

# **Fluktuationen in komplexen Systemen**

Habilitationsschrift

zur Erlangung der Venia Legendi in Theoretischer Physik

Dem Fachbereich Mathematik und Informatik, Physik, Geographie  
der Justus-Liebig-Universität Gießen

vorgelegt von

**Jan W. Kantelhardt**

aus Gießen

Halle (Saale), den 19. Juni 2004



# Inhaltsverzeichnis

<b>I. Einleitung .....</b>	<b>1</b>
<b>II. Fluktuationen und Korrelationen in Zeitreihen.....</b>	<b>5</b>
II.A. Einführung und Methoden .....	5
II.A.1. Grundlagen .....	5
II.A.2. Trendbereinigende Fluktuationsanalyse (DFA).....	11
II.A.3. Wavelet-Methoden und Multifraktalität.....	17
II.A.4. Multifraktale trendbereinigende Fluktuationsanalyse (MF-DFA) .....	24
II.A.5. Phasen-ausgerichtete Signal-Mittelung (PRSA).....	33
II.B. Korrelationsverhalten von Herz- und Atemrhythmus .....	39
II.B.1. Einführung, Vergleich von Gesunden und Herzkranken.....	39
II.B.2. Unterscheidung verschiedener Aktivitäts- und Schlafphasen.....	41
II.B.3. Exkurs: Modellierung der Herzfrequenzvariabilität.....	55
II.B.4. Analyse des Atemrhythmus gesunder Probanden .....	59
II.B.5. Herztod-Risiko Erkennung nach Herzinfarkt .....	64
II.C. Weitere physiologische Anwendungen.....	70
II.C.1. Korrelationen der Anordnung der Basenpaare in der Erbinformation .....	70
II.C.2. Langzeit-Korrelationsverhalten sensorischer Nervenimpulse .....	71
II.D. Korrelationsverhalten geophysikalischer Zeitreihen .....	76
II.D.1. Temperatur-Zeitreihen .....	76
II.D.2. Niederschlags-Zeitreihen.....	83
II.D.3. Hydrologische Zeitreihen .....	88
II.D.4. Tests rekonstruierter langjähriger Datenreihen.....	93
II.E. Auswirkungen von Langzeitkorrelationen auf die Extremwertstatistik und die Wiederkehrintervall-Statistik.....	98
II.E.1. Konventionelle Extremwertstatistik .....	98
II.E.2. Statistik der Wiederkehrintervalle .....	99
II.F. Langzeitkorrelationen in der Festkörperphysik .....	106
II.F.1. Speckle-Fluktuationen .....	106
<b>III. Fluktuationen und Lokalisierung in elektronischen Systemen.....</b>	<b>115</b>
III.A. Motivation: Metall-Isolator-Übergang in 2d Elektronensystemen .....	116
III.A.1. Experimentelle Ergebnisse zur elektrischen Leitfähigkeit .....	116
III.A.2. Experimentelle Ergebnisse zur Magnetleitfähigkeit .....	118
III.A.3. Umstrittene Erklärungen .....	120
III.B. Das Anderson-Modell für ungeordnete Elektronensysteme .....	122
III.B.1. Die Schrödinger-Gleichung in Tight-Binding-Näherung.....	122
III.B.2. Das Standard-Anderson-Modell für Einteilchen-Zustände .....	123
III.B.3. Die Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung .....	125
III.B.4. Verallgemeinerte Anderson-Modelle mit Korrelationen.....	127
III.B.5. Erweitertes Anderson-Modell mit Coulomb-Wechselwirkung .....	130
III.B.6. Erweitertes Anderson-Modell mit Spin-Freiheitsgrad und Hubbard-Wechselwirkung .....	131
III.C. Methoden zur Untersuchung von Lokalisierung und Fluktuationen.....	133
III.C.1. Die Transfer-Matrix-Methode und ihre Grenzen.....	133
III.C.2. Niveau-Statistik und die Zufallsmatrix-Theorie .....	134
III.C.3. Eigenfunktions-Analyse .....	136
III.C.4. Die Tunnelamplitude für Mehrelektronensysteme.....	142
III.D. Anomale Fluktuationen und Lokalisierung in selbst-affinen 1d Potenzialen.....	145
III.D.1. Nichtstationäre selbst-affine Potenziale .....	145

III.D.2. Reskalierte selbst-affine Potenziale .....	149
III.D.3. Diskussion nachfolgender Arbeiten.....	150
III.E. Anomale Lokalisierung und Fluktuationen in unkorrelierten 2d Systemen .....	153
III.E.1. Ergebnisse zur Verteilung der Eigenzustandsamplituden und zur Lokalisierungslänge.....	153
III.E.2. Sublokalisierung und Superlokalisierung.....	157
III.E.3. Diskussion nachfolgender Arbeiten und Anregungen.....	159
III.F. Lokalisierung wechselwirkender Elektronen in 2d Systemen.....	162
III.F.1. Analyse der Tunnelamplitude für polarisierte Elektronen.....	162
III.F.2. Die Kubo-Leitfähigkeit für polarisierte Elektronen .....	167
III.F.3. Der senkrechte Magnetowiderstand und sein Skalenverhalten.....	168
III.F.4. Spinkanäle für die Tunnelamplitude .....	171
III.F.5. Auswirkungen der Hubbard-Wechselwirkung und eines parallelen Magnetfelds auf Elektronen mit Spin.....	174
III.F.6. Das Wechselspiel von Hubbard- und Coulomb-Wechselwirkung.....	178
III.F.7. Diskussion nachfolgender Arbeiten .....	180
III.G. Lokalisierungsübergänge in Quantenpunkten mit Drähten .....	183
III.G.1. Einführung und Modell für Quantenpunkte mit Drähten.....	183
III.G.2. Zustandsdynamik in Quantenpunkten ohne Coulomb-Wechselwirkung.....	185
III.G.3. Simulation unter Berücksichtigung der Coulomb-Wechsel- wirkung.....	186
III.G.4. Eigenwert-Statistik für Quantenpunkte mit gekoppelten Drähten.....	189
<b>IV. Zusammenfassung und Ausblick .....</b>	<b>193</b>
IV.A. Zusammenfassung.....	193
IV.B. Ausblick.....	195
<b>V. Literaturverzeichnisse und Anhang.....</b>	<b>197</b>
V.A. Literaturverzeichnis für Teil II.....	197
V.B. Literaturverzeichnis für Teil III.....	206
V.C. Zuordnung der eigenen Publikationen zu den Kapiteln.....	212
V.D. Tabellenanhang .....	215
V.E. Danksagung .....	217



# I. Einleitung

Unter komplexen Systemen versteht man in der Regel physikalische, chemische, biologische oder auch soziologische Systeme mit einer komplexen Dynamik, die nicht allein durch die Betrachtung der Einzelteile der Systeme beschrieben oder verstanden werden kann. Die Teile sind entweder zu stark nicht-linear oder zu vielfältig miteinander gekoppelt, so dass eine Aufteilung des Systems die Dynamik grundlegend verändern würde. Der Grund für die Komplexität liegt auch in der großen Anzahl von Freiheitsgraden, denen nur eine geringe Anzahl von Erhaltungsgrößen gegenübersteht.

Es gibt viele Beispiele für komplexe Systeme. So können die Elektronen in einem Festkörper ein komplexes System bilden, obwohl sie punktförmig sind und jedes durch eine Schrödinger-Gleichung eindeutig in seiner Zeitentwicklung beschrieben wird. Die Komplexität kommt hier zustande durch eine – von der Festkörper-Struktur vorgegebene – nicht homogene (ungeordnete) Potenzial-Landschaft, in der sich die Elektronen bewegen, und durch die langreichweitige (Coulomb-) Wechselwirkung. Inhomogenitäten werden in jedem realen Festkörper durch Gitterbaufehler, wie Fehlstellen, Zwischengitter-Atome, Versetzungen, Dotierungen, Grenzen zwischen Kristalliten, Rand- und Grenzflächen usw. hervorgerufen. Durch quantenmechanische Beugung an den Gitterfehlstellen und destruktive Interferenz der Elektronenwellen kommt es zu dem Effekt der Lokalisierung, d.h. die Elektronenwellen können sich nicht mehr über den gesamten Festkörper ausbreiten, sondern werden räumlich auf gewisse Bereiche beschränkt. Es ist offensichtlich, dass man dieses Verhalten nicht durch die Simulation eines kleinen Ausschnitts des Festkörpers (mit periodischen Randbedingungen) und eines einzigen Elektrons erfassen kann.

Ein ganz anderes Beispiel für ein komplexes System ist ein biologischer Organismus. Um die Lebensfähigkeit herzustellen und zu erhalten, läuft ständig eine unüberschaubar große Vielfalt unterschiedlicher biochemischer Reaktionen ab, die sich teilweise gegenseitig voraussetzen oder auslösen. Hier kommt die komplexe Dynamik durch das Zusammenspiel vieler zum Teil stark und nichtlinear gekoppelter Prozesse zustande, die von verschiedenen Genen und danach konstruierten Proteinen, Enzymen usw. gesteuert werden. Man kann unter großem Aufwand die Funktion einzelner Gene oder Proteine untersuchen und charakterisieren, was Gegenstand der biomedizinischen Forschung ist. Das ist eine notwendige Voraussetzung für ein grundlegendes Verständnis des Systems. Aber weil die Gene und die Proteine oft wesentlich miteinander wechselwirken, wird damit noch nicht automatisch ein Verständnis des Gesamtsystems erreicht. Um die komplexe Dynamik wirklich zu verstehen, müsste das vollständige Wechselwirkungs-Netzwerk der Einzelkomponenten berücksichtigt werden, das letztendlich die Komplexität des Systems verursacht.

Nicht nur auf der biochemischen Ebene sind biologische Systeme komplex. Auch das Zusammenspiel der einzelnen Organe und deren Regelung, die von der Physiologie beschrieben wird, zeigen Komplexität. Ein vergleichsweise einfaches Beispiel für ein komplexes System dieser Art ist das Herz-Kreislauf-System des Menschen. Man kann das System nur teilweise verstehen, indem man die einzelnen Komponenten wie Herz, Lunge, Adersysteme, usw. getrennt und unabhängig vom autonomen vegetativen Nervensystem betrachtet, das einen Teil der Funktionen steuert. In diesem Bild kann man zwar verstehen, wie das Herz Blut pumpt, aber es wird nicht klar, wie die Herzfrequenz geregelt wird und warum sie – in einem gewissen Rahmen – scheinbar zufällig schwankt. Diese Fluktuationen der Herzfrequenz sind eine interessante Größe, weil sie einfach durch ein Langzeit-EKG gemessen werden können und unter anderem Rückschlüsse auf den Gesundheitszustand erlauben. Auch beim Herz-Kreislauf-System hat die Komplexität ihre Ursache in der Kopplung und Wechselwirkung der verschiedenen Systemkomponenten.

Das Klimasystem der Erde ist ein komplexes System, weil viele Komponenten und Teilsysteme auf stark unterschiedlichen Längen- und Zeitskalen wechselwirken. Die turbulente Strömung der Luft

auf kleinen Raum- und Zeitskalen führt zur Wolken- und Gewittersturmbildung auf mittleren Raum- und Zeitskalen und diese beeinflussen über Großwetterlagen auch längerfristige Klimaschwankungen. Starke Wechselwirkungen bestehen weiterhin mit Prozessen in den Ozeanen und den polaren Eismassen sowie mit dem Festland (Erosion, biologische Aktivität). Üblicherweise unterscheidet man zwischen Wetter und Klima aufgrund der jeweils betrachteten Zeitskalen von einigen Tagen bzw. einigen Jahren. Aber der Übergang ist fließend und eine langsame Klimaerwärmung soll beispielsweise mit extremen Wetterereignissen einher gehen. Wenn man die langfristige Klimaentwicklung simulieren will, darf man daher kurzfristige oder kleinskalige Prozesse nicht ignorieren. Bei Computer-Simulationen mit geeigneten Modellen kann das komplexe System nicht als Ganzes in allen Details beschrieben werden, denn das würde die Leistungsfähigkeit sämtlicher Computer übersteigen. Vielmehr müssen zahlreiche Näherungen und Ersatz-Beschreibungen (effektive Modelle) für die kurzfristigen oder kleinskaligen Prozesse verwendet werden. Dann stellt sich die Frage, inwieweit das komplexe System noch korrekt beschrieben wird, oder ob durch die Vereinfachungen und Näherungen bei einzelnen Teilsystemen die Dynamik verändert wird.

In dieser Arbeit geht es um die Charakterisierung der Dynamik komplexer Systeme anhand der auftretenden Fluktuationen, d.h. der zufälligen oder zufällig erscheinenden Schwankungen der verschiedenen Messgrößen. Bei den Elektronensystemen sind räumliche Fluktuationen der Potenzial-Landschaft eine Ursache für die Komplexität. Fluktuationen sind aber auch eine Auswirkung von komplexer Dynamik, wie besonders das Beispiel des Wetter- und Klimasystems zeigt. Oft interessiert man sich zuerst für Mittelwerte; so beim Wetter für die tägliche Durchschnittstemperatur, beim Herzkreislaufsystem für die Mittelwerte von Herzfrequenz (Puls) und Blutdruck und bei Elektronensystemen für die mittlere elektrische Leitfähigkeit. Aber in komplexen Systemen sind auch die Fluktuationen der Messgrößen um ihre mittel- oder langfristigen Mittelwerte wesentlich. So sind es die scheinbar überraschenden Fluktuationen, die beim Wetter zu Extremereignissen mit besonderer Schadenswirkung führen oder beim Herz-Kreislaufsystem beispielsweise einen Herzstillstand auslösen können, und bei den Elektronensystemen können es einzelne, zufällig besonders gut leitende Zustände sein, deren Verhalten (z.B. die Temperaturabhängigkeit) in einer konkreten Situation relevant wird.

Es ist sinnvoll, eine Charakterisierung der komplexen Systeme anhand der auftretenden Fluktuationen anzustreben, denn dadurch wird erstens eine Beschreibung der Dynamik und zweitens oft ein besseres Verständnis über die Art der Wechselwirkung der verschiedenen Teile erreicht. Die Ergebnisse können die Grundlage bilden für eine Optimierung des Systems oder einen Test existierender, sowie eine Aufstellung neuer (vereinfachter) Modelle. Selbst eine Beschreibung der Systeme durch (effektive) stochastische Differenzen- oder Differentialgleichungen erfordert eine Kenntnis der auftretenden Fluktuationen, da diese in die stochastischen Variablen eingesetzt werden müssen. Da neben den Fluktuationen oft Trends in den gemessenen Größen auftreten, sind zur Analyse Methoden notwendig, die zwischen beidem unterscheiden können. Eine Trennung von Fluktuationen und Trends ist auch für eine verbesserte Trenderkennung und die Vorhersage des typischen sowie des möglichen extremen Verhaltens der Systeme hilfreich. Eine Beschreibung der Dynamik anhand der Fluktuationen bietet darüber hinaus den Vorteil, dass durch eine Skalenanalyse die ablaufenden Prozesse auf verschiedenen (zeitlichen oder räumlichen) Skalen getrennt werden. Wenn Skalenverhalten auftritt, d.h. wenn die Fluktuationen auf großen und kleinen Skalen miteinander durch ein Potenzgesetz in Beziehung stehen, ist eine Extrapolation des Verhaltens auf große, experimentell nicht zugängliche Skalen möglich.

Diese Möglichkeit zur Trennung verschiedener Prozesse und zur Extrapolation wird im Hinblick auf das Skalenverhalten der Fluktuationen in beiden Teilen der Arbeit ausgenutzt. Im ersten Teil werden komplexe biomedizinische und geophysikalische Systeme anhand von Zeitreihen unter-

sucht, d.h. anhand von über längere Zeiträume periodisch gemessenen Einzelgrößen, deren Fluktuationen die Dynamik widerspiegeln und eine Charakterisierung von unterschiedlichen Phasen sowie einen Vergleich mit Modellen ermöglichen. Konkret werden nach einer Einführung in die verwendeten und weiterentwickelten Methoden der Zeitreihenanalyse in Kapitel II.A zuerst die Fluktuationsdynamik des menschlichen Herz- und Atemrhythmus betrachtet, u.a. in verschiedenen Aktivitätsphasen (Kapitel II.B). Ziel ist dabei eine Charakterisierung der Dynamik in den unterschiedlichen Phasen und unter bestimmten Krankheitsbedingungen als Grundlage für ein besseres physiologisches Verständnis der Regelungen und Wechselwirkungen im autonomen Herz-Kreislauf-System, eine automatische Unterscheidung der einzelnen Phasen, eine stochastische Modellierung, sowie eine verbesserte Diagnostik und Risikoabschätzung. Kapitel II.C hat nach einem kurzen Überblick über DNS-Fluktuationen eine Charakterisierung der Nervenimpulsdynamik von mechanisch und elektrisch sensitiven Sinneszellen zum Thema. Die komplexe Dynamik des Wetter- und Klimasystems sowie hydrologischer Systeme der Erde wird mit Hilfe der Zeitreihenanalyse in Kapitel II.D charakterisiert, das mit einer Betrachtung langjähriger historischer und aus Paläodaten rekonstruierter Reihen endet. Anhand der Ergebnisse können Klima- und Regen-Abfluss-Modelle sowie die Methoden zur Rekonstruktion der Paläodaten getestet werden. Die Auswirkungen der langreichweitigen Korrelationen in den hydroklimatischen Reihen auf die Statistik extremer Ereignisse sowie die Wiederkehrintervalle zwischen solchen Ereignissen sind das Thema der in Kapitel II.E betrachteten Anwendung. Den Abschluss des ersten Teils bildet in Kapitel II.F die Anwendung der statistischen Methoden zur Analyse von Röntgenbeugungsfluktuationen, die die Diffusionsdynamik in ungeordneten Metalllegierungen widerspiegeln.

Der zweite Teil der Arbeit hat komplexe elektronische Systeme in Festkörpern zum Thema, bei denen aufgrund von Unordnung im Kristallgitter Fluktuationen in den messbaren physikalischen Größen auftreten. Wegen der Unordnung und starken Vielteilchen-Wechselwirkungen kann man sich nicht auf eine Näherungslösung oder die Betrachtung nur einer Gitter-Einheitszelle beschränken, sondern muss ein Modellsystem aus vielen Teilchen simulieren, d.h. die Schrödinger-Gleichungen dafür lösen. Hier sind die auftretenden Fluktuationen quantenmechanischen Ursprungs, und ihre Untersuchung ermöglicht einen Test von theoretischen Modellvorstellungen anhand numerischer Simulationen. Besonders im Blickpunkt des Interesses steht der Phasenübergang zwischen lokalisierten (isolierenden) und ausgedehnten (metallischen) Zuständen. Nach einer kurzen Darstellung der experimentellen Resultate in Kapitel III.A werden in den Kapiteln III.B und III.C Modelle bzw. numerische Methoden zur Untersuchung von Lokalisierung und Fluktuationen in elektronischen Quantensystemen behandelt. In den Kapiteln III.D und III.E liegt der Schwerpunkt auf den Auswirkungen von korrelierter bzw. unkorrelierter Unordnung auf die quantenmechanischen Fluktuationen in ein- bzw. zweidimensionalen Elektronensystemen, für die anhand von numerischen Simulationsergebnissen die Gültigkeit der Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung diskutiert wird. In Kapitel III.F werden zusätzlich die Auswirkungen von starken Vielteilchen-Wechselwirkungen und Magnetfeldern auf die Fluktuationen und die Lokalisierung der Elektronen in den ungeordneten Festkörpern betrachtet, wobei sich konkrete Bezüge zu den neuen experimentellen Ergebnissen zum Metall-Isolator-Übergang in zweidimensionalen Bauelementen zeigen. Den Abschluss des zweiten Teils bildet in Kapitel III.G eine Analyse von Lokalisierungsübergängen und Fluktuationen in Quantenpunkten („künstlichen Atomen“), die bei einer Kontaktierung mit idealen Drähten zu erwarten sind.

Teil IV gibt eine Zusammenfassung und in Teil V steht das Literaturverzeichnis, und zwar getrennt nach den Referenzen zu Teil II und Teil III.



## II. Fluktuationen und Korrelationen in Zeitreihen

In diesem ersten Teil der Arbeit steht die Untersuchung der Dynamik komplexer Systeme, wie z.B. des autonomen vegetativen Systems des Menschen und des globalen Wetter- und Klimasystems, durch die Analyse von Zeitreihen im Mittelpunkt. Die verschiedenen Bausteine der komplexen Systeme sind im Allgemeinen nicht-linear gekoppelt, so dass die Dynamik des Ganzen nicht durch eine detaillierte Beschreibung der Einzelkomponenten charakterisiert und verstanden werden kann, sondern das Gesamtsystem analysiert werden muss. Dabei ist es nicht möglich, alle Variablen und Parameter vollständig zu erfassen. Daher sollen die Systeme anhand von Zeitreihen untersucht werden, d.h. anhand von über längere Zeiträume regelmäßig gemessenen Einzelgrößen, in denen sich die Dynamik des Systems dimensions-reduziert niederschlägt.

