- [55] Taylor, A.E., 1943, *Bull. Amer. Math. Soc.*, **49**, 652.
- [56] Tung, Wu-Ki, 1985, *Group Theory in Physics*, (World Scientific Publishing Co Pte Ltd., Philadelphia-Singapore).
- [57] Vilenkin, N.Ja., 1969, *Fonctions spéciales et théorie de la représentation des groupes*, (Dunod, Paris).

- [58] Vossen,M., 1989, (Diplomarbeit, Aachen).
- [59] Weller,W. and Kasner,M., 1988, *phys. stat. sol.(b)*, **148**, 273.
- [60] West,B., Lindenberg,K. and Seshadri,V., 1980, *Physica A*, **102**, 470.

Acknowledgements

Herrn Prof. Dr. I. Peschel danke ich für die Stellung des Themas sowie die geduldige Betreuung dieser nicht unerheblich über den von ihm gesteckten Zeitrahmen hinausgehenden Arbeit. Ich hoffe, mit den von mir erzielten Ergebnissen einen Ausgleich dafür geschaffen zu haben.

Dann möchte ich Herrn Prof. Dr. Simonsohn für die zur Verfügung Stellung des ruhigen Arbeitsplatzes danken.

Den Hinweis auf das Buch von VILENKIN(1969) sowie manch anderen Rat gab Herr Privatdozent Dr. T. T. Truong. Dafür danke ich ihm.

Dank schulde ich auch Herrn Dipl.-Phys. Martin Schmidt für die stete Bereitschaft Fragen aus der Darstellungstheorie zu beantworten. Das gleiche gilt für Herrn Dipl.-Phys. Falk Langhammer für seine Unterstützung in EDV-Fragen sowie für die anderen Kollegen und Freunde am Fachbereich Physik der FU Berlin für die erwiesene Hilfe bei vielen Gelegenheiten.

Mein ganz besonderer Dank gebührt jedoch meiner Mutter und meiner Familie sowie Herrn Ulrich Hansmann, die mich in persönlich schwerer Stunde, nach der Trennung von meiner langjährigen Freundin Barbara, unterstützt haben. Ohne deren Beistand wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen.

Bei Herrn Prof. Dr. P. Erdős, Université de Lausanne sowie Herrn Prof. Dr. B. U. Felderhof, RWTH Aachen, möchte ich mich für ihre unerwarteten Einladungen bedanken.

Nicht zu guter Letzt halfen mir beim Korrekturlesen Ruth C. Westphal sowie Ulrich Hansmann, wofür ich mich bedanken möchte.