### II.A. Einführung und Methoden

#### II.A.1. Grundlagen

##### a) Stationäre und nichtstationäre Zeitreihen, Persistenz und Trends

Bei der Analyse von Zeitreihen, die die Dynamik komplexer Systeme repräsentieren, gibt es zwei Hauptprobleme, die nicht zufrieden stellend durch übliche statistische Verfahren gelöst werden [BOXetal-94, BUNDEetal-02]: (i) Die meisten Datenreihen sind relativ kurz und verrauscht, so dass es schwierig ist, signifikante Informationen daraus zu extrahieren. (ii) Wenn die Länge der Datensätze durch die Verwendung von modernen Computer-basierten Aufzeichnungstechniken oder durch einen Rückgriff auf historische Daten erhöht wird, beginnen *Nichtstationaritäten* in den Signalen das intrinsische Fluktuationsverhalten zu überlagern. Nichtstationaritäten und Trends werden durch äußere und innere Einflüsse verursacht, die zu graduellen oder auch sprunghaften Veränderungen der Mittelwerte und der Regulationsmechanismen führen. Sie stellen ein wesentliches Problem für die Charakterisierung der Dynamik und insbesondere die Bestimmung der Korrelationseigenschaften der Daten dar [BUNDE&KANTELHARDT-01] (einzelne Teile aus diesem Übersichtsartikel sind hier in überarbeiteter Form übernommen).

Bei den traditionellen statistischen Methoden, siehe z.B. [CHATFIELD-89, BOXetal-94], geht man davon aus, dass sich die statistischen Eigenschaften eines Signals nicht im Verlauf der Zeit ändern, d.h. dass insbesondere Mittelwert und Varianz zeitlich konstant sind. Wenn dies der Fall ist, kann man aus der Berechnung von Autokorrelationsfunktionen oder Frequenzspektren auf Korrelationen zwischen den Elementen einer Zeitreihe schließen. Die Annahme stationären Verhaltens ist aber unrealistisch für viele Zeitreihen in der Natur. Nichtstationaritäten treten beispielsweise bei meteorologischen Zeitreihen [KOSCIELNY-BUNDEetal-98], in DNA-Sequenzen [PENGetal-94], sowie in ökonomischen Datenreihen [MANTEGNA&STANLEY-99] auf. Physiologische Zeitreihen, wie z.B. Sequenzen von Herzraten, sind ebenfalls durch starke Nichtstationaritäten gekennzeichnet [VISWANATHANetal-97], die sogar in der Schlafphase beim Übergang zwischen den einzelnen Schlafstadien auftreten [BUNDEetal-00]. Daher sind die konventionellen Methoden nur mit starken Einschränkungen anwendbar. Darüber hinaus ist es von großer Bedeutung herauszufinden, ob die beobachteten Fluktuationen und Korrelationen von externen bzw. internen (Stör-) Einflüssen verursacht werden oder vielmehr im Rahmen der üblichen Schwankungen bleiben.

Allgemein spricht man von „*Persistenz*“, wenn eine Zufallsgröße die Tendenz hat, ihren augenblicklichen Wert beizubehalten. Dies kann über längere Zeiträume zu ausgeprägten positiven oder negativen statistischen Abweichungen vom jeweiligen Mittelwert führen. Bei *Trends* hingegen handelt es sich um systematische Abweichungen vom Mittelwert, die meist durch äußere Prozesse verursacht werden. In diesem Sinne sind bei meteorologischen Zeitreihen der Jahresgang bzw. eine anthropogen verursachte Klimaänderung durch den Treibhauseffekt „Trends“, während

Großwetterlagen eine „Persistenz“ auf kürzeren Zeitskalen darstellen. Großwetterlagen beispielsweise klingen etwa nach einer Woche ab, und die Frage ist, ob es auf größeren Zeitskalen, nach einem Monat, nach einem Jahr oder nach einer Dekade, überhaupt noch eine Persistenz in meteorologischen Zeitreihen gibt, und wenn ja, wie sie zeitlich abfällt.

## b) Lang- und kurzreichweitige Korrelationen

Um das Korrelationsverhalten und die Persistenz von Zeitreihen zu quantifizieren, schaut man sich in der Regel die *Autokorrelationsfunktion*  $C(s)$  an, die angibt, wie zwei Messwerte, die  $s$  Werte auseinander liegen, miteinander korreliert sind. Man erhält  $C(s)$ , indem man für eine gegebene Zeitreihe  $(x_i)_{i=1}^N$  mit Mittelwert Null ( $\langle x_i \rangle = 0$ ) das Produkt  $x_i x_{i+s}$  über alle Paare mit festem zeitlichen Abstand  $s$  mittelt und durch das mittlere Schwankungsquadrat dividiert,

$$C(s) = \frac{\langle x_i x_{i+s} \rangle}{\langle x_i^2 \rangle} = \frac{N}{N-s} \sum_{i=1}^{N-s} x_i x_{i+s} \bigg/ \sum_{i=1}^N x_i^2. \quad (\text{II.A.1})$$

Wenn  $C(s)$  nur für  $s = 0$  verschieden von Null ist, sind die  $x_i$  unkorreliert. Bei *kurzreichweitigen Korrelationen* ist die charakteristische Korrelationszeit

$$s_\times = \int_0^\infty C(s) ds, \quad (\text{II.A.2})$$

mit der  $C(s)$  abfällt, verhältnismäßig klein. Das einfachste Beispiel hierfür stellen exponentiell abklingende Korrelationen dar,

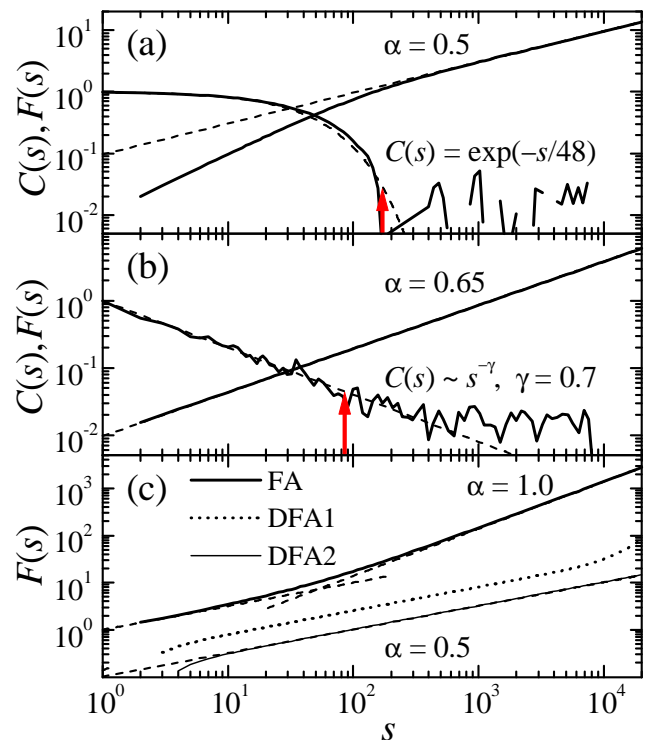
$$C(s) = \exp[-s/s_\times]. \quad (\text{II.A.3})$$

Bei *langreichweitigen Korrelationen* hingegen divergiert die charakteristische Korrelationszeit  $s_\times$  und wird damit größer als alle anderen Zeitskalen im System. Das beste Beispiel dafür ist ein asymptotischer Abfall von  $C(s)$  nach einem Potenzgesetz,

$$C(s) \sim s^{-\gamma} \text{ mit } 0 < \gamma < 1 \quad (\text{II.A.4})$$

für  $s \gg 1$ . Der *Korrelationsexponent*  $\gamma$  gibt hier die Stärke der langreichweitigen Korrelationen an, wobei  $\gamma$  nahe 0 für die stärksten und  $\gamma$  nahe 1 für die schwächsten langreichweitigen Korrelationen steht. Der Fall  $\gamma \geq 1$  wird zu den Kurzzeitkorrelationen gerechnet, obwohl  $\int_0^\infty s^q C(s) ds$  für große  $q$  divergiert.

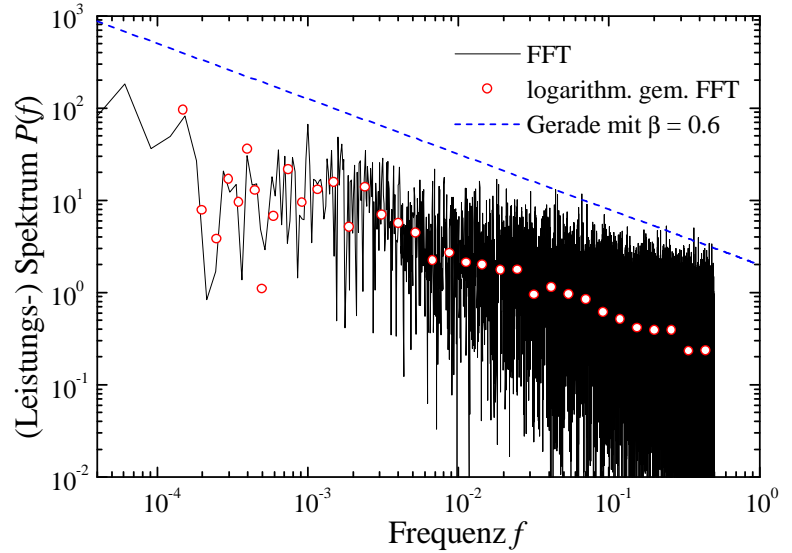
In der Praxis tritt bei der direkten Bestimmung von  $C(s)$  insbesondere für kurze Zeitreihen das Problem auf, dass das berechnete  $C(s)$  aufgrund unzureichender Statistik um Null herum schwankt und die interessierenden Gesetzmäßigkeiten im asymptotischen Bereich nicht zu erkennen sind. Das sieht man in den Abbildungen II.A.1(a) und II.A.1(b), in denen  $C(s)$  doppel-logarithmisch für eine Reihe kurz- bzw. langreichweitig korrelierter Zufalls-



**Abb. II.A.1:** Vergleich von Auto-Korrelationsfunktion  $C(s)$  (fallend) und Fluktuationsfunktion  $F(s)$  (FA und in (c) auch DFA; steigend) für simulierte (a) kurzreichweitig korrelierte Daten, (b) langreichweitig korrelierte Daten und (c) unkorrelierte Daten mit linearem Trend. Die Pfeile in (a) und (b) zeigen die Skala  $s$  an, für die  $C(s)$  erstmals negativ wird; auf größeren Skalen kann das Skalenverhalten nur noch aus  $F(s)$  abgelesen werden. Die gestrichelten Geraden haben die angegebenen Steigungen (nach [BUNDE&KANTELHARDT-01]).

zahlen aufgetragen ist. Oberhalb der mit Pfeilen markierten Skala treten aufgrund der Schwankungen negative Werte von  $C(s)$  auf, und man kann das Korrelationsverhalten nicht mehr bestimmen.

Hinzu kommt, dass Nichtstationaritäten und insbesondere Trends bei der Betrachtung von  $C(s)$  Langzeitkorrelationen vortäuschen können. In diesem Fall sind der Mittelwert  $\langle x_i \rangle$  oder die Varianz  $\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2$  zeitlich nicht konstant, und die Definition der Autokorrelationsfunktion  $C(s)$  ist streng genommen nicht möglich. Eine formale Verwendung der Definition (II.A.1) kann dann dazu führen, dass  $C(s)$  nicht oder nur unrealistisch langsam abfällt. Um das Vorliegen von Langzeitkorrelationen zu untersuchen, empfiehlt es sich daher nicht,  $C(s)$  direkt zu bestimmen.



**Abb. II.A.2:** Spektralanalyse und logarithmisch gemittelte Spektralanalyse für langreichweitig korrelierte Zufallszahlen ( $\gamma = 0.4$ ,  $\beta = 0.6$ ); die gestrichelte Gerade dient zum Vergleich mit dem Potenzgesetz.

### c) Spektralanalyse und Erzeugung korrelierter Zahlen

Das erste Problem mit der Autokorrelationsfunktion  $C(s)$ , das Schwanken um Null im asymptotischen Bereich, kann mit der alternativen Methode der Spektralanalyse umgangen werden, die aber auch Stationarität der Datenreihen auf langen Zeitskalen voraussetzt. Die Methode ist seit langem bekannt, siehe beispielsweise [HUNT-51], der den Zusammenhang mit der fraktionalen Brownschen Bewegung aufzeigte, und die erste Anwendung auf Herzschlag-Reihen [KOBAYASHI&MUSHA-82]. Bei der Spektralanalyse wird das Leistungs-Spektrum  $P(f)$  in Abhängigkeit von der Frequenz  $f$  berechnet als Betragsquadrat der komplexen Koeffizienten der Fourier-Transformierten der Zeitreihe. Für stationäre Reihen lässt sich ein Skalenverhalten von  $P(f)$  mit spektralem Exponenten  $\beta$ ,

$$P(f) \sim f^{-\beta} \quad (f \ll 1), \quad (\text{II.A.5})$$

einfach mit dem Wiener-Kinchin Theorem auf das Skalenverhalten von  $C(s)$  nach Gl. (II.A.4) zurückführen und ein Zusammenhang zwischen dem Korrelationsexponenten  $\gamma$  und dem spektralem Exponenten  $\beta$  herleiten. Dabei wird ausgenutzt, dass  $P(f)$  die Fourier-Transformierte der Autokorrelationsfunktion  $C(s)$  ist (siehe z.B. [RANGARAJAN&DING-00] für die exakte Rechnung),

$$P(f) \sim \int e^{-i2\pi ft} C(t) dt \sim \int e^{-i2\pi ft} t^{-\gamma} dt \rightarrow (1/2\pi f)^{-\gamma+1} \sim f^{-(1-\gamma)} \Rightarrow \beta = 1 - \gamma \quad (\text{II.A.6})$$

Werte von  $\beta$  zwischen 0 und 1 zeigen langreichweitig korrelierte Daten an, während  $\beta = 0$  einem flachen Frequenzspektrum (weißes Rauschen), d.h. unkorrelierten Daten entspricht. Ein Wert  $\beta > 1$  zeigt nichtstationäre Daten an, denn er entspricht einem negativen Wert für  $\gamma$ , d.h. einem Divergieren der Autokorrelationsfunktion für große Skalen  $s$ . Ein negativer Wert für  $\beta$  ist auch möglich und steht für antikorrelierte Daten (z.B. Datenreihen mit alternierendem Vorzeichen), deren Verhalten sich nicht eindeutig mit der Autokorrelationsfunktion  $C(s)$  nach (II.A.1) beschreiben lässt.

In [TAQUUetal-95] wird gezeigt, dass die Spektralanalyse nur dann zuverlässigere Ergebnisse als die Autokorrelationsfunktion liefert, wenn man eine Mittelung des Logarithmus der spektralen Leistung in Frequenzbändern mit logarithmisch anwachsender Breite durchführt („logarithmisches Binning“), d.h.  $\log[P(f)]$  in aufeinander folgenden Bändern  $[x^n f_0, x^{n+1} f_0]$  mittelt. Dabei ist die

Breite der Bänder („Bins“), d.h. der Faktor  $x$ , hinreichend groß zu wählen, so dass die statistischen Fluktuationen des gemittelten  $P(f)$  klein werden, aber auch hinreichend klein, so dass genügend Bänder in den Bereich des Skalenverhaltens fallen. Abbildung II.A.2 zeigt ein Beispiel mit „rohem“ und gemitteltem Frequenzspektrum für langreichweitig korrelierte Zufallszahlen mit  $\beta = 0.6$ . Solche Zahlen lassen sich am einfachsten erzeugen, indem man die Methode der Spektralanalyse umkehrt. Man beginnt mit unkorrelierten, Gauß-verteilten Zufallszahlen, die zuerst mittels schneller Fourier-Transformation (FFT) in den Frequenzraum transformiert werden. Das entsprechende Frequenzspektrum ist flach ( $\beta = 0$ ), weist aber die gleichen statistischen Fluktuationen auf, wie in Abb. II.A.2 für korrelierte Zahlen zu sehen ist. Für langreichweitig korrelierte Zahlen muss das Frequenzspektrum im doppelt logarithmischen Bild entsprechend Gl. (II.A.5) geneigt sein. Das wird durch eine Multiplikation der Fourier-Koeffizienten mit dem Faktor  $f^{-\beta/2}$  erreicht, was für das Leistungsspektrum  $P(f)$  dem Faktor  $f^{-\beta}$  entspricht. Die Rück-FFT ergibt dann die langreichweitig korrelierten Zahlen mit dem spektralen Exponenten  $\beta$ . Die Verteilung der so erzeugten Zahlen ist wieder eine Gaußverteilung. Diese *Fourier-Filter Methode* zur Erzeugung korrelierter Zahlen (siehe z.B. [MANDELBROT-71, VOSS-85]) wurde in [MAKSEetal-96] durch Vermeidung der Divergenz von  $C(s)$  bei  $s = 0$  verbessert. Anstelle der Skalenansätze (II.A.4) und (II.A.5) werden dabei

$$C(s) \sim (1 + s^2)^{-\gamma/2} \text{ und } P(f) = \frac{4\pi}{\Gamma^2(1-\beta/2)} (\pi f)^{-\beta} K_{-\beta/2}^2(2\pi f) \quad (\text{II.A.7})$$

verwendet mit der modifizierten Bessel-Funktion  $K_{-\beta/2}(x)$  der Ordnung  $-\beta/2$  und der Gamma-Funktion  $\Gamma(x)$ . Mit der Fourier-Filter-Methode ist es auch möglich, kurzreichweitig korrelierte Zahlenreihen zu erzeugen, indem nur die Fourier-Koeffizienten oberhalb einer charakteristischen Frequenz  $f_x$  mit dem Faktor  $(f/f_x)^{-\beta/2}$  multipliziert werden. Analog kann man durch Multiplikation der Koeffizienten unterhalb von  $f_x$  mit  $(f/f_x)^{-\beta/2}$  Zahlen erzeugen, bei denen die Langzeitkorrelationen erst auf Zeitskalen  $s_x = 1/f_x$  beginnen. Entsprechend ist ein Übergang („Crossover“) zwischen zwei unterschiedlich skalierenden Frequenz (Zeit-) Bereichen herstellbar, indem in den beiden Bereichen unterschiedliche spektrale Exponenten  $\beta$  verwendet werden.

Wenn langreichweitig korrelierte Surrogat-Datenreihen zum Vergleich mit Messdaten erzeugt werden sollen, kann es sinnvoll sein, als Ausgangszahlen für die Fourier-Filter-Methode anstelle der Gauß-verteilten Zufallszahlen die ursprünglichen Messdaten zu verwenden, aber natürlich in zufälliger Reihenfolge. Auf diese Weise kann man auch testen, ob die Verteilung der Messwerte eventuell einen Einfluss auf angewandte Methoden zur Skalenanalyse hat. Allerdings wird die Verteilung der Werte in der Fourier-Filter-Methode meist etwas in Richtung auf eine Gaußverteilung verändert. Darum wurde das iterative Schreiber-Verfahren [SCHREIBER&SCHMITZ-96, SCHREIBER&SCHMITZ-00] entwickelt, mit dem man sowohl die Verteilung als auch die Korrelationen der Surrogat-Daten einstellen kann. Der erste Schritt ist dabei die normale Fourier-Filter-Methode mit den gemischten Messdaten aus Ausgangszahlen. Im zweiten Schritt wird die ursprüngliche Werte-Verteilung wiederhergestellt, indem die neuen Zahlen entsprechend ihrer Größe durch die Messwerte ersetzt werden, also die niedrigste neue Zahl wird durch den niedrigsten Messwert ersetzt, die zweitniedrigste neue Zahl durch den zweitniedrigsten Messwert usw. Dadurch werden aber wieder die Korrelationen leicht verfälscht. Darum müssen beide Schritte iterativ wiederholt werden, bis die resultierende Reihe sowohl in ihrer Verteilung als auch in ihren Korrelationen der Vorgabe hinreichend genau entspricht.

#### d) Hurst-Analyse

Zur Untersuchung der Langzeit-Persistenz von Zeitreihen wurde von dem Wasserbau-Ingenieur Harold Edwin Hurst (1880-1978) die Methode des reskalierten Bereichs („rescaled range analysis“), die *R/S*-Analyse, entwickelt [HURST-51], siehe auch [HURSTetal-65, MANDELBROT&VANNES-68,



MANDELBROT&WALLIS-69, FEDER-88]. Zur Bestimmung des reskalierten Bereichs auf der (Zeit-) Skala  $s$  wird die Zeitreihe  $(x_i)_{i=1}^N$  in  $[N/s]$  Segmente der Länge  $s$  geteilt, in jedem Segment  $v$  der Mittelwert subtrahiert und die Reihe aufsummiert,

$$Y_v(j) = \sum_{i=1}^j [x_{vs+i} - \langle x_{vs+i} \rangle_s] = \sum_{i=1}^j x_{vs+i} - \frac{j}{s} \sum_{i=1}^s x_{vs+i}. \quad (\text{II.A.8})$$

Durch die Subtraktion des Mittelwerts werden stückweise konstante Trends in der Datenreihe beseitigt. Anschließend bestimmt man – wieder in jedem Segment – das Minimum und das Maximum, deren Differenz der „Bereich“  $R_v(s)$  ist,

$$R_v(s) = \max_{j=1}^s Y_v(j) - \min_{j=1}^s Y_v(j). \quad (\text{II.A.9})$$

Außerdem wird die Standardabweichung  $S_v(s)$  in jedem Segment berechnet, und damit der mittlere „reskalierte Bereich“ definiert,

$$[R/S](s) = \frac{1}{[N/s]} \sum_{v=0}^{[N/s]-1} \frac{R_v(s)}{S_v(s)} = \frac{1}{[N/s]} \sum_{v=0}^{[N/s]-1} R_v(s) / \sqrt{\frac{1}{s} \sum_{j=1}^s Y_v^2(j)}. \quad (\text{II.A.10})$$

Durch Wiederholung der Prozedur für viele Skalen  $s$  zwischen 1 und  $N$  wird so die Funktion  $[R/S](s)$  ermittelt. Für viele geophysikalische Zeitreihen beobachtete Hurst [HURST-51, HURST-etal-65] ein Skalenverhalten der Art

$$[R/S](s) \sim s^H \quad (s \gg 1). \quad (\text{II.A.11})$$

mit dem Hurst-Exponenten  $H$  (Hurst verwendete  $K$ ). Man kann zeigen [HUNT-51, MANDELBROT&VANNES-68], dass  $H$  mit dem spektralen Exponenten  $\beta$  und daher nach Gl. (II.A.6) auch mit dem Korrelationsexponenten  $\gamma$  verknüpft ist,

$$H \approx \frac{1+\beta}{2} = \frac{2-\gamma}{2} \quad (\text{II.A.12})$$

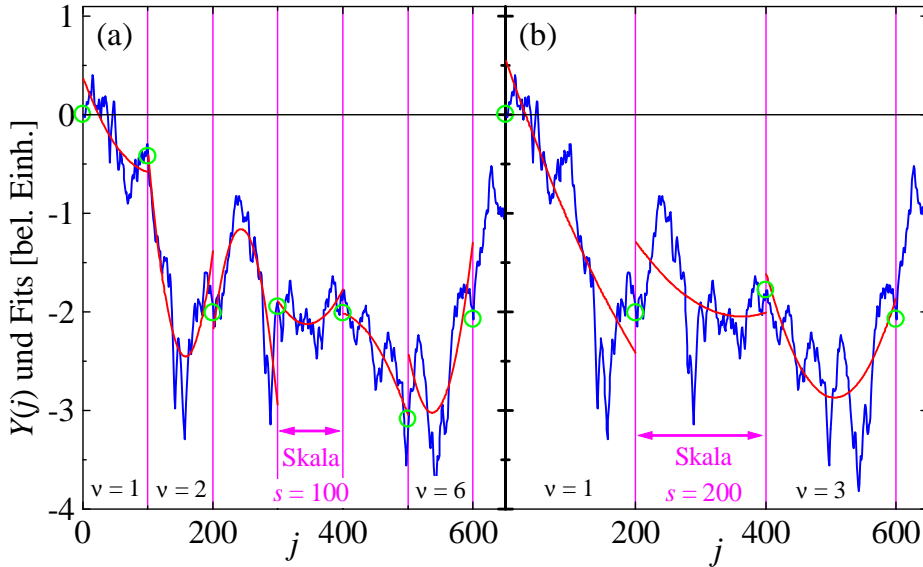
Dieser Zusammenhang gilt insbesondere für multifraktale Reihen nicht (siehe Abschnitt II.A.3.d). Der Wertebereich des Hurst-Exponenten ist auf  $0 < H < 2$  beschränkt, wobei  $H = 0.5$  für unkorrelierte Daten steht und  $H > 0.5$  für langreichweitige Korrelationen,  $H < 0.5$  für Antikorrelationen. Im Vergleich mit der Spektralanalyse hat die Hurst-Analyse vor allem den Vorteil, dass sie einfacher ist, weil schon ohne einen logarithmischen Mittelungsprozess relativ glatte und gut auswertbare Kurven erhalten werden. Zudem werden stückweise konstante Trends in den Daten beseitigt.

### e) Fluktuations-Analyse (FA)

Die Methode der Fluktuationsanalyse (FA) ist eng mit der Hurst-Analyse verwandt, hat aber den Vorteil, dass man mit Überlegungen aus der Theorie diffundierender Teilchen („Random-Walk Theorie“) für stationäre Reihen eine exakte Beziehung zur Autokorrelationsfunktion  $C(s)$  herleiten [SHLESINGERetal-87, TAQUUetal-95, BENAVIDRAHAM&HAYLIN-00] und so die ungefähre Beziehung (II.A.12) durch eine exakte ersetzen kann. Für eine gegebene Zeitreihe  $(x_i)_{i=1}^N$  mit Mittelwert Null geht die Methode aus von der *kumulierten Zeitreihe* (vgl. Gl. (II.A.8))

$$Y(j) = \sum_{i=1}^j x_i, \quad (\text{II.A.13})$$

die man als Position eines diffundierenden Teilchens nach  $j$  Schritten auffassen kann: Im  $i$ -ten Schritt bewegt sich das Teilchen um die Strecke  $|x_i|$  nach unten (falls  $x_i < 0$ ) oder nach oben (falls  $x_i > 0$ ). Die kumulierte Reihe (II.A.13) wird oft als „Profil“ der Zeitreihe  $x_i$  bezeichnet. Ein Beispiel ist die fluktuierende Kurve in Abb. II.A.3. Wie bei der Hurst-Analyse teilt man dann in  $[N/s]$  Segmente der Länge  $s$  auf; allerdings erfolgt die Aufteilung hier erst nach der Summation. In Abb.



**Abb. II.A.3:** Illustration zur Erklärung der Fluktuationsanalyse (FA) und zur trendbereinigenden Fluktuationsanalyse (DFA). Für zwei Skalen (Segmentbreiten) (a)  $s = 100$  und (b)  $s = 200$  sind ein Profil  $Y(j)$  (kumulierte Zeitreihe, fluktuierend, blau) und an dieses Profil angepasste, stückweise quadratische Polynome (rot) aufgetragen. Außerdem sind die Werte des Profils an den Segmentübergängen, die bei der FA benutzt werden, durch grüne Kreise markiert.

II.A.3 ist das für zwei verschiedene Segmentlängen (Skalen)  $s$  illustriert. In jedem Segment wird nun das Verschiebungsquadrat des Profils  $Y(j)$

$$F_{FA,v}^2(s) = [Y((v+1)s) - Y(vs)]^2 \quad (\text{II.A.14})$$

für die Skala  $s$  betrachtet. Die entsprechenden Werte des Profils  $Y(j)$  sind in Abb. II.A.3 durch Kreise markiert. Bei der Fluktuationsanalyse untersucht man – für Skalen  $s$  zwischen 1 und  $N/2$  – das mittlere Verschiebungsquadrat

$$F_{FA}^2(s) = \langle F_{FA,v}^2(s) \rangle = \frac{1}{[N/s]} \sum_{v=1}^{[N/s]} F_{FA,v}^2(s) \sim s^{2\alpha} \quad (s \gg 1) \quad (\text{II.A.15})$$

und definiert aus der Steigung im doppelt logarithmischen Bild den Fluktuationsexponenten  $\alpha$ . Der Exponent  $\alpha$  ist dabei asymptotisch für große Skalen  $s$  gemeint; es sollte aber  $s < N/10$  bleiben, damit die Statistik bei der Mittelwertbildung ausreichend ist. Um den Zusammenhang von  $\alpha$  mit dem Korrelationsexponenten  $\gamma$  (und dem spektralen Exponenten  $\beta$ ) herzuleiten, wird – ausgehend von den Glgn. (II.A.13) und (II.A.14) – die Doppelsumme des Verschiebungsquadrats zunächst in Terme mit gleichen und mit ungleichen Indizes aufgeteilt,

$$\langle F_{FA,v}^2(s) \rangle = \langle [Y((v+1)s) - Y(vs)]^2 \rangle = \left\langle \left( \sum_{k=1}^s x_k \right)^2 \right\rangle = \left\langle \sum_{k,l=1}^s x_k x_l \right\rangle = \sum_{k,l=1}^s \langle x_k x_l \rangle = \sum_{k=1}^s \langle x_k^2 \rangle + \sum_{k \neq l}^{k,l \leq s} \langle x_k x_l \rangle.$$

Während der erste Term dem  $s$ -fachen der Varianz entspricht (stationäre Reihe,  $\langle x_i \rangle = 0$ ), kann der zweite Term durch die Autokorrelationsfunktion (II.A.1) ausgedrückt werden,

$$\langle F_{FA,v}^2(s) \rangle = \langle x_k^2 \rangle \left\{ s + \sum_{k \neq l}^{k,l \leq s} C(|k-l|) \right\} = \langle x_k^2 \rangle \left\{ s + 2 \sum_{k=1}^{s-1} (s-k) C(k) \right\}. \quad (\text{II.A.16})$$

Für kurzreichweitig korrelierte Daten fällt  $C(s)$  relativ schnell ab und auf großen Skalen  $s$  dominiert der erste Term die geschweifte Klammer in Gl. (II.A.16). Man erhält dann

$$F_{FA}^2(s) \sim s, \quad (\text{II.A.17})$$

entsprechend dem Fluktuationsexponenten  $\alpha = 1/2$  in Gl. (II.A.15). Ein Beispiel zeigt Abb. II.A.1(a). Dieses Ergebnis entspricht dem *Fickschen Diffusionsgesetz*: Das mittlere Verschie-

bungsquadrat  $R^2(t) = \langle r^2(t) \rangle \sim t$  des Abstands eines diffundierenden Teilchens („Random walker“) von seinem Startpunkt steigt linear mit der Zeit  $t$  an, wenn die einzelnen Schritte des Teilchens unkorreliert sind. Die Fluktuationsfunktion  $F_{\text{FA}}(s)$  entspricht  $R(t)$  und die Skala  $s$  entspricht der Zeit  $t$ . Bei langreichweitig korrelierten Daten mit  $C(s)$  nach Gl. (II.A.4) hingegen dominiert für große Skalen  $s$  der zweite Term die geschweifte Klammer in Gl. (II.A.16), und man findet wegen

$$\sum_{k=1}^{s-1} C(k) \sim \sum_{k=1}^{s-1} k^{-\gamma} \approx \int_1^s k^{-\gamma} dk \sim s^{1-\gamma} \text{ und } \sum_{k=1}^{s-1} kC(k) \sim s^{2-\gamma} \quad (s \gg 1)$$

schließlich unter Ausnutzung von Gl. (II.A.6)

$$F_{\text{FA}}^2(s) \sim s^{2\alpha} \quad (s \gg 1) \quad \text{mit } \alpha = 1 - \frac{\gamma}{2} = \frac{1+\beta}{2}. \quad (\text{II.A.18})$$

Damit ist der Zusammenhang zwischen den drei Exponenten hergeleitet; siehe Abb. II.A.1(b) als ein Beispiel. Der Wertebereich von  $\alpha$  ist noch stärker beschränkt als bei der Hurst-Analyse. Es gilt  $0 < \alpha < 1$ , so dass nur auf allen Skalen stationäre Daten mit der FA analysiert werden können.

Ein Problem ist, dass Trends auch  $F_{\text{FA}}(s)$  verfälschen und ein falsches Korrelationsverhalten vorkaukeln können. Das ist in Abb. II.A.1(c) für unkorrelierte Zufallszahlen  $x_i$  gezeigt, zu denen ein schwacher Trend addiert wurde,  $x_i' = x_i + 5i/10^6$ . Durch den Trend tritt ein Abknicken bei  $s \approx 70$  auf. Oberhalb davon beträgt die Steigung nicht mehr  $\alpha = 1/2$ , was nach Gl. (II.A.17) für unkorrelierte Zahlen zu erwarten wäre, sondern zunächst  $\alpha \approx 0.9$  und später, bei großen  $s$ -Werten,  $\alpha = 1$ . Das eigentlich unkorrelierte Verhalten wird durch den Trend verschleiert. Um Langzeitkorrelationen von Trends zu separieren, muss man daher das Verfahren modifizieren.

## II.A.2. Trendbereinigende Fluktuationsanalyse (DFA)

Die trendbereinigende Fluktuationsanalyse („detrending fluctuation analysis“, DFA) wurde von [OSSADNIKetal-94, PENGetal-94] basierend auf der Theorie diffundierender Teilchen („Random-Walk Theorie“) der Statistischen Physik entwickelt, um die langreichweitigen Korrelationen in der Basensequenz in Erbinformations- (DNS-) Strängen trotz der dabei vorhandenen starken Trends analysieren zu können (zu DNS-Korrelationen siehe Abschnitt II.C.1). Die Methode wurde seit 1995 auf kardiologische Datenreihen angewandt; seitdem haben sich die Anwendungen vervielfacht, und mittlerweile gibt es weit über 100 Publikationen, in denen die Methode angewandt wird. Im Jahr 2000 wurde erstmals eine Erweiterung auf Polynomfits höherer Ordnung zur Trendbereinigung publiziert [BUNDEetal-00], und es folgten drei Arbeiten mit systematischen Tests der Methode und ihrer Erweiterung [KANTELHARDTetal-01, HUetal-01, CHENetal-02].

### a) DFA mit Polynomfits verschiedener Ordnung

Wie bei der Fluktuationsanalyse geht man bei der trendbereinigten Fluktuationsanalyse von der in  $[N/s]$  Segmente der Länge  $s$  geteilten kumulierten Zeitreihe  $Y(j)$ , Gl. (II.A.13), aus. Da die Länge  $N$  der Reihe im Allgemeinen nicht ein Vielfaches der Skala (der Segmentlänge)  $s$  ist, wird bei dieser Teilung meist ein kürzeres Stück am Ende übrig bleiben. Um dieses bei der Analyse nicht ganz außer Acht zu lassen, ist es sinnvoll, zusätzlich noch einmal vom hinteren Ende der Zeitreihe beginnend Segmente einzuteilen. Damit erhält man insgesamt  $2[N/s]$  Segmente und das Gewicht der Daten an beiden Enden der Zeitreihe ist halbiert, weil sie nur einmal in diesen Segmenten vorkommen, während die anderen Daten doppelt vorkommen. In jedem Segment  $v$  wird dann ein Polynom

$$p_{v,s}^{(n)}(j) = \sum_{k=0}^n a_k x^k \quad (\text{II.A.19})$$

an die diskreten Punkte der kumulierte Zeitreihe, das Profil  $Y(j)$ , angepasst. Falls hier Legendre-Polynome anstelle der Monome als Basis verwendet werden, ist bei der Anpassung der Polynome

kein Lösen eines Gleichungssystems erforderlich [PANG&TZENG-03]. Der Grad  $n$  der Polynome (II.A.19) entscheidet über die Ordnung der Trends, die beseitigt werden können. Wird nur eine mittlere Konstante abgezogen (Polynomfit 0. Ordnung, DFA0), so entsprechen die Ergebnisse der FA. Mit linearen Polynomen (DFA1) werden lineare Trends im Profil, d.h. stückweise konstante Trends in den ursprünglichen Daten beseitigt. Mit quadratischen Polynomen (DFA2) kann man lineare Trends in den Daten beseitigen, mit kubischen Polynomen (DFA3) quadratische Trends, usw. In Abb. II.A.3 sind beispielhaft quadratische Polynome an das Profil  $Y(j)$  angepasst.

Die Varianz zwischen dem Profil und den angepassten Polynomen ergibt das Fluktuationsquadrat in jedem Segment  $v$ ,

$$F_{\text{DFA}n,v}^2(s) = \frac{1}{s} \sum_{j=1}^s [Y(vs + j) - p_{v,s}^{(n)}(j)]^2. \quad (\text{II.A.20})$$

Damit wird die DFA $n$ -Fluktuationsfunktion als Mittelwert über alle Segmente definiert,

$$F_{\text{DFA}n}(s) = \sqrt{\langle F_{\text{DFA}n,v}^2(s) \rangle} = \sqrt{\frac{1}{2[N/s]} \sum_{v=1}^{2[N/s]} F_{\text{DFA}n,v}^2(s)} \sim s^\alpha \quad (s \gg 1). \quad (\text{II.A.21})$$

Der Exponent  $\alpha$  ist hier wieder asymptotisch für große Skalen  $s$  gemeint; es sollte aber  $s < N/4$  bleiben, damit die Statistik bei der Mittelwertbildung ausreichend ist. Obwohl sich der Zusammenhang zwischen dem Skalenverhalten der DFA $n$ -Fluktuationsfunktion  $F_{\text{DFA}n}(s)$  und dem Skalenverhalten von  $C(s)$  nicht einfach analytisch herleiten lässt wie bei der FA, kann doch in aufwendigen Rechnungen [HENEGHAN&MCDARBY-00, PANG&TZENG-03] gezeigt werden, dass das Skalenverhalten durch die Trendbeseitigung nicht verändert wird. Außerdem bestätigen numerische Untersuchungen von simulierten Daten mit wohldefiniertem Korrelationsverhalten, dass der Zusammenhang (II.A.18) auch für den nach Gl. (II.A.21) für die DFA $n$  definierten Exponenten  $\alpha$  gültig bleibt,

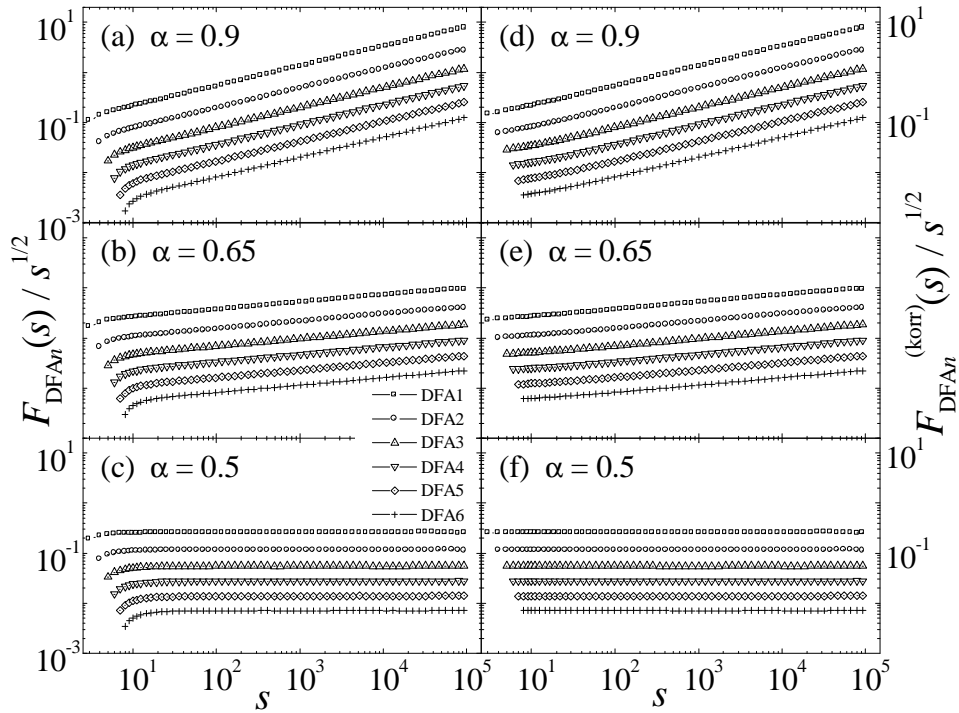
$$\alpha = 1 - \frac{\gamma}{2} = \frac{1+\beta}{2}. \quad (\text{II.A.18})$$

Beispiele für unterschiedlich korrelierte Zufallszahlen zeigt Abb. II.A.4(a-c). Dabei wurde die Fluktuationsfunktion durch  $s^{1/2}$  dividiert, um Unterschiede zum unkorrelierten Verhalten ohne Trends,  $\alpha = 0.5$ , d.h.  $F(s) \sim s^{1/2}$ , deutlicher hervortreten zu lassen. Eine positive Steigung ( $\alpha > 0.5$ ) der so reskalierten Fluktuationsfunktionen zeigt langreichweitige Korrelationen an, während eine negative Steigung ( $\alpha < 0.5$ ) für Antikorrelationen steht. Im Gegensatz zur FA kann der Exponent  $\alpha$  bei der DFA auch Werte über 1 annehmen; das Maximum für die DFA $n$  ist  $\alpha = n + 1$ , so dass in dieser Hinsicht die DFA1 der Hurst-Analyse (siehe Abschnitt II.A.1.d) entspricht. Allerdings sollte die nächst höhere DFA-Ordnung  $n$  verwendet werden, sobald  $\alpha$  in die Nähe des Maximums kommt.

## b) DFA mit Korrekturfunktion

Bei genauer Betrachtung der in Abb. II.A.4(a-c) gezeigten DFA $n$ -Fluktuationsfunktionen fällt auf, dass für kleine Skalen  $s$  systematische Abweichung vom Potenzgesetz (II.A.21) auftreten, die bei höheren Ordnungen  $n$  der Trendbereinigung bis hin zu Skalen  $s \approx 15$  reichen. Der Grund ist, dass mit den angepassten Polynomen hoher Ordnung bei kleinen Segmentlängen nicht nur mögliche Trends, sondern auch Teile der Fluktuationen beseitigt werden. Dadurch wird die Fluktuationsfunktion systematisch etwas zu klein.

Dieser systematische Fehler lässt sich durch eine Korrektur-Funktion beseitigen. Dabei nutzt man aus, dass die Abweichung auch bei unkorrelierten Daten ( $\alpha = 1/2$ , siehe Abb. II.A.4(c)) auftritt. Darum kann sie beseitigt werden, indem man die eigentliche Fluktuationsfunktion  $F_{\text{DFA}n}(s)$  durch die Fluktuationsfunktion  $F_{\text{DFA}n}^{(\text{gemischt})}(s)$  der gemischten Daten teilt. Zur Verbesserung der Statistik werden bei der Berechnung von  $F_{\text{DFA}n}^{(\text{gemischt})}(s)$  am besten mehrere gemischte Versionen der Reihe hintereinander gehängt. Durch das Mischen werden alle Korrelationen beseitigt; jegliche Abwei-



**Abb. II.A.4:** Trendbereinigende Fluktuationsanalyse von langreichweitig korrelierten Zufallszahlen mit (a,d)  $\gamma = 0.2$  ( $\alpha = 0.9$ ), (b,e)  $\gamma = 0.7$  ( $\alpha = 0.65$ ) und unkorrelierten Zufallszahlen (c,f;  $\alpha = 0.5$ ). In (a-c) sind die skalierten gewöhnlichen DFA-Fluktuationsfunktionen  $F_{\text{DFA}_n}(s)/s^{1/2}$  doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  aufgetragen, während (d-f) die korrigierten Fluktuationsfunktionen zeigt. Die Division durch  $s^{1/2}$  lässt Abweichungen vom unkorrelierten Verhalten hervortreten. Die Symbole entsprechen den Ordnungen der Trendbereinigung, DFA1 ( $\circ$ ), DFA2 ( $\square$ ), DFA3 ( $\triangle$ ), DFA4 ( $\nabla$ ), DFA5 ( $\diamond$ ) und DFA6 ( $+$ ). Die je 100 Reihen der Länge  $N = 200\,000$  wurden mit der Fourier-Filter-Methode erzeugt. Bei der korrigierten DFA (rechts) sind die systematischen Abweichungen auf kleinen Skalen reduziert (nach [KANTELHARDTetal-01]).

chungen, die  $F_{\text{DFA}_n}^{(\text{gemischt})}(s)$  vom  $s^{1/2}$ -Verhalten aufweist, sind nur noch auf die systematische Abweichung bei kleinen  $s$  zurückzuführen. Darum weist die Funktion

$$F_{\text{DFA}_n}^{(\text{korr})}(s) = \frac{F_{\text{DFA}_n}(s)}{F_{\text{DFA}_n}^{(\text{gemischt})}(s)} s^{1/2} \quad (\text{II.A.22})$$

die systematische Abweichung auf kleinen Skalen  $s$  nicht mehr oder nur in sehr stark verringertem Maße auf. Das ist in Abb. II.A.4(d-f) für unterschiedlich korrelierte Zufallszahlen gezeigt.

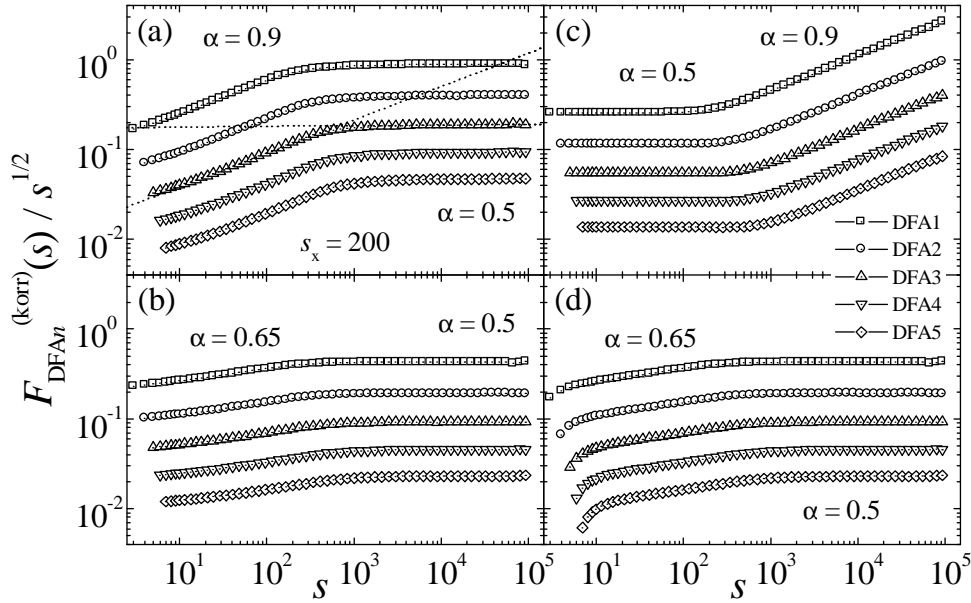
In der Praxis hat die nach Gl. (II.A.22) korrigierte DFA $_n$ -Fluktuationsfunktion den Nachteil, dass sie für große  $s$  stärkere statistische Schwankungen aufweist, weil dann die statistischen Fehler von  $F_{\text{DFA}_n}(s)$  und  $F_{\text{DFA}_n}^{(\text{gemischt})}(s)$  zusammen kommen. Darum ist es sinnvoll, die Korrektur nur auf kleinen Skalen durchzuführen, auf denen sie einen wesentlichen Beitrag liefert. Numerische Tests ergeben, dass man  $F_{\text{DFA}_n}(s)$  am besten nur auf den Skalen  $s < N/20$  durch

$$F_{\text{DFA}_n}^{(\text{korr})}(s) = F_{\text{DFA}_n}(s) \frac{F_{\text{DFA}_n}^{(\text{gemischt})}(N/20)}{F_{\text{DFA}_n}^{(\text{gemischt})}(s)} \frac{s^{1/2}}{(N/20)^{1/2}} \quad (\text{II.A.23})$$

ersetzt. Der Unterschied zu Gl. (II.A.22) ergibt sich dabei durch die Anforderung, dass der ersetzte und der nicht ersetzte Teil der Fluktuationsfunktion stetig in einander übergehen sollen.

### c) Bestimmen von Übergängen im Skalenverhalten

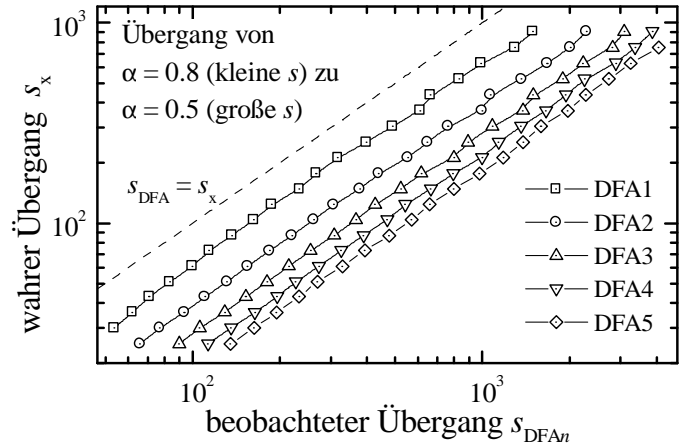
Oft folgen die Korrelationen in Zeitreihen nicht über alle Zeitskalen demselben Skalengesetz, sondern es treten ein oder mehrere Übergänge zwischen verschiedenen Skalenbereichen auf. Beispielsweise können die Daten auf langen Skalen unkorreliert werden; dann möchte man gerne die



**Abb. II.A.5:** Korrigierte DFA für Zufallszahlen mit einem Übergang von langreichweitigen Korrelationen ((a):  $\gamma = 0.2$ ,  $\alpha = 0.9$ ; (b):  $\gamma = 0.7$ ,  $\alpha = 0.65$ ) für  $s < s_x = 200$  zu unkorreliertem Verhalten für  $s > s_x$ , bzw. umgekehrt (c). Die skalierten und korrigierten Fluktuationsfunktionen  $F_{\text{DFA}_n}^{(\text{korr})}(s)/s^{1/2}$  sind mit den gleichen Symbolen wie im vorhergehenden Bild für DFA1 bis DFA5 doppelt logarithmisch gegen  $s$  aufgetragen. Zum Vergleich zeigt Teil (d) die nicht korrigierte DFA der schon in Teil (b) betrachteten Daten. Die Rechnungen basieren auf je 100 Reihen der Länge  $N = 200\,000$ . Die gepunkteten Linien in (a) illustrieren die lineare Approximationsprozedur, mit der die scheinbare Position des Übergangs  $s_{\text{DFA3}}$  ermittelt wurde, während der wahre Übergang bei  $s_x = 200$  liegt (nach [KANTELHARDTetal-01]).

charakteristische Übergangszeit  $s_x$  extrahieren. Es zeigt sich, dass die verschiedenen DFA-Ordnungen die Übergänge nicht an genau derselben Stelle zeigen, sondern leichte systematische Unterschiede aufweisen, die sich bestimmen und dann in der Praxis korrigieren lassen.

Abbildung II.A.5 zeigt die verschiedenen DFA-Fluktuationsfunktionen für simulierte Daten mit einem Korrelations-Übergang bei  $s_x = 200$ . Man erkennt, dass die Ordnungsspezifisch detektierten charakteristischen Übergangszeiten  $s_{\text{DFA}_n}$  systematisch etwas größer sind als das wahre  $s_x$ . Das gilt sowohl für Übergänge von korreliertem Verhalten zu unkorreliertem Verhalten (Abb. II.A.5(a, b)) als auch für den umgekehrten Fall (Abb. II.A.5(c)), der z.B. auftritt, wenn zu langreichweitig korrelierten Daten weißes Rauschen durch den Messprozess hinzutritt. Insbesondere wenn das Skalenverhalten in beiden Bereichen ähnlich ist, sollte man – wie hier geschehen – korrigierte DFA benutzen, weil sonst die systematischen Abweichungen bei klei-



**Abb. II.A.6:** Eichkurve für in der DFA-Fluktuationsfunktion beobachtete Übergänge  $s_{\text{DFA}_n}$  zwischen zwei Skalenbereichen. Jedes Symbol basiert auf Simulationen mit 200 Reihen der Länge  $N = 100\,000$  und zeigt den bei der Datenerzeugung mittels der Fourier-Filter-Methode verwendeten (wahren) Übergang  $s_x$  in Abhängigkeit von dem aus der Fluktuationsfunktion abgelesenen Übergang  $s_{\text{DFA}_n}$ . Obwohl die Ergebnisse für einen Übergang zwischen einem Potenzgesetz-artigen Korrelationsverhalten ( $\gamma = 0.4$ ,  $\alpha = 0.8$ ) für  $s < s_x$  und unkorreliertem Verhalten für  $s > s_x$  ermittelt wurden, kann die Eichkurve auch für andere Übergänge inklusive inverser Übergänge verwendet werden (nach [KANTELHARDTetal-01]).

en  $s$  die klare Identifikation des ersten Bereichs erschweren (siehe Abb. II.A.5(d)). Abbildung II.A.6 zeigt eine „Eichkurve“, mit der sich von den beobachteten Übergängen  $s_{DFA_n}$  in der DFA1 bis DFA4 auf den wahren Wert  $s_x$  schließen lässt. Die Eichkurven sind auch für andere Übergänge gut verwendbar, obwohl hier Daten mit langreichweitigen Korrelationen  $\alpha = 0.8$  auf kurzen Skalen  $s$  und unkorreliertem Verhalten auf großen Skalen verwendet wurden.

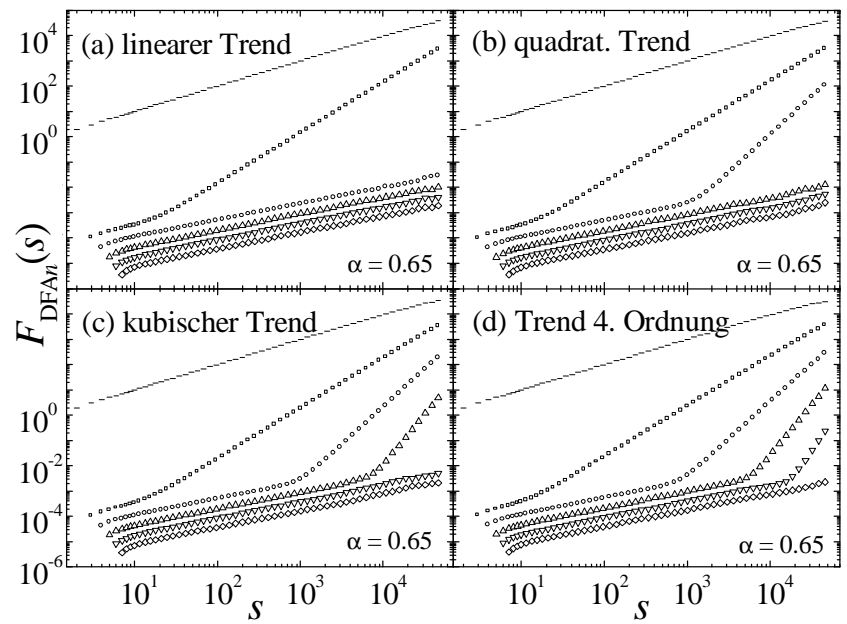
#### d) Erkennung von monotonen und periodischen Trends

Messdaten können oft nur unter nicht völlig stationären Bedingungen aufgenommen werden, insbesondere bei biomedizinischen Anwendungen. Daher ist es wichtig,

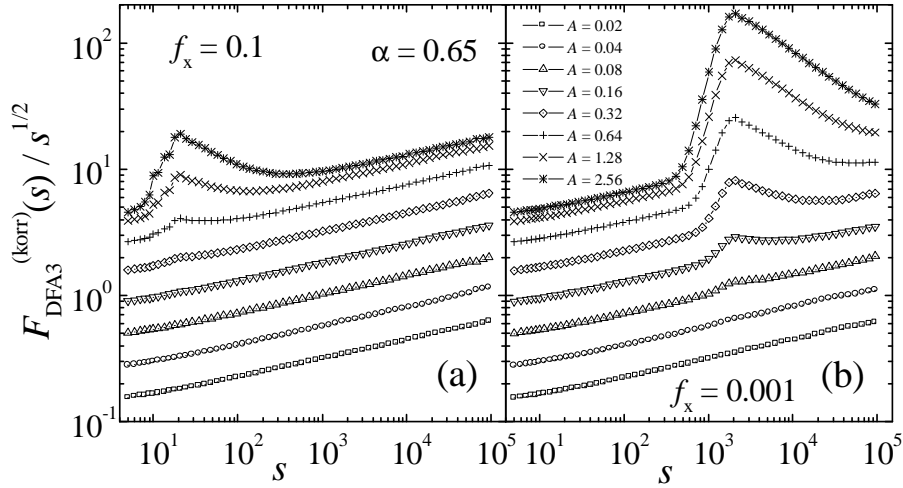
mögliche Einflüsse von Nichtstationaritäten, wie insbesondere monotonen und periodischen Trends, auf die DFA zu kennen. Damit wird es möglich, Trends eindeutig von Übergängen im Skalenverhalten zu unterscheiden. Die Unterscheidung beruht im Prinzip darauf, dass Trends stärker von der DFA-Ordnung beeinflusst werden als Übergänge, die nur eine schwache, systematische Abhängigkeit zeigen (siehe vorhergehenden Abschnitt).

Abbildung II.A.7 zeigt den Einfluss von monotonen Trends mit ganzzahligen Exponenten auf die DFA. Dabei werden Datenreihen  $x'_i = x_i + Ax^m$  mit langreichweitig korrelierten  $x_i$  und verschiedenen ganzzahligen  $m$  analysiert. Man sieht, dass die DFA $n$  solche Trends bis zur Ordnung  $m = n - 1$  vollständig beseitigt, wie schon bei der Beschreibung der DFA-Methode erklärt wurde. Steiler ansteigende Trends hingegen beeinflussen die DFA-Ergebnisse auf großen Skalen  $s$ . Trends verursachen einen relativ scharfen, stark von der DFA-Ordnung  $n$  abhängenden Übergang zu einem Bereich mit hoher Steigung, die meist der „Sättigungssteigung“ der betreffenden DFA-Ordnung entspricht. Diese größte Steigung, die eine DFA $n$ -Fluktuationsfunktion haben kann, ist immer  $\alpha = n + 1$ . Sowohl der Wert der Steigung oberhalb des Übergangs als auch die Position des Übergangs hängen damit deutlich von  $n$  ab. Diese Abhängigkeit kann ausgenutzt werden, um (i) Einflüsse von Trends als solche zu erkennen und (ii) die Stärke  $A$  des Trends zu bestimmen. Für Letzteres gibt es aber eine bessere, ebenfalls auf der DFA basierende Methode, siehe [VJUSHINetal-01].

Der Einfluss von monotonen Trends mit nicht ganzzahligen Exponenten auf die DFA ist etwas komplizierter. Insbesondere bei Trends mit nur kleinem Exponenten liegen die Übergänge in den verschiedenen DFA-Ordnungen nicht immer so weit auseinander wie bei ganzzahligen Trends (Abb. II.A.7). Auch wird nicht immer die Sättigungssteigung der DFA im asymptotischen Bereich



**Abb. II.A.7:** Der Einfluss von (a) linearen, (b) quadratischen, (c) kubischen Trends und von (d) Trends 4. Ordnung auf die DFA ist anhand von langreichweitig korrelierten Zufallszahlen ( $\alpha = 0.65$ ) gezeigt. Man erkennt, dass die Trends – soweit sie nicht beseitigt werden – Übergänge im Skalenverhalten der Fluktuationsfunktionen verursachen, die – im Gegensatz zu Übergängen durch Änderung des Korrelationsverhaltens – bei verschiedenen DFA-Ordnungen an unterschiedlichen Stellen erfolgen. Außerdem hängt die Steigung oberhalb des Übergangs von der DFA-Ordnung ab und ist meist gleich der Sättigungssteigung  $\alpha = n + 1$  für DFA $n$ . Die Symbole entsprechen wieder den DFA-Ordnungen: FA bzw. DFA0 (-), DFA1 (\*), DFA2 (+), DFA3 (x), DFA4 (v) und DFA5 (o) (nach [KANTELHARDTetal-01]).



**Abb. II.A.8:** Der Einfluss von periodischen Trends mit hoher Frequenz (a),  $f = 0.1$ , und niedriger Frequenz (b),  $f = 0.001$ , auf die korrigierte DFA3 bei schwach langreichweitig korrelierten Zufallszahlen ( $\alpha = 0.65$ ). Beginnend mit der untersten Kurve wird die Amplitude des Trends jeweils verdoppelt; siehe Legende. Man erkennt, dass niederfrequente Trends die DFA schon bei relativ geringer Amplitude stören, während für hochfrequente Trends größere Amplituden noch akzeptabel sind (nach [KANTELHARDTetal-01]).

erreicht. Vielmehr ist die dortige Steigung für die DFA $n$  und einen Trend der Form  $Ax^p$  das Minimum aus  $p + 1$  und  $n + 1$ . Das bedeutet, dass man sich beim Auftreten einer asymptotischen Steigung von  $\alpha > 1$  in der DFA davon überzeugen muss, dass kein solcher langsamer Trend vorliegt, bevor man von starken Langzeitkorrelationen sprechen kann.

Außer den bisher angesprochenen monotonen Trends sind auch periodische Trends von wesentlicher Bedeutung, da sie z.B. bei meteorologischen Datenreihen in Form eines Jahresgangs oder bei Herzschlagdaten in Form der (atmungsbedingten) Sinus-Arrhythmie auftreten. Es ist dabei wichtig, die Auswirkungen solcher Trends zu kennen, um davon verursachte Störungen als solche erkennen und dann geeignete Maßnahmen zur vorherigen Trendbeseitigung treffen zu können.

Abbildung II.A.8 zeigt den Einfluss von hoch- und niederfrequenten periodischen Trends unterschiedlicher Intensität auf die Ergebnisse der DFA. Es ist anzumerken, dass die DFA-Methode periodische Trends nie beseitigen kann. Schwache periodische Trends stören allerdings die Analyse nicht, insbesondere wenn sie eine hohe Frequenz haben. Eine systematische Diskussion der Einflüsse von periodischen Trends auf die DFA und besonders der von solchen Trends verursachten Übergänge findet sich in [HUetal-01].

### e) Amplituden- und Vorzeichen-DFA

Weitere Information über die Korrelationseigenschaften kann man durch die so genannte Amplituden und Vorzeichen-DFA erhalten [ASHKENAZYetal-01, ASHKENAZYetal-03a], bei denen die betrachtete Zeitreihe vor der Analyse in zwei Reihen aufgeteilt wird. Dabei werden die Korrelationen in den Vorzeichen und den Amplituden der Inkremente der Zeitreihen getrennt analysiert. Für eine gegebene Datenreihe  $(x_i)_{i=1}^N$  wird dabei als erstes die Inkrementreihe  $(\delta x_i)_{i=1}^{N-1}$  gebildet,

$$\delta x_i = x_{i+1} - x_i. \quad (\text{II.A.24})$$

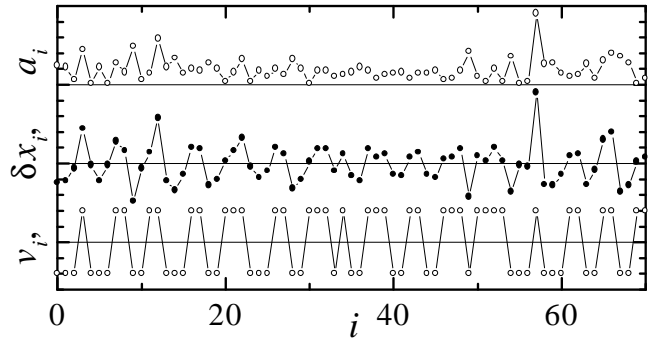
Daraus erhält man dann die Amplitudenreihe  $(a_i)_{i=1}^{N-1}$  und die Vorzeichenreihe  $(v_i)_{i=1}^{N-1}$  mit

$$a_i = |\delta x_i| \text{ und } v_i = \text{sign}(\delta x_i) = \begin{cases} -1 & \text{falls } \delta x_i < 0 \\ 0 & \text{falls } \delta x_i = 0. \\ 1 & \text{falls } \delta x_i > 0 \end{cases} \quad (\text{II.A.25})$$

Abbildung II.A.9 zeigt ein Beispiel. Da diese Reihen aus der Inkrementreihe  $\delta x_i$  abgeleitet sind, weist insbesondere die Vorzeichenreihe oft Antikorrelationen auf. Zum Beispiel bei unkorrelierten



Zufallszahlen ist die Vorzeichenreihe  $v_i$  stark antikorreliert, denn auf eine besonders große Zufallszahl folgt mit hoher Wahrscheinlichkeit eine typische, die kleiner ist, so dass ein deutlich positives Inkrement sehr häufig von einem negativen Inkrement gefolgt wird. Da sich solche starken Antikorrelationen mit der DFA nicht detektieren lassen – der Exponent  $\alpha$  kann nicht kleiner als 0 werden – ist es sinnvoll, die Reihen vor der Anwendung der DFA noch einmal zu kumulieren,



**Abb. II.A.9:** Beispiel für eine Inkrementreihe  $\delta x_i$  und die entsprechende Amplituden- und Vorzeichenreihe.

$$A_j = \sum_{i=1}^j a_i \quad \text{und} \quad V_j = \sum_{i=1}^j v_i. \quad (\text{II.A.26})$$

Durch ein solches Kumulieren erhöht sich der Fluktuationsexponent  $\alpha$  immer um 1, während der spektrale Exponent  $\beta$  um 2 ansteigt. Somit entspricht bei der DFA von  $(A_i)_{i=1}^{N-1}$  und  $(V_i)_{i=1}^{N-1}$  der Exponent  $\alpha = 1.5$  einem unkorrelierten Verhalten. Die kumulierten Reihen werden als Ausgangspunkt für den ersten Schritt der DFA, die Bildung des Profils nach Gl. (II.A.13) verwendet. Die restliche Prozedur (Gln. (II.A.20) und (II.A.21)) ist unverändert. Es ist anzumerken, dass das doppelte Kumulieren der Datenreihe auch bei der normalen DFA eingesetzt werden muss, wenn die Daten stark antikorreliert sind, so dass  $\alpha$  in der Nähe von 0 liegen würde.

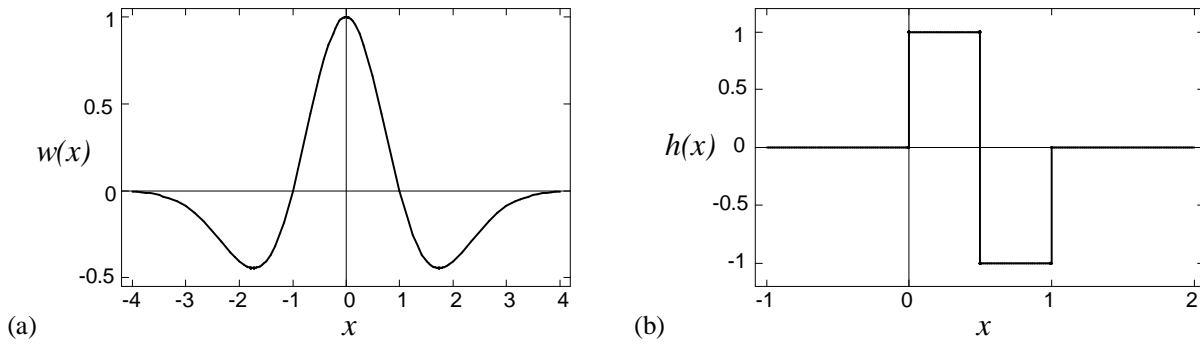
Es zeigt sich, dass die Vorzeichenreihen nur kurzreichweitig korreliert sind; asymptotisch für große  $s$  gilt stets  $F_{\text{sign-DFA}}(s) \sim s^{1.5}$ , d.h.  $\alpha_{\text{sign}} = 1.5$ . Auf kleinen Skalen sind die meisten Vorzeichenreihen mehr oder weniger stark antikorreliert,  $\alpha_{\text{sign}} < 1.5$ . Während  $(V_i)_{i=1}^{N-1}$  vor allem lineare Eigenschaften einer Zeitreihe widerspiegelt, die auch mit dem Schreiber-Verfahren [SCHREIBER&SCHMITZ-96] (siehe Abschnitt II.A.1.c) reproduziert werden, ist die entsprechende Amplitudenreihe  $(A_i)_{i=1}^{N-1}$  solcher Surrogat-Daten stets unkorreliert,  $F_{\text{ampl-DFA}}(s) \sim s^{1.5}$ , d.h.  $\alpha_{\text{ampl}} = 1.5$ , obwohl sehr oft bei Messdaten und bei multifraktalen Modelldaten  $\alpha_{\text{ampl}} > 1.5$  auftritt (zur Multifraktalität siehe Abschnitt II.A.3.c-e). Das bedeutet, dass die Amplitudenreihen besonders die nichtlinearen Eigenschaften einer Zeitreihe widerspiegeln, die mit dem Schreiber-Verfahren nicht reproduziert werden können [ASHKENAZYetal-03a]. Die Korrelationen in den Amplitudenreihen sind bei nichtlinearen Zeitreihen keineswegs auf kurze Reichweiten beschränkt. Wenn man sich trotzdem auf kurze Zeitskalen ( $s < 16$ ) beschränkt, gilt ein ungefährender Zusammenhang zwischen dem normalen DFA-Fluktuationsexponenten  $\alpha$  sowie  $\alpha_{\text{sign}}$  und  $\alpha_{\text{ampl}}$ ,

$$\alpha_{\text{sign}} \approx \frac{1}{2} (\alpha + \alpha_{\text{ampl}}), \quad (\text{II.A.27})$$

wobei  $\alpha_{\text{ampl}} = 1.5$  für lineare Daten [ASHKENAZYetal-03a]. Aus diesem Zusammenhang kann man ablesen, dass für unkorrelierte Datenreihen  $\alpha_{\text{sign}} = 1.0$  sein muss (wegen  $\alpha = 0.5$ ).

### II.A.3. Wavelet-Methoden und Multifraktalität

Die auf der so genannten Wavelet-Transformation aufbauenden Methoden zur Zeitreihenanalyse stehen zwischen der Spektralanalyse auf der einen Seite und der DFA auf der anderen Seite in dem Sinne, dass die Wavelet- („Wellchen-“) Transformation das Signal sowohl getrennt nach den spektralen Komponenten analysiert als auch Trends beseitigt. Zudem gibt es – anders als bei der DFA – keine systematischen Fehler bei der Bestimmung von Übergängen im Skalenverhalten. Dennoch ist die Methode nicht ideal, u.a. weil die maximal zu betrachtende Skala  $s$  (inverse Frequenz) aus statistischen Gründen kleiner sein muss als bei der DFA, so dass insbesondere bei kurzen Datensätzen



**Abb. II.A.10:** Zwei häufig verwendete Wavelets: (a) Der „Mexikanische Hut“ (mexican hat)  $w(x) = (1-x^2)\exp[-x^2/2]$ , (b) das Haar-Wavelet  $h(x) = 1$  ( $0 \leq x < 1/2$ ),  $-1$  ( $1/2 \leq x < 1$ ),  $0$  sonst (nach [KANTELHARDT-96]).

die Unsicherheit in der Bestimmung des asymptotischen Skalenverhaltens größer ist. Außerdem müssen manchmal zusätzliche Maßnahmen ergriffen werden, um einen monotonen Verlauf der skalierenden Funktion sicherzustellen, was die Methode komplizierter und die Ergebnisse im Einzelnen schlechter überschaubar macht.

### a) Wavelet-Transformation, verschiedene Wavelets

Die Ursprünge der Wavelets entstammen der Signaltheorie. Im Jahre 1984 erschien eine Arbeit [GOUPIILLAUDetal-84], in der eine neue Transformation zur Frequenzanalyse von Signalen (zeitabhängigen Funktionen) vorgestellt wurde; weitere grundlegende Arbeiten dazu sind [DAUBECHIES-88, MALLAT-89], eine Einführung in die mathematische Wavelet-Theorie gibt [LOISEtal-94]. Am häufigsten wird die Wavelet-Transformation zur Mustererkennung, zur Datenkompression (insbesondere bei digitalisierten Bildern) und in der Numerik verwendet. Während bei der Fourier-Transformation eine Zerlegung in ebene Wellen erfolgt und die (zeitlich) lokalen Eigenschaften der Signale nicht berücksichtigt werden, hängen die Wavelets als Basisfunktionen von Zeit und Frequenz ab und ermöglichen, die Zeitabhängigkeit des Frequenzspektrums zu analysieren.

Wie die Fourier-Transformation ist die (kontinuierliche) Wavelet-Transformation eines Signals  $x(t)$  eine Integraltransformation [LOISEtal-94],

$$L_w[x](t, s) = \frac{1}{s} \int_{-\infty}^{+\infty} x(t') w[(t' - t)/s] dt', \quad (\text{II.A.28})$$

nur hängt die Transformierte  $L_w[x]$  jetzt von der Zeit  $t$  und der Skala  $s$  (der inversen Frequenz) ab. Für Zeitreihen ist  $t = i$  diskret und das Integral geht in eine Summe über mit den Grenzen 1 und  $N$ . Die Funktion  $w(x)$  in Gl. (II.A.28) ist das Mutter-Wavelet. Alle anderen Wavelets gehen daraus durch Verschiebung auf der Zeitachse ( $t \neq 0$ ) und Streckung ( $s \neq 1$ ) hervor. Das Mutter-Wavelet kann weitgehend frei gewählt werden; es muss nur eine Funktion aus dem Hilbert-Raum der quadratintegrierbaren Funktionen sein und die Zulässigkeitsbedingung  $0 < \int |\hat{w}(x)|^2 / |x| dx < \infty$  erfüllen, wobei  $\hat{w}(x)$  die Fourier-Transformierte von  $w(x)$  ist. Notwendig ist hierfür das Verschwinden des Mittelwerts,  $\int w(x) dx = 0$ . Häufig verwendet werden die Ableitungen der Gauß-Funktion,

$$w^{(n)}(t) = \frac{d^n}{dt^n} \exp[-x^2/2], \quad (\text{II.A.29})$$

die orthogonal zu Polynomen bis zum Grad  $n - 1$  sind. Ein Beispiel ist der „Mexikanische Hut“ (mexican hat, siehe Abb. II.A.10(a)),  $-w^{(2)}(x) = (1 - x^2) \cdot \exp[-x^2/2]$ . Für diskrete Signale und Zeitreihen wird oft das so genannte Haar-Wavelet verwendet, das in der 0. Ordnung nur orthogonal zu konstanten Trends ist (siehe Abb. II.A.10(b)),

$$h(x) = \begin{cases} 1, & \text{falls } 0 \leq x < \frac{1}{2} \\ -1, & \text{falls } \frac{1}{2} \leq x < 1 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{II.A.30})$$

Man kann auch höhere Ordnungen konstruieren, die orthogonal zu linearen Trends sind,  $h^{(1)}(x) = -1/2$  ( $0 \leq x < 1/3$ ),  $1$  ( $1/3 \leq x < 2/3$ ),  $-1/2$  ( $2/3 \leq x < 1$ ), oder zu quadratischen Trends,  $h^{(2)}(x) = -1/3$  ( $0 \leq x < 1/4$ ),  $1$  ( $1/4 \leq x < 1/2$ ),  $-1$  ( $1/2 \leq x < 3/4$ ),  $1/3$  ( $3/4 \leq x < 1$ ) usw.

### b) Fluktuationsanalyse mit Haar-Wavelets (Wavelet-Analyse, WA)

Die Koeffizienten der diskreten Wavelet-Transformation mit Haar-Wavelets können zur Definition einer Fluktuationsfunktion analog zur Fluktuationsanalyse (FA) verwendet werden. Dabei geht man wieder von der in  $[N/s]$  Segmente geteilten kumulierten Zeitreihe, dem Profil  $Y(j)$ , aus und definiert für die Wavelet-Analyse 0. Ordnung (WA0)

$$F_{\text{WA0},v}(s) = L_{h^{(0)}}[Y](vs, 2s) = \frac{1}{2s} \left[ \sum_{j=1}^s Y(vs + j) - \sum_{j=1}^s Y((v+1)s + j) \right]. \quad (\text{II.A.31})$$

Analog gilt für die Wavelet-Analyse 1. Ordnung (WA1):

$$F_{\text{WA1},v}(s) = L_{h^{(1)}}[Y](vs, 3s) = \frac{1}{4s} \left[ -\sum_{j=1}^s Y(vs + j) + 2\sum_{j=1}^s Y((v+1)s + j) - \sum_{j=1}^s Y((v+2)s + j) \right] \quad (\text{II.A.32})$$

und so weiter. Mit diesen Koeffizienten für jedes Segment berechnet man dann völlig analog zur FA-Methode nach Gl. (II.A.15) die WA-Fluktuationsfunktionen  $F_{\text{WA0}}(s)$ ,  $F_{\text{WA1}}(s)$ ,  $F_{\text{WA2}}(s)$  usw., d.h. es werden die Quadrate der Wavelet-Koeffizienten  $L_{h^{(n)}}[Y](vs, (n+1)s)$  gemittelt, und zum Schluss wird die Quadratwurzel gezogen.

Das Skalenverhalten dieser  $\text{WAN}$ -Fluktuationsfunktionen,

$$F_{\text{WAN}}(s) \sim s^\alpha \quad (s \gg 1) \quad (\text{II.A.33})$$

entspricht weitgehend dem der  $\text{DFAN}$ -Fluktuationsfunktionen  $F_{\text{DFAN}}(s)$ . Unterschiede sind (i) die systematischen Abweichungen auf kleinen Skalen  $s$ , die bei der manchmal DFA korrigiert werden müssen (siehe Abschnitt II.A.2.b) aber bei der WA grundsätzlich fehlen, (ii) die entfallende Korrektur numerisch bestimmter Übergangspunkte zwischen zwei Skalenbereichen (siehe Abschnitt II.A.2.c) und (iii) stärkere statistische Schwankungen auf großen Skalen, die es nötig machen, sich bei der WA (wie auch bei der FA) auf Skalen  $s < N/10$  zu beschränken im Vergleich mit  $s < N/4$  bei der DFA. Weiterhin kann der Exponent  $\alpha$  bei der  $\text{WAN}$  auch kleiner als 0 werden; die untere Grenze für die Antikorrelationen ist hier  $\alpha > -1$ ; die Obergrenze ist wie bei der  $\text{DFAN}$   $\alpha < n + 1$ .

### c) Multifraktaler Formalismus für Zeitreihen – Singularitätsspektrum

Bisher wurden die vier äquivalenten Skalenexponenten  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  und – mit gewissen Abstrichen im Hinblick auf die Äquivalenz –  $H$  zur Beschreibung der langreichweitigen Korrelationen in Datenreihen eingeführt. Damit kann man aber nur das Verhalten von Paar-Korrelationen charakterisieren, wie schon aus der Definition der Autokorrelationsfunktion (II.A.1) hervorgeht. Viele Zeitreihen – sowohl Messdaten als auch Modelldaten – werden allerdings nicht vollständig durch diese Exponenten beschrieben, da Korrelationen höherer Ordnung ein charakteristisch anderes Skalenverhalten aufweisen, z.B. weil extreme Ereignisse, die weniger stark korreliert sind, diese höheren Korrelationsfunktionen stärker dominieren. Generell ist es bei solchen Reihen sinnvoll, das Skalenverhalten schwacher und starker Fluktuationen getrennt zu untersuchen.

Ein ähnliches Problem hatte B. B. Mandelbrot in den 70er Jahren bei der Beschreibung des Geschwindigkeitsfeldes einer turbulenten Strömung. Seine ursprünglichen Arbeiten [MANDELBROT-

72, MANDELBROT-74] wurden später ausgebaut [BENZI-84, FRISCH&PARISI-85], und die Bezeichnung „Multifraktal“ kam für diese Situationen auf, in denen die Verteilung physikalischer oder anderer Größen auf einem geometrischen Träger beschrieben werden kann durch eine Unterteilung in (fraktale) Teilmengen, die durch jeweils unterschiedliche Skalenexponenten charakterisiert sind.

Bezogen auf Zeitreihen bedeutet das Konzept der *Multifraktalität*, dass der eindimensionale Träger (der Zeitstrahl) aufgeteilt werden kann in Bereiche, in denen das Korrelationsverhalten der Messgröße jeweils durch unterschiedliche Skalenexponenten  $\alpha$  beschrieben wird. Der Exponent  $\alpha$  ist hierbei der so genannte *Hölder-Exponent*, der nicht direkt mit den oben behandelten FA- und DFA-Fluktuationsexponenten  $\alpha$  gleichgesetzt werden darf. Der Hölder-Exponent für Zeitreihen kann vielmehr als eine Art „lokaler“ Fluktuationsexponent aufgefasst werden, so dass man dafür auch  $\alpha(i)$  schreiben könnte. Dieses  $\alpha(i)$  beschreibt das Skalenverhalten der Fluktuationen der Zeitreihe lokal an der Stelle  $i$ ,

$$F_i(s) \sim s^{\alpha(i)} \quad (s \rightarrow 0), \quad (\text{II.A.34})$$

wobei  $F_i(s)$  ein Maß für die Fluktuationen der Zeitreihe in einem (kleinen) Fenster der Breite  $s$  um den Punkt  $i$  ist. Zur Messung der Fluktuationen in diesen kleinen Fenstern können die verschiedenen oben behandelten Methoden verwendet werden; allerdings kommt es hier besonders auf die kleinen Skalen  $s$  an, was numerische Probleme mit sich bringt (siehe unten).

Die Teilmengen des Zeitstrahls, d.h. die Mengen der Punkte  $i$ , die jeweils durch denselben Hölder-Exponenten  $\alpha = \alpha(i)$  charakterisiert werden, sind meist „fraktal“, d.h. sie haben eine Dimension  $f(\alpha) < 1$ . Das bedeutet, dass die Anzahl der Teilmengen-Punkte in einem doppelt so großen Abschnitt des Zeitstrahls nicht doppelt so groß ist, sondern nur um den Faktor  $2^{f(\alpha)} < 2$  größer. Aus historischen Gründen wird hier die fraktale Dimension mit  $f(\alpha)$  bezeichnet statt wie sonst üblich mit  $d$  oder  $d_f$ . Die Funktion  $f(\alpha)$  heißt auch *Singularitäts-Spektrum*, weil sie angibt, wie „oft“ ein bestimmter Hölder- (Singularitäts-) Exponent  $\alpha$  vorkommt. Da jeder Punkt des Zeitstrahls einer Teilmenge zugeordnet werden muss, hat mindestens eine der Teilmengen die maximale Dimension  $f(\alpha) = 1$  des Zeitstrahls. Für die nicht vorkommenden Hölder-Exponenten  $\alpha$  ist  $f(\alpha) = 0$ . Die Breite des  $\alpha$ -Bereichs, in dem  $f(\alpha) > 0$  ist, wird häufig mit  $\Delta\alpha$  bezeichnet, und sie ist ein Maß für die Stärke der Multifraktalität in der betrachteten Zeitreihe. Wenn überall in der Zeitreihe derselbe Hölder-Exponent  $\alpha(i)$  vorliegt, ist dieser mit dem FA- und DFA-Exponenten  $\alpha$  identisch; es gilt dann  $\Delta\alpha = 0$ , und das Singularitäts-Spektrum  $f(\alpha)$  besteht nur aus einem Punkt  $\alpha$  mit  $f(\alpha) = 1$  und 0 sonst.

#### d) Multifraktaler Formalismus für Zeitreihen – Analyse der Momente

Wie oben erwähnt gibt es wesentliche numerische Probleme bei der Bestimmung des  $f(\alpha)$ -Spektrums einer Zeitreihe anhand der Definition (II.A.34). Der Grund ist die lokale Betrachtung, die den Limes  $s \rightarrow 0$  notwendig macht und eine statistische Mittelung ausschließt. Insbesondere bei einer diskreten Zeitreihe kann  $s$  aber nie kleiner als die verwendete Auflösung werden. Zudem weisen viele Zeitreihen aufgrund einer physikalisch bedingten unteren Zeitskalen-Grenze auf kurzen Zeitskalen ein charakteristisch verändertes Skalenverhalten auf. So ist z.B. bei Außentemperatur-Messreihen aufgrund von Großwetterlagen die Persistenz auf Zeitskalen unterhalb von ein bis zwei Wochen wesentlich erhöht. Möchte man das Skalenverhalten solcher Daten beschreiben, kann der Limes in Definition (II.A.34) nicht einmal bis auf  $s = 1$  Tag betrachtet werden. Aus diesem Grunde wurde eine zweite, alternative Definition der Multifraktalität entwickelt, die mathematisch zu (II.A.34) äquivalent, aber numerisch viel stabiler ist, weil sie nicht einen Limes  $s \rightarrow 0$  erfordert. Dabei mittelt man über die gesamte Zeitreihe, betrachtet aber verschiedene Momente der Fluktuationen. Das entspricht einer Verallgemeinerung von Gl. (II.A.15) bzw. (II.A.21) [KANTELHARDTetal-02a], siehe auch [BARABÁSI&VICSEK-91, BACRYetal-01]. Die verallgemeinerte Fluktuationenfunktion  $F_q(s)$  zum Moment  $q$  wird definiert als

$$F_q(s) = \sqrt[q]{\left\langle \left[ F_v^2(s) \right]^{q/2} \right\rangle} = \left\{ \frac{1}{[N/s]} \sum_{v=1}^{[N/s]} \left[ F_v^2(s) \right]^{q/2} \right\}^{1/q} \sim s^{h(q)} \quad (s \gg 1), \quad (\text{II.A.35})$$

wobei  $q \neq 0$  ein reeller Parameter ist und  $h(q)$  ein verallgemeinerter Fluktuationsexponent mit  $h(2) \equiv \alpha$ . Da für  $q = 1$  die ersten Momente betrachtet werden wie bei der Hurst-Analyse (siehe Abschnitt II.A.1.d), entspricht  $h(1)$  dem Hurst-Exponenten  $H$ . Die Fluktuationen  $F_v(s)$  in den einzelnen Segmenten können im Prinzip mit der Hurst-Methode, der FA, der DFA $n$  oder WAN-Methode bestimmt werden. Hier wird zuerst der FA-Fall behandelt, weil der sich direkt auf die ursprüngliche, in der Form von Gl. (II.A.35) abweichende Definition der Multifraktalität, die *Segment-Zähl-Methode* (*box counting method*) zurückführen lässt. Der Wavelet-Multifraktalanalyse ist der nächste Abschnitt gewidmet und der DFA-Multifraktalanalyse das nächste Kapitel.

Bei der klassischen Form der zweiten Definition der Multifraktalität betrachtet man das Skalenverhalten der so genannten verallgemeinerten *Zustandssumme* (*partition function*)  $Z_q(s)$ ,

$$Z_q(s) = \sum_{v=1}^{[N/s]} \left| F_{\text{FA},v}(s) \right|^q \sim s^{\tau(q)}, \quad (\text{II.A.36})$$

und die Skalenexponenten  $\tau(q)$  werden als Renyi-Exponenten bezeichnet (siehe z.B. [FEDER-88, PEITGENetal-92]). Es ist anzumerken, dass  $\tau(q)$  manchmal mit umgekehrtem Vorzeichen definiert wird. Ein Vergleich mit Gl. (II.A.35) ergibt

$$F_q(s) \sim \{s Z_q(s)\}^{1/q} \sim s^{[1+\tau(q)]/q} \Rightarrow h(q) = [1 + \tau(q)]/q, \quad \tau(q) = qh(q) - 1. \quad (\text{II.A.37})$$

Es besteht also eine Äquivalenz zwischen den verallgemeinerten Fluktuationsexponenten  $h(q)$  und den Renyi-Exponenten  $\tau(q)$ , falls  $\tau(0) = -1$ .  $\tau(0)$  ist immer die negative Dimension des Trägers, d.h. des Definitionsbereichs, der für eine Zeitreihe üblicherweise der (eindimensionale) Zeitstrahl ist. Manchmal wird anstelle von  $\tau(q)$  auch die „verallgemeinerte Dimension“  $D(q) \equiv \tau(q)/(q - 1)$  angegeben. Für „Zeitreihen“ mit fraktalem Träger, d.h. falls  $\tau(0) > -1$ , versagt der  $h(q)$ -Formalismus, Gl. (II.A.35), bzw. der Zusammenhang zwischen den beiden Formalismen, Gl. (II.A.37). Der Grund ist, dass dann nur über die Segmente  $v$  summiert werden darf, für die  $F_{\text{FA},v}(s) \neq 0$  ist, denn sonst divergieren alle negativen Momente. Dann ist die Anzahl der Segmente aber kleiner als  $[N/s]$ , so dass der Vorfaktor in Gl. (II.A.35) und der Faktor  $s$  in der geschweiften Klammer in Gl. (II.A.37) nicht mehr stimmen. Für normale Zeitreihen (mit eindimensionalem Träger) macht es mathematisch gesehen keinen Unterschied, ob man Gl. (II.A.35) oder Gl. (II.A.36) zur Untersuchung des Skalenverhaltens verwendet. Numerisch kann es bei der Bestimmung der Exponenten  $h(q)$  bzw.  $\tau(q)$  durch Anpassung von Geraden an die doppelt logarithmisch aufgetragenen Funktionen  $F_q(s)$  bzw.  $Z_q(s)$  aber Unterschiede, d.h. Abweichungen von Gl. (II.A.37) geben, weil die verschiedenen Skalenbereiche beim Anpassen unterschiedlich betont werden.

Anzumerken ist noch, dass in Gleichung (II.A.36) bei der Segment-Zähl-Methode meist anstelle von  $F_{\text{FA},v}(s)$  die so genannten *Segment-Wahrscheinlichkeit* (*box probability*)  $p(v,s)$  geschrieben wird, die gleich der Summe der Werte der ursprünglichen Zeitreihe  $x_i$  in dem Segment  $v$  der Breite  $s$  ist. Nach den Glgn. (II.A.13) und (II.A.14) sind  $F_{\text{FA},v}(s)$  und  $p(v,s)$  identisch,

$$F_{\text{FA},v}(s) = Y((v+1)s) - Y(vs) = \sum_{i=vs+1}^{(v+1)s} x_i = p(v,s). \quad (\text{II.A.38})$$

Die so genannte Segment-Wahrscheinlichkeit  $p(v,s)$  kann nur als echte Wahrscheinlichkeit interpretiert werden, wenn die gesamte Zeitreihe auf  $\sum x_i = 1$  normiert ist, wie es bei der *klassischen Multifraktalanalyse* üblich ist. Bei der Zeitreihenanalyse kann man auf diese Normierung auch verzichten, da sie nur den Vorfaktor betrifft und keinen Einfluss auf die Skalenexponenten hat; stattdessen ist hier eher eine Normierung durch  $\langle x_i \rangle = 0$  und  $\langle x_i^2 \rangle = 1$  üblich. Dann ist die Bezeichnung Segment-Wahrscheinlichkeit sinnlos; darum habe ich in Gl. (II.A.36)  $F_{\text{FA},v}(s)$  statt  $p(v,s)$  geschrieben.

### e) Zusammenhang der beiden multifraktalen Formalismen für Zeitreihen

Nachdem die Äquivalenz der Exponenten  $h(q)$  und  $\tau(q)$  gezeigt ist, muss nun noch eine Beziehung zur ersten Definition der Multifraktalität nach Gl. (II.A.34) durch das Singularitäts-Spektrum  $f(\alpha)$  hergestellt werden. Man kann zeigen (siehe z.B. [FEDER-88, PEITGEN-92, MUZYetal-93]), dass  $f(\alpha)$  die Legendre-Transformierte von  $\tau(q)$  ist.

Dazu muss man allerdings auch in Gl. (II.A.36) den Limes kleiner Skalen  $s$  betrachten. Für die Herstellung des Zusammenhangs wird die dortige Summe über  $v$  in ein Integral über  $\alpha$  umgeschrieben. Nach der ersten Multifraktalitäts-Definition (II.A.34) ist die lokale  $s$ -Abhängigkeit der Fluktuation  $F_{FA,v}(s) \sim s^\alpha$ . Die  $s$ -Abhängigkeit der Häufigkeit eines Hölder-Exponenten  $\alpha$  ist proportional zu  $s^{-f(\alpha)}$ , weil  $f(\alpha)$  die Dimension der durch  $\alpha$  charakterisierten Teilmenge ist. Damit folgt aus Gl. (II.A.36)

$$Z_q(s) = \sum_{v=1}^{[N/s]} |F_{FA,v}(s)|^q \sim \int s^{q\alpha} s^{-f(\alpha)} d\alpha \sim \int s^{q\alpha - f(\alpha)} d\alpha \sim s^{\tau(q)}. \quad (\text{II.A.39})$$

Für  $s \rightarrow 0$  wird das Integral von dem  $\alpha$ -Wert dominiert, für den der Exponent  $q\alpha - f(\alpha)$  minimal wird. Daher gilt

$$\tau(q) = \min_{\alpha} [q\alpha - f(\alpha)] \Rightarrow \frac{d(q\alpha)}{d\alpha} = q = \frac{df(\alpha)}{d\alpha} \quad (\text{II.A.40})$$

Für ein bestimmtes  $\alpha(q)$  – eben am Minimum – gilt gerade  $\tau(q) = q\alpha(q) - f(\alpha(q))$ . Für dieses  $\alpha(q)$  lässt sich eine direkte Beziehung zu  $\tau(q)$  herleiten:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dq} \tau(q) &= \frac{d}{dq} [q\alpha(q) - f(\alpha(q))] = \alpha(q) + q \frac{d\alpha(q)}{dq} - \frac{df(\alpha)}{d\alpha} \frac{d\alpha(q)}{dq} \\ &= \alpha(q) + q \frac{d\alpha(q)}{dq} - q \frac{d\alpha(q)}{dq} = \alpha(q) \end{aligned} \quad (\text{II.A.41})$$

nach Gl. (II.A.40). Damit ist gezeigt, dass  $f(\alpha)$  die Legendre-Transformierte von  $\tau(q)$  ist,

$$\alpha = \frac{d}{dq} \tau(q), \quad f(\alpha) = q\alpha - \tau(q). \quad (\text{II.A.42})$$

Dieser Zusammenhang ermöglicht es, aus den Renyi-Exponenten  $\tau(q)$  das Singularitäts-Spektrum  $f(\alpha)$  zu berechnen. Dazu muss zuerst  $\tau(q)$  für eng liegende Werte von  $q$  (z.B.  $\Delta q = 0.1$ ) berechnet und dann numerisch abgeleitet werden. Praktischer ist es, die numerischen Ergebnisse von  $\tau(q)$  durch Anpassung eines geeigneten Ansatzes zu beschreiben, und die Legendre-Transformation (II.A.42) dann mit diesem Ansatz analytisch durchzuführen. Es zeigt sich, dass die  $f(\alpha)$ -Spektren oft relativ gut durch eine umgekehrte Parabel approximiert werden können. Natürlich kann man bei der Legendre-Transformation auch von  $h(q) = [1 + \tau(q)]/q$  anstelle von  $\tau(q)$  ausgehen; dann wird Gl. (II.A.42) zu

$$\alpha = h(q) + q \frac{d}{dq} h(q), \quad f(\alpha) = q[\alpha - h(q)] + 1. \quad (\text{II.A.43})$$

An dieser Form erkennt man, dass  $\alpha = h(q)$  und  $f(\alpha) = 1$  gelten, wenn  $h(q)$  konstant ist, d.h. wenn die betrachteten Daten nicht multifraktal sind.

Weiterhin kann man durch eine umgekehrte Legendre-Transformation

$$q = \frac{d}{d\alpha} f(\alpha), \quad \tau(q) = q\alpha - f(\alpha) \quad (\text{II.A.44})$$

$\tau(q)$  (oder  $h(q)$ ) aus  $f(\alpha)$  berechnen, aber das wird nur für theoretische Überlegungen benötigt, z.B. für eine Herleitung geeigneter Ansätze für  $h(q)$ .

## f) Wavelet-Transformations-Modulo-Maxima (WTMM) Methode

Die WTMM-Methode zur multifraktalen Charakterisierung von Zeitreihen wurde seit Beginn der 90er Jahre von Arneodo, Bacry und Muzy entwickelt [MUZYetal-91, MUZYetal-93, MUZYetal-94, ARNEODOetal-95, ARNEODOetal-98b, ARNEODOetal-02]. Sie basiert auf dem eben eingeführten  $Z_q(s)$ - und  $\tau(q)$ -Formalismus zur Beschreibung der Multifraktalität. Die Fluktuationen werden mit Hilfe von Wavelet-Koeffizienten charakterisiert, ähnlich wie in Abschnitt II.A.3.a und II.A.3.b für die (nicht multifraktale) WAN beschrieben. Damit man auch negative Momente  $q$  betrachten kann, sind aber einige Erweiterungen nötig, denn die Wavelet-Koeffizienten an sich können zufällig beliebig klein werden, wenn sich positive und negative Anteile gerade wegheben. Dadurch würden dann die negativen Momente divergieren. Daher werden bei der WTMM-Methode nur die Maxima-Linien einer kontinuierlichen Wavelet-Transformierten berücksichtigt.

Im Gegensatz zu den anderen hier behandelten Methoden geht die WTMM meist nicht von der kumulierten Zeitreihe  $Y(j)$  aus, sondern direkt von der Zeitreihe  $x_i$ . Als erstes wird für alle betrachteten Skalen  $s$  und alle möglichen Positionen  $n$  innerhalb der Zeitreihe die kontinuierliche Wavelet-Transformation berechnet,

$$L_w[x](n, s) = \frac{1}{s} \sum_{k=1}^N x_k w[(k-n)/s]. \quad (\text{II.A.45})$$

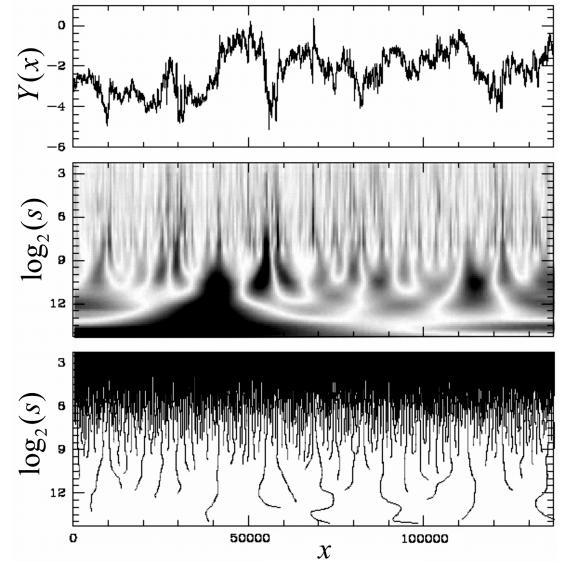
Das Wavelet  $w(k)$  wird orthogonal zu möglicherweise vorhandenen Trends gewählt, z.B. als Ableitung der Gauß-Kurve (siehe Abschnitt II.A.3.a). Abbildung II.A.11 zeigt beispielhaft eine Zeitreihe und ihre kontinuierliche Wavelet-Transformation in Graustufenkodierung. Jetzt werden anstelle von Mittelwerten über die  $q$ -ten Momente *aller* Koeffizienten einer Skala  $s$  nur die Momente der lokalen Maxima gemittelt. Wenn  $n_i$  diese lokalen Maxima markiert (Anzahl =  $I$ ), für die gilt

$$L_w[x](n_i - 1, s) < L_w[x](n_i, s) \geq L_w[x](n_i + 1, s), \quad (\text{II.A.46})$$

lautet die WTMM-Zustandssumme

$$Z_{\text{WTMM},q}(s) = \sum_{i=1}^I |L_w[x](n_i, s)|^q \sim s^{\tau(q)} \quad (s \gg 1), \quad (\text{II.A.47})$$

wobei  $\tau(q)$  wieder die Renyi-Exponenten sind, um deren Bestimmung (und ggf. Umrechnung in  $f(\alpha)$ ) es primär geht. Allerdings ist selbst diese Modulo-Maxima Prozedur noch nicht ausreichend, um ein monotones, gut analysierbares Skalenverhalten der von  $Z_{\text{WTMM},q}(s)$  sicherzustellen. Daher wird zusätzlich eine Supremum-Prozedur verwendet, bei der ein lokales Maximum  $L_w[x](n_i, s)$  durch ein benachbartes lokales Maximum auf einer kleineren Skala  $s' < s$  ersetzt wird, falls ein solches existiert. Dadurch wird die WTMM-Methode etwas schwierig zu implementieren, denn man muss nicht nur alle Koeffizienten der kontinuierlichen Wavelet-Transformation berechnen und die lokalen Maxima für feste Skalen  $s$  suchen, sondern auch noch die Maxima-Linien über alle Skalen verfolgen und ggf. einzelne Maxima ersetzen durch größere Maxima, die auf derselben Maxima-Linie schon auf einer niedrigeren Skala aufgetreten sind. Ein Beispiel für diese Maxima-Linien ist in Abb. II.A.11(c) gezeigt. Somit sind der Rechenaufwand und der Implementierungsaufwand für



**Abb. II.A.11:** Beispiel für die kontinuierliche Wavelet-Transformation (Mitte, Graustufenkodierung) einer Datenreihe (oben), sowie die daraus ermittelten Maxima-Linien (unten) (aus [ARNEODOetal-98a]).

die WTMM-Methode recht hoch. Daher beschreibe ich im nächsten Kapitel eine auf der DFA basierende Methode zur Multifraktalanalyse, die einfacher ist und – wie ich zeigen werde – äquivalente oder genauere Ergebnisse liefert.

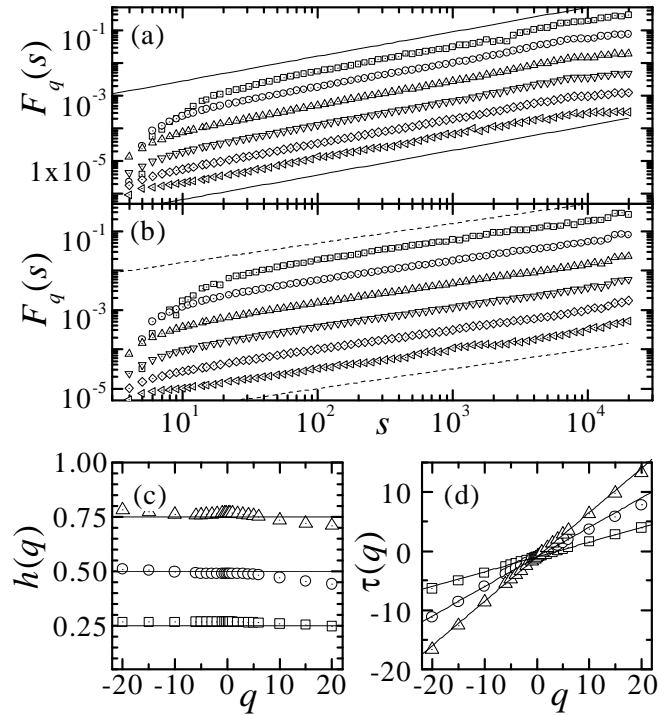
#### II.A.4. Multifraktale trendbereinigende Fluktuationsanalyse (MF-DFA)

Die multifraktale Verallgemeinerung der trendbereinigenden Fluktuationsanalyse (MF-DFA, [KANTELHARDTetal-02a]) basiert auf dem in Abschnitt II.A.3.d eingeführten  $F_q(s)$ - und  $h(q)$ -Formalismus zur multifraktalen Beschreibung, d.h. auf Gl. (II.A.35), wobei die Fluktuationen  $F_v(s)$  in den einzelnen Segmenten mit der Anpassungsprozedur der DFA $_n$  (siehe Abschnitt II.A.2) berechnet werden. Wie schon dort können auch hier verschiedene Ordnungen der angepassten Polynome verwendet werden, und dementsprechend unterscheidet man MF-DFA1, MF-DFA2, MF-DFA3, usw. Bei der MF-DFA $_n$  werden Polynome vom Grad  $n$  verwendet, was zu einer Beseitigung von Trends bis zur Ordnung  $n$  im Profil und bis zur Ordnung  $n - 1$  in den Daten führt. In diesem Kapitel wird die MF-DFA anhand von vier Beispielen gezeigt und später mit der WTMM-Methode verglichen.

##### a) 1. Beispiel: Monofraktale Daten

Als erstes teste ich die MF-DFA Methode an monofraktalen (d.h. nicht multifraktalen) Daten, für die  $h(q) = \alpha$  konstant sein sollte. Derartige Datenreihen lassen sich am einfachsten mit der in Abschnitt II.A.1.c erklärten Fourier-Filter-Methode erzeugen. Abbildung II.A.12 zeigt die MF-DFA2-Fluktuationsfunktionen  $F_{\text{DFA2},q}(s)$  für (a) langreichweitig korrelierte Daten ( $\alpha = 0.75$ ,  $\gamma = 0.5$ ) und (b) unkorrelierte Daten ( $\alpha = 0.5$ ), wobei jeweils die Resultate für 6 Werte von  $q$  verglichen sind. Man erkennt, dass für große Skalen  $s$  im doppelt logarithmischen Bild das Potenzgesetz-artige Skalenverhalten mit der erwarteten Steigung  $h(q) = \alpha$  vorliegt.

Unten in Abb. II.A.12 sind die numerisch im Skalenbereich  $200 < s < 5000$  bestimmten Steigungen  $h(q)$  sowie die daraus nach Gl. (II.A.37) folgenden Renyi-Exponenten  $\tau(q)$  gezeigt. Die leichte  $q$ -Abhängigkeit dieser Steigungen  $h(q)$  bzw. die leichte Nichtlinearität von  $\tau(q)$  bedeuten keineswegs, dass Multifraktalität vorliegt, sondern sie sind vielmehr auf die endliche Länge der betrachteten Reihen zurückzuführen (siehe auch [ZSCHIEGNER-02]). Ausführliche Tests ergeben, dass die systematischen (statistischen) Fehler von  $h(q)$  bei monofraktalen Reihen der Länge  $N = 2^{16}$  ( $= 65536$ ) etwa  $\Delta h(-10) = +0.02$  ( $\pm 0.02$ ) bzw.  $\Delta h(+10) = -0.01$  ( $\pm 0.03$ ) betragen, und für betragsmäßig kleine-

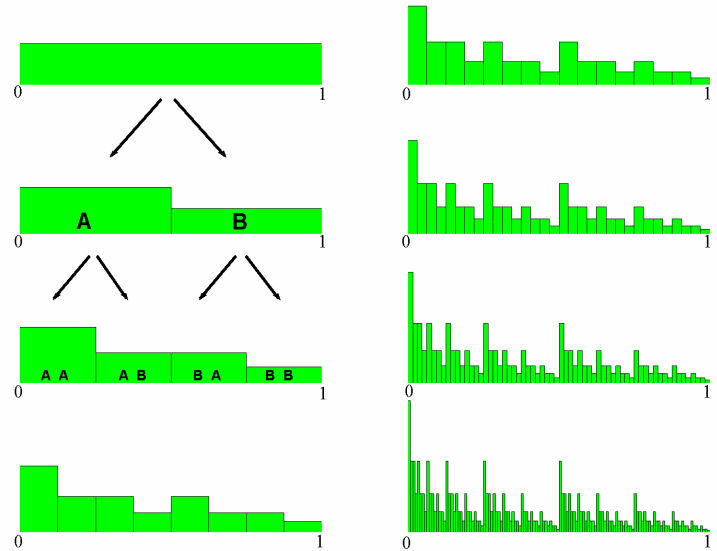


**Abb. II.A.12:** Multifraktale DFA 2. Ordnung (MF-DFA2) von 100 (a) langreichweitig korrelierten Datenreihen (mit  $\alpha = 0.75$ ,  $\gamma = 0.5$ ) und (b) unkorrelierten Datenreihen der Länge  $N = 65536$ . Die Fluktuationsfunktionen  $F_q(s)$  sind doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  aufgetragen für die Momente  $q = -10$  ( $\circ$ ),  $q = -2$  ( $\cdot$ ),  $q = -0.2$  ( $\triangle$ ),  $q = +0.2$  ( $\nabla$ ),  $q = +2$  ( $\diamond$ ) und  $q = +10$  ( $\triangleleft$ ); die Kurven sind um Faktoren 4 vertikal verschoben. Die gestrichelten Linien haben die erwarteten Steigungen, (a)  $\alpha = 0.75$  und (b)  $\alpha = 0.5$  (b). Die Teile (c) und (d) zeigen die im Bereich  $200 < s < 5000$  bestimmten Steigungen  $h(q)$  und das nach Gl. (II.A.37) daraus abgeleitete  $\tau(q)$  für  $\alpha = 0.25$  ( $\circ$ ),  $0.50$  ( $\cdot$ ) und  $0.75$  ( $\triangle$ ), wobei die Geraden den theoretischen Verlauf zeigen (nach [KANTELHARDTetal-02a]).



re Werte von  $q$  etwas geringer sind. Diese Werte gelten für  $h(q) < 1$ , d.h. für stationäre Reihen. Sie steigen bei Reihen der Länge  $N = 2^{13}$  ( $= 8192$ ) deutlich auf  $\Delta h(-10) = +0.05$  ( $\pm 0.04$ ) bzw.  $\Delta h(+10) = -0.02$  ( $\pm 0.04$ ). Dabei ist zu beachten, dass  $h(q)$  besonders bei kurzen Reihen für negative  $q$  systematisch eher zu groß herauskommt, während die numerischen Werte für positive  $q$  tendenziell eher zu klein ausfallen. Es ist also bei der Interpretation der Ergebnisse auf jeden Fall zu berücksichtigen, dass eine  $h(q)$ -Abhängigkeit in dieser – mit der Reihenlänge zusammenhängenden – Größenordnung nicht als ein Indiz für

Multifraktalität interpretiert werden darf. Um bei der Interpretation sicher zu gehen, ist oft ein Vergleich mit einer MF-DFA Untersuchung gleich langer monofraktaler Datenreihen angebracht. Weiterhin erkennt man in Abb. II.A.12 deutlich, dass die systematischen Abweichungen der MF-DFA-Fluktuationsfunktionen vom idealen Skalenverhalten bei kleinen  $s$ , die oben schon für die normale DFA ( $q = 2$ ) diskutiert wurden, für kleinere Werte von  $q$  stärker werden. Daher muss insbesondere bei der Analyse von kurzen Zeitreihen der Skalenbereich, in dem man die Steigung der Kurven bestimmt, für kleine  $q$  beschnitten werden. Ein solcher  $q$ -abhängiger Anpassungsbereich erfordert besondere Umsicht bei der Bestimmung der Steigungen  $h(q)$ , die dann oft besser von Hand als durch eine automatische Routine vorgenommen werden kann.



**Abb. II.A.13:** Generation des geordneten binomialen Multifraktals; 0. bis 7. Iteration (aus [ZSCHIEGNER-02]).

## b) 2. Beispiel: Binomiales Multifraktal und seine Verallgemeinerung

Als einfaches Beispiel für eine wirklich multifraktale Datenreihe bietet sich das *binomial multiplicative Multifraktal* an (siehe z.B. [FEDER-88, KANTELHARDTetal-02a]). Bei der Erzeugung (siehe Abb. II.A.13) geht man zunächst von einer konstanten Reihe aus. In der ersten Iteration wird die linke Hälfte mit dem Parameter  $a$  und die rechte mit  $b = 1 - a$  multipliziert. Im zweiten Schritt werden beide Hälften wiederum halbiert, und diese Teile mit den gleichen Faktoren  $a$  und  $b$  multipliziert. Alle folgenden Iterationen laufen nach dem gleichen Schema ab: Zuerst wird jedes Unterintervall halbiert, dann wird die linke Hälfte davon mit  $a$  und die rechte mit  $b$  multipliziert. Um ein stochastisches Multifraktal mit den gleichen Skaleneigenschaften zu erhalten kann man auch bei jeder Intervall-Halbierung zufällig entweder die linke Seite mit  $a$  und die rechte mit  $b$  multiplizieren oder umgekehrt. Nach  $n$  Iterationen ist die Prozedur bei einer Reihe der Länge  $N = 2^n$  beendet. Die Werte der Datenreihe lassen sich dann kurz schreiben als

$$x_i = a^{n-QS(i)} b^{QS(i)} \quad (\text{II.A.48})$$

wobei  $QS(i)$  die binäre Quersumme von  $i$  ist, d.h. die Anzahl der Einsen in der binären Repräsentation von  $i$  bezeichnet, z.B.  $QS(13) = 3$ , weil die Binärdarstellung von 13, 1101, drei Einsen enthält. Bei der Berechnung der verallgemeinerten Zustandssumme (II.A.36) für das binomiale Multifraktal nutzt man aus, dass bei Betrachtung der Skala  $s = 2^m$  der Generationsprozess einfach auf  $k = n - m$  Stufen reduziert werden kann und dann  $F_{FA,v}(s) = p(v,s) = a^{k-QS(v)} b^{QS(v)}$  gilt, sowie dass die Häufigkeit der Segmente  $v$  mit gleichem Wert  $p(v,s)$  gerade durch den Binomialkoeffizienten  $k$  über  $j = QS(v)$  gegeben ist. Daraus folgt

$$Z_q(s) = \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} a^{(k-j)q} b^{jq} = (a^q + b^q)^k \sim s^{\tau(q)} \sim 2^{-k\tau(q)} \quad (\text{II.A.49})$$

da  $s = 2^m = 2^{n-k} \sim 2^{-k}$ . Hier kommt es auf die Reihenfolge der Segmente nicht an, so dass die Herleitung gleichermaßen für das deterministische und das stochastische binomiale Multifraktal gilt. Um die Renyi-Exponenten  $\tau(q)$  zu bestimmen, muss Gl. (II.A.49) logarithmiert werden,

$$\tau(q) = \frac{k \log(a^q + b^q)}{-k \log 2} = -\log_2(a^q + b^q), \quad (\text{II.A.50})$$

was sich mit Gl. (II.A.37) leicht auf  $h(q)$  umschreiben lässt,

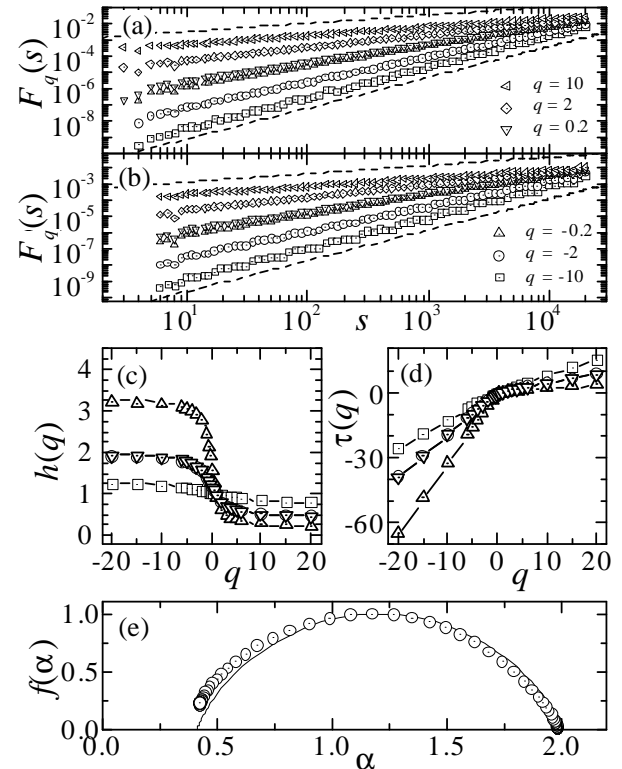
$$h(q) = [1 - \log_2(a^q + b^q)]/q, \quad (\text{II.A.51})$$

und wobei immer noch  $b = 1 - a$  gelten muss.

Abbildung II.A.14 zeigt die Ergebnisse der MF-DFA1 und der MF-DFA4 für das binomiale Multifraktalmodell. Man erkennt deutlich, dass die Steigung der Kurven jetzt von  $q$  abhängt und dass die numerisch bestimmten Verläufe von  $h(q)$  und  $\tau(q)$  für verschiedene Werte des Parameters  $a$  gut mit den theoretischen Kurven nach Gl. (II.A.51) bzw. (II.A.50) übereinstimmen. Wie die ausführliche Untersuchung [KANTELHARDTetal-02a] zeigt, liegen die systematischen und statistischen Fehler der numerisch bestimmten  $h(q)$ -Werte in einer ähnlichen Größenordnung wie bei monofraktalen Reihen.

Weiterhin zeigt Abbildung II.A.14 für ein Beispiel das Singularitätsspektrum  $f(\alpha)$ , das mittels Gl. (II.A.43) aus dem numerischen  $h(q)$  sowie zum Vergleich aus der theoretischen Kurve (II.A.51) abgeleitet wurde. Man erkennt deutlich den typischen, ungefähr parabelförmigen Verlauf. Bei einem relativ glatten Verlauf der  $h(q)$ -Kurve und der  $f(\alpha)$ -Kurve funktioniert die Bestimmung der multifraktalen Eigenschaften mittels MF-DFA also recht zuverlässig. Auch schon für nicht so lange Datensätze ( $N \approx 10.000$ ) ist die Übereinstimmung zwischen theoretischer Kurve und numerischem Ergebnis befriedigend (siehe auch Abschnitt II.A.4.f).

Die beiden Parameter  $a$  und  $b$  in den Glgn. (II.A.50) und (II.A.51) sind wie gesagt nicht unabhängig. Der Grund ist, dass der  $Z_q(s)$ - und  $p(v,s)$ -Formalismus für die Herleitung verwendet wurde, für den die Reihe auf  $\sum x_i = 1$  normiert zu sein hat. Für  $b \neq 1 - a$  muss daher in Gl. (II.A.49) zusätzlich durch den Normierungsfaktor  $(a + b)^{qk}$  dividiert werden, so dass die Glgn. (II.A.50) und (II.A.51) zu



**Abb. II.A.14:** Multifraktale DFA (a) 1. Ordnung und (b) 4. Ordnung von 100 Datenreihen des binomialen Multifraktalmodells (mit  $a = 0.75$ ) der Länge  $N = 65536$ . Die Fluktuationsfunktionen  $F_q(s)$  sind doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  aufgetragen für die Momente  $q = -10$  ( $\circ$ ),  $q = -2$  ( $\cdot$ ),  $q = -0.2$  ( $\triangle$ ),  $q = +0.2$  ( $\nabla$ ),  $q = +2$  ( $\diamond$ ) und  $q = +10$  ( $\triangleleft$ ). Die gestrichelten Linien haben die erwarteten Steigungen für  $q = \pm 10$  aus Gl. (II.A.51). Die Teile (c) und (d) zeigen die im Bereich  $50 < s < 500$  bestimmten Steigungen  $h(q)$  und das daraus abgeleitete  $\tau(q)$  für  $a = 0.6$  ( $\square$ , MF-DFA1),  $0.75$  ( $\circ$ , MF-DFA1;  $\nabla$ , MF-DFA4) und  $0.9$  ( $\triangle$ , MF-DFA1), wobei die durchgezogenen Linien den theoretischen Verlauf zeigen. Teil (e) vergleicht für  $a = 0.75$  das durch numerische Legendre-Transformation ermittelte Singularitätsspektrum  $f(\alpha)$  mit der aus Gl. (II.A.50) direkt berechneten theoretischen Kurve (nach [KANTELHARDTetal-02a]).

$$\tau(q) = -\log_2 \frac{(a^q + b^q)}{(a+b)^q} \quad \text{bzw.} \quad h(q) = \frac{1}{q} - \frac{1}{q} \log_2(a^q + b^q) + \log_2(a+b) \quad (\text{II.A.52})$$

werden. Wenn man den Zusatzterm  $\log_2(a+b)$  in  $h(q)$  trotz unabhängiger Parameter  $a$  und  $b$  vermeiden will, muss das binomiale Multifraktal verallgemeinert werden. Dies geht am einfachsten durch eine Hintereinandersetzung des binomialen Multifraktalgenerators und der Fourier-Filter-Methode [KOSCIELNY-BUNDE*etal*-04]. Dabei wird zunächst ein binomiales Multifraktal erzeugt, dessen  $h(q)$  der Gl. (II.A.52) entspricht. Anschließend wird der störende konstante Zusatzterm  $\log_2(a+b)$  beseitigt, indem die Reihe mittels schneller Fourier-Transformation in den Frequenzbereich überführt wird und die Fourier-Koeffizienten mit  $f^{-\Delta\beta/2}$  multipliziert werden, wobei  $\Delta\beta/2 = \Delta\alpha = -\log_2(a+b)$ . Die abschließende Fourier-Rücktransformation liefert dann eine Datenreihe, deren Multifraktalität durch die Glgn. (II.A.50) und (II.A.51) mit den unabhängig gewählten Parametern  $a$  und  $b$  beschrieben wird. Es bleibt anzumerken, dass man mit der Fourier-Filter-Methode allein keine Multifraktale generieren kann, weil sich  $h(q)$  damit nur um Konstanten verändern lässt.

### c) 3. Beispiel: Bifraktales Modell

Das Singularitätsspektrum eines so genannten Bifraktals besteht nur aus zwei Punkten  $\alpha_1, \alpha_2$ , für die ohne Beschränkung der Allgemeinheit gilt  $f(\alpha_1) = 1, f(\alpha_2) \leq 1$  und  $f(\alpha) = 0$  sonst. Dementsprechend hat die  $\tau(q)$ -Kurve nach Gl. (II.A.42) genau diese beiden Steigungen. Nach Gl. (II.A.44) gilt

$$\tau(q) = \begin{cases} q\alpha_1 - 1, & q > q_x \\ q\alpha_2 - f(\alpha_2), & q < q_x \end{cases} \quad \text{oder} \quad \tau(q) = \begin{cases} q\alpha_2 - f(\alpha_2), & q > q_x \\ q\alpha_1 - 1, & q < q_x \end{cases}. \quad (\text{II.A.53})$$

Der Knick zwischen den beiden Bereichen erfolgt an einer Stelle  $q_x$ , die sich aus der Stetigkeitsbedingung bei  $q_x$  berechnen lässt,

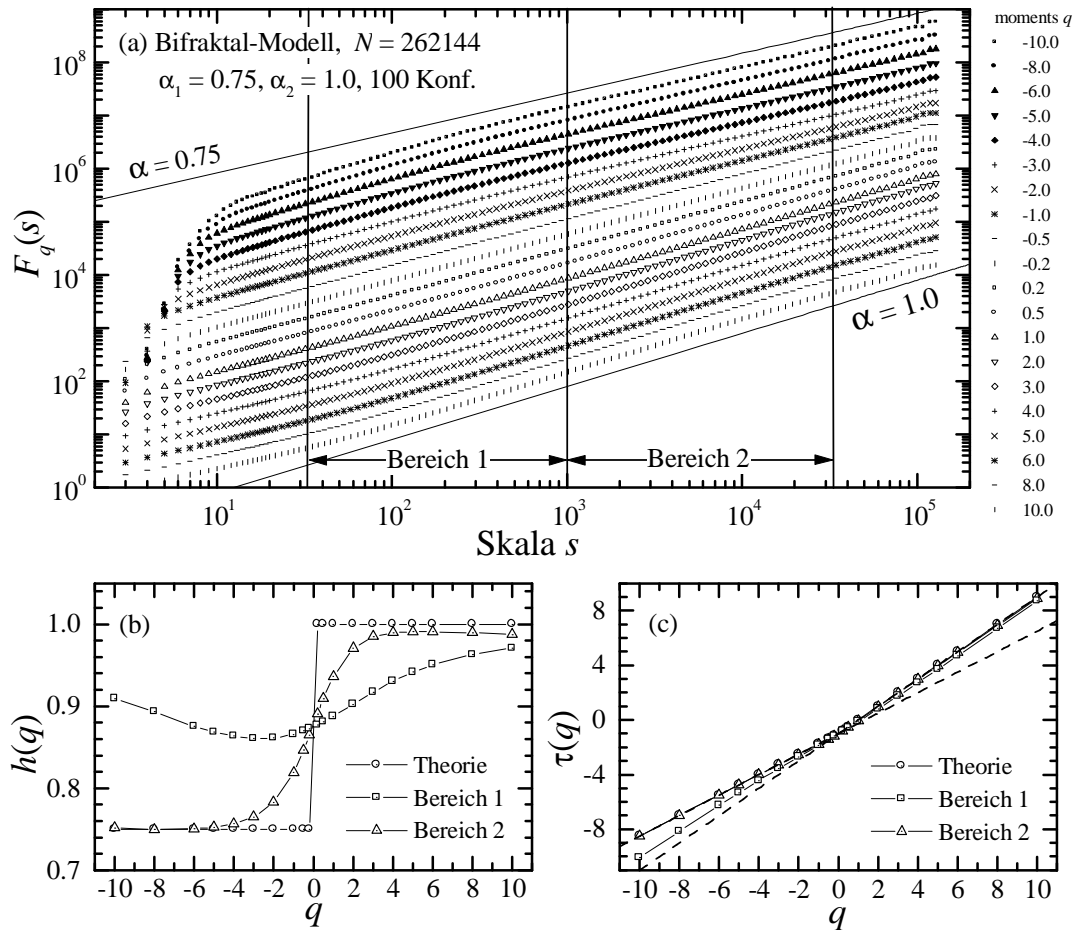
$$q_x = \frac{1 - f(\alpha_2)}{\alpha_1 - \alpha_2}. \quad (\text{II.A.54})$$

Damit hat das Bifraktal-Modell – neben der Auswahl zwischen den beiden Formen von Gl. (II.A.53) – drei anzupassende Parameter:  $\alpha_1, \alpha_2$  und  $q_x$ , oder – nach Gl. (II.A.54) äquivalent –  $f(\alpha_2)$  anstelle von  $q_x$ . Für Datenreihen mit kompaktem Träger,  $\tau(0) = -1$ , kann auch der  $h(q)$ -Formalismus angewendet werden, für den nach Glgn. (II.A.53) und (II.A.37) gilt

$$h(q) = \begin{cases} \alpha_1, & q > q_x \\ \alpha_2 + \frac{q_x}{q}(\alpha_1 - \alpha_2), & q < q_x \end{cases} \quad \text{oder} \quad h(q) = \begin{cases} \alpha_2 + \frac{q_x}{q}(\alpha_1 - \alpha_2), & q > q_x \\ \alpha_1, & q < q_x \end{cases} \quad (\text{II.A.55})$$

Man erkennt, dass  $h(q)$  – außer im Fall  $f(\alpha_2) = 1$  – entweder für große oder für kleine  $q$  einen hyperbolischen Verlauf aufweist.

Ein Bifraktal mit  $f(\alpha_1) = f(\alpha_2) = 1$  erhält man am einfachsten, indem man die Datenreihe aus zwei langen Abschnitten zusammensetzt, die durch unterschiedliche Fluktuationsexponenten  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  charakterisiert werden. In diesem Fall ist der (theoretische) Knick nach Gl. (II.A.54) immer bei  $q_x = 0$ . Abbildung II.A.15 zeigt die Ergebnisse der MF-DFA2 für ein solches Beispiel. Man erkennt, dass die Analyse mit diesem Bifraktal durchaus Probleme hat, weil weder  $f(\alpha)$  noch  $h(q)$  hier stetig sind. Es treten Systemgrößen-Effekte auf, und  $h(q)$  erscheint vor allem wesentlich stetiger als es sein sollte. Zum Vergleich sind in Abb. II.A.15(b) die Ergebnisse für zwei verschiedene Anpassungsbereiche gezeigt; die Ergebnisse für die langen Zeitskalen sind näher an dem theoretischen, sprunghaften Verlauf, aber trotzdem noch deutlich zu glatt. Bei der Umrechnung in  $f(\alpha)$  hat der stetigere Verlauf von  $h(q)$  ein breites Singularitätsspektrum zur Folge, und man kann das ursprüngliche bifraktale Verhalten nicht erkennen. Dieses Problem tritt nicht nur bei der MF-DFA auf, sondern auch bei den anderen „globalen“ Methoden, die auf dem  $h(q)$ - oder dem  $\tau(q)$ -Formalismus basieren. Allerdings sieht man die Abweichungen vom theoretischen Verlauf bei der Betrachtung



**Abb. II.A.15:** Analyse von 100 Datenreihen, die aus zwei aneinander gehängten (monofraktalen) Reihen der Längen  $N = 524288$  bestehen mit Fluktuationsexponenten  $\alpha_1 = 0.75$  und  $\alpha_2 = 1.0$ . Teil (a) zeigt die MF-DFA2 Fluktuationsfunktionen  $F_q(s)$  für 20 Werte von  $q$  (siehe rechts). Die in den beiden markierten Bereichen bestimmten verallgemeinerten Fluktuationsexponenten  $h(q)$  und die daraus berechneten Renyi-Exponenten  $\tau(q)$  werden in (b) und (c) mit dem theoretischen Verlauf verglichen, der eine Stufe bzw. einen Knick bei  $q_x = 0$  aufweist und sonst – wie für Bifraktale zu erwarten – linear ist. Man erkennt, dass die Verläufe deutlich zu glatt sind, und dass insbesondere auf kürzeren Skalen (und darum auch für kurze Reihen) deutliche Abweichungen vom erwarteten Verlauf auftreten. Darum ist es bei der Multifraktalanalyse sehr sinnvoll, die Daten vorher in homogene Bereiche aufzuspalten.

von  $\tau(q)$  weniger als bei der Betrachtung von  $h(q)$ , vgl. Abb. II.A.15(b) und (c). Bei nicht-stetigen multifraktalen Spektren, die insbesondere bei zusammengesetzten Datenreihen wie in diesem Beispiel zu erwarten sind, braucht man also deutlich mehr Daten, um die Multifraktalität einigermaßen zuverlässig charakterisieren zu können.

Eine Möglichkeit, dieses Problem zu umgehen, besteht darin, die Datenreihe vor der Analyse in unterschiedliche Segmente aufzuteilen. Analysiert man Segmente mit unterschiedlichem Verhalten getrennt, so ist die Charakterisierung trotz der kürzeren Teile besser möglich. Ein Vergleich der Ergebnisse für die verschiedenen Segmente kann dann hinterher anzeigen, ob die Aufteilung nötig war. Aus diesem Grund ist z.B. bei der Analyse von 24-Stunden Herzschlagdaten eine Aufteilung von Tag und Nacht, sowie weiter am Tag in Ruhe- und Trainingszeiten und in der Nacht in die verschiedenen Schlafstadien sehr sinnvoll [BUNDE*etal*-00, KARASIK*etal*-02], und eine Multifraktalanalyse der 24-Stunden Daten als ganzes [IVANOV*etal*-99] nicht so aussagekräftig.

#### d) 4. Beispiel: Multifraktalität durch breite Verteilung

Eine andere Möglichkeit, eine bifraktale Datenreihe zu erzeugen, baut nicht auf langreichweitigen Korrelationen in den Zahlen auf, sondern auf einer breiten Verteilung der (unkorrelierten) Einzel-

werte. Bezeichnet man die Verteilung der Werte  $x_i$  in der Datenreihe mit  $P(x)$ , so wird die Multifraktalität der Reihe nur dann nicht von  $P(x)$  beeinflusst, wenn

$$\langle |x|^q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x|^q P(x) dx < \infty \quad (\text{II.A.56})$$

für alle Momente  $q$ . Dies ist z.B. für die Gaußverteilung der Fall. Wählt man aber eine Potenzgesetz-Verteilung,

$$P(x) = \delta x^{-(\delta+1)} \text{ mit } \delta > 0 \quad (\text{II.A.57})$$

und dem Wertebereich  $1 \leq x < \infty$ , d.h.  $P(x) = 0$  für  $x < 1$ , dann divergiert schon das zweite Moment, wenn  $\delta \leq 2$ . Daher kann man hier nur Datenreihen mit *endlicher* Länge  $N$  betrachten. Man beachte, dass Gl. (II.A.57) für große  $x$  einer Levy-Verteilung der Klasse  $\delta$  entspricht [SHLESINGERetal-87, HAVLIN&BENAVRAHAM-00]; die multifraktalen Eigenschaften solcher Verteilungen wurden auch in [JAFFARD-99, NAKAO-00, SCAFFETTA&GRIGOLINI-02] untersucht.

Um das multifraktale Spektrum einer entsprechend Gl. (II.A.57) verteilten Zahlenreihe analytisch zu bestimmen, beginnt man am besten mit unkorrelierten, im Intervall  $[0,1]$  gleichverteilten Zahlen  $r_i$ . Der typische Wert des Minimums von  $s$  Zahlen ist

$$r_{\min}(s) \equiv \min_{i=1}^s r_i \approx \frac{1}{s} \quad (\text{II.A.58})$$

Man kann leicht zeigen, dass sich die Zahlen  $r_i$  durch die Transformation  $r_i \rightarrow x_i = r_i^{-1/\delta}$  in Zahlen  $x_i$  überführen lassen, die der Verteilung (II.A.57) genügen. Der typische Wert des Maximums von  $s$  Zahlen  $x_i$  ist daher nach Gl. (II.A.58) gegeben durch

$$x_{\max}(s) \equiv \max_{i=1}^s x_i = [r_{\min}(s)]^{-1/\delta} \approx s^{1/\delta} \quad (\text{II.A.59})$$

Wenn  $\delta \leq 2$  ist, werden die Fluktuationen des Profils  $Y(j)$  und die Varianz  $F_v(s)$  im Segment  $v$  dominiert durch das Quadrat von  $x_{\max}(s)$ , denn das zweite Moment der Verteilung (II.A.57) divergiert. Die gesamte Datenreihe besteht aber aus  $[N/s]$  Segmenten der Länge  $s$ , nicht nur aus einem Segment. Für einige Segmente  $v$  ist  $F_v(s)$  größer als sein typischer Wert  $x_{\max}(s) \approx s^{1/\delta}$ , da das Maximum der gesamten Reihe nach Gl. (II.A.59) etwa  $x_{\max}(N) \approx N^{1/\delta}$  beträgt.

Um nun den Mittelwert  $F_q(s)$  über alle Segmente nach Gl. (II.A.35) zu berechnen, muss die gesamte Verteilung  $P_s(y)$  der Werte  $y \equiv [F_v^2(s)]^{1/2}$  berücksichtigt werden. Da jedes Maximum in den  $[N/s]$  Segmenten einer tatsächlichen Zahl  $x_i$  entspricht und diese nach Gl. (II.A.57) verteilt sind, ist klar, dass die Verteilung der Maxima für große  $y$  dieselbe Form hat,  $P_s(y) \sim P(x = y)$ . Kleine  $y$  kommen zwar nicht vor, weil nur Maxima betrachtet werden, aber große  $x_i$  sind mit hoher Wahrscheinlichkeit identisch mit den Maxima der entsprechenden Segmente. Da die kleinsten Maxima in Segmenten der Länge  $s$  von der Größenordnung  $x_{\max}(s) \approx s^{1/\delta}$  sind (nach Gl. (II.A.59)), sollte auch das untere Ende der Verteilung  $P_s(y)$  proportional zu  $s^{1/\delta}$  sein. Aus der Normierungsbedingung

$$\int_{As^{1/\delta}}^{\infty} P_s(y) dy = 1 \text{ erhält man } P_s(y) = A^\delta \delta s y^{-(\delta+1)} \quad (\text{II.A.60})$$

mit dem unwichtigen Vorfaktor  $A < 1$ . Jetzt kann  $F_q(s)$  abgeschätzt werden durch Integration über  $y \equiv [F_v^2(s)]^{1/2}$  vom Minimum  $As^{1/\delta}$  zum Maximum  $N^{1/\delta}$ . Für  $s \gg N$  erhält man

$$F_q(s) \sim \left[ \int_{As^{1/\delta}}^{N^{1/\delta}} y^q P_s(y) dy \right]^{1/q} \sim \left| A^\delta s N^{q/\delta-1} - A^q s^{q/\delta} \right|^{1/q} \sim \begin{cases} s^{1/q} & (q > \delta) \\ s^{1/\delta} & (q < \delta) \end{cases} \quad (\text{II.A.61})$$

Ein Vergleich von Gl. (II.A.61) mit Gl. (II.A.35) ergibt schließlich den Verlauf von  $h(q)$ ,

$$h(q) \sim \begin{cases} 1/q & (q > \delta) \\ 1/\delta & (q \leq \delta) \end{cases} \quad (\text{II.A.62})$$

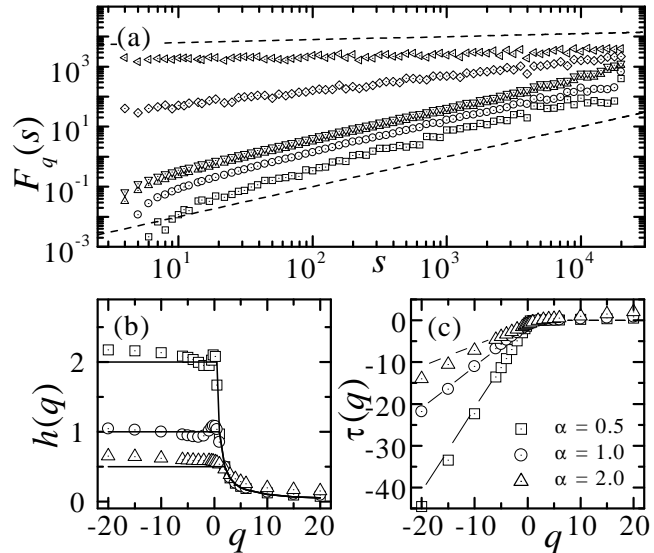
Man beachte, dass  $\tau(q) = qh(q) - 1$  damit für  $q > \delta$  gleich 0 ist, während es für  $q < \delta$  eine lineare  $q$ -Abhängigkeit aufweist. Daher ist auch dieses Beispiel ein Bifraktal, denn es kommen in  $\tau(q)$  nur zwei Steigungen vor [NAKAO-00]. Da nach Gl. (II.A.62) für alle  $\delta$  stets  $h(2) = 1/2$  gilt, lässt sich mit der Standard-DFA kein Hinweis auf die Bifraktalität dieser Daten finden; das zweite Moment zeigt nur die unkorrelierte Anordnung der Zahlen. In [SCAFETTA&GRIGOLINI-02] wurde dieses Verhalten als Versagen der DFA und entsprechender nicht-trendbereinigender Methoden gewertet und eine alternative Methode vorgeschlagen, die direkt den Exponenten  $1/\delta$  liefert. Eine multifraktale Beschreibung mit  $h(2) = 1/2$  als Indiz für die unkorrelierte Anordnung und  $h(q) = 1/\delta$  für negative  $q$  erscheint mir als wesentlich vollständigere Beschreibung; keine Methode, die nur einen Exponenten liefert, ist für das Bifraktal ausreichend.

Abbildung II.A.16(a) zeigt die MF-DFA3 Fluktuationsfunktion für unkorrelierte Zufallszahlen, die nach Gl. (II.A.57) verteilt sind mit  $\delta = 1$ . Da die Exponenten  $h(q)$  asymptotisch für große  $q$  nach Gl. (II.A.62) der 0 sehr nahe kommen, muss die modifizierte MF-DFA-Methode verwendet werden,

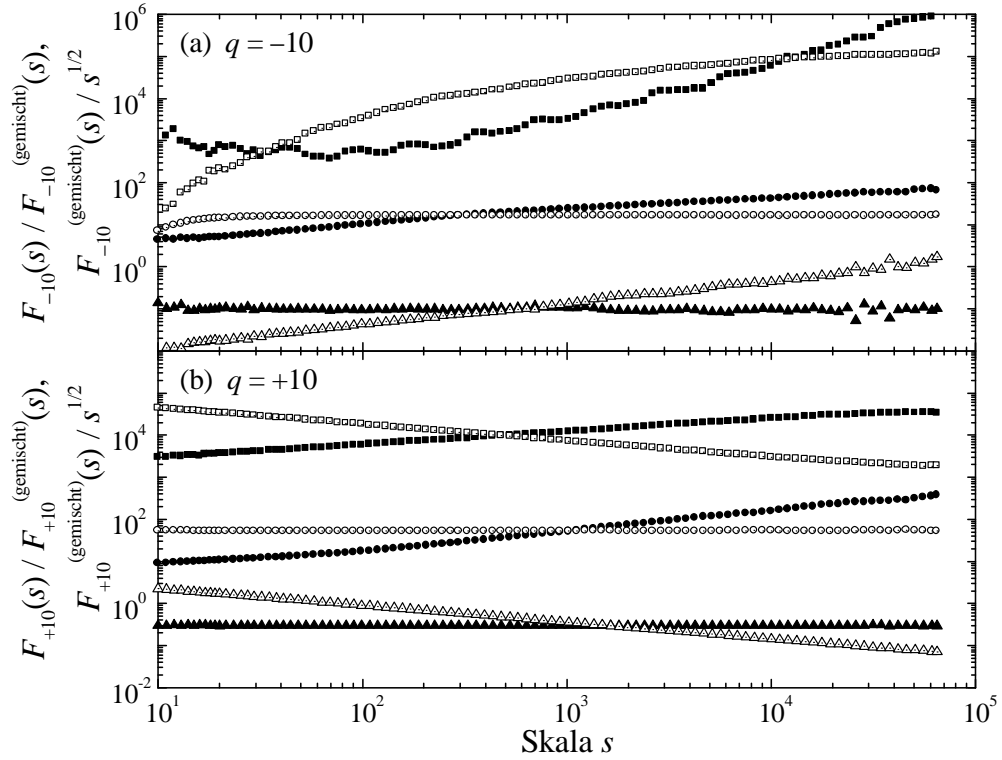
bei der die Datenreihe zweimal (statt sonst nur einmal wie in Gl. (II.A.13)) kumuliert wird (siehe auch Abschnitt II.A.2.e). Dadurch ist die Steigung der Fluktuationsfunktionen um 1 höher, aber wenn  $F_q(s)/s$  statt  $F_q(s)$  aufgetragen wird, ist der Unterschied voll kompensiert und auch kleine  $h(q)$  können gut bestimmt werden. Abbildung II.A.16(b) vergleicht die numerischen Steigungen  $h(q)$  für  $\delta = 0.5, 1.0$  und  $2.0$  mit dem theoretischen Ergebnis (II.A.62); eine gute Übereinstimmung ist erkennbar. Das beweist auch, dass die Probleme beim vorhergehenden Beispiel nicht auf den bifraktalen Charakter der Daten an sich zurückzuführen sind, sondern auf die zusammengesetzte Struktur der betrachteten bifraktalen Reihe.

### e) Korrelations- und Verteilungs-Multifraktalität

Obwohl die beiden letzten Beispiele Bifraktale sind, unterschieden sie sich doch deutlich darin, dass im 3. Beispiel die Ursache für die  $h(q)$ -Abhängigkeit allein langreichweitige Korrelationen sind, während im 4. Beispiel allein die breite (Potenzgesetz-artige) Verteilung der unkorrelierten Zahlen dafür verantwortlich ist. Generell lassen sich (i) Korrelations-Multifraktalität und (ii) Verteilungs-Multifraktalität unterscheiden. Es können auch beide Arten von Multifraktalität gleichzeitig in einer Datenreihe existieren, wie es beim 2. Beispiel für große Werte des Parameters  $a \approx 1$  der Fall ist. Bei der *Korrelations-Multifraktalität* ist die  $h(q)$ -Abhängigkeit in einem unterschiedlichen Korrelationsverhalten der kleinen und der großen Fluktuationen der Werte  $x_i$  begründet, die jeweils für negative bzw. positive Werte von  $q$  getrennt untersucht werden. Bei der *Verteilungs-Multifraktalität*



**Abb. II.A.16:** Multifraktale DFA 3. Ordnung (MF-DFA3) von 100 unkorrelierten Datenreihen mit breiter, Potenzgesetz-artiger Verteilung der Werte nach Gl. (II.A.57) mit  $\delta = 1$  und der Länge  $N = 65536$ . Die aus doppelt kumulierten Daten berechneten und zum Ausgleich wieder durch  $s$  dividierten Fluktuationsfunktionen  $F_q(s)/s$  sind doppelt logarithmisch gegen  $s$  aufgetragen für die Momente  $q = -10$  ( $\square$ ),  $q = -2$  ( $\circ$ ),  $q = -0.2$  ( $\triangle$ ),  $q = +0.2$  ( $\nabla$ ),  $q = +2$  ( $\diamond$ ) und  $q = +10$  ( $\triangleleft$ ). Die gestrichelten Linien haben die erwarteten Steigungen,  $h(-10) = 1$  und  $h(+10) = 0.1$ . Die Teile (b) und (c) zeigen die für große Skalen  $s$  bestimmten Steigungen  $h(q)$  und das nach Gl. (II.A.37) daraus abgeleitete  $\tau(q)$  für  $\delta$  (nicht  $\alpha$ ) = 0.5 ( $\square$ ), 1.0 ( $\circ$ ) und 2.0 ( $\triangle$ ), wobei die durchgezogenen Linien den theoretischen Verlauf zeigen (nach [KANTELHARDTetal-02a]).



**Abb. II.A.17:** Vergleich der MF-DFA Quotienten  $F_q(s)/F_q^{(\text{gemischt})}(s)$  (ausgefüllte Symbole) und  $F_q^{(\text{gemischt})}(s)/s^{0.5}$  (offene Symbole) für drei multi- bzw. bifraktale Modelle, 1. binomiales Multifraktalmodell mit  $a = 0.8$  (■), 2. zusammengesetzte Reihe mit  $\alpha_1 = 0.75$  im ersten und  $\alpha_2 = 1.0$  im zweiten Teil (●), 3. unkorrelierte Daten mit breiter Potenzgesetz-Verteilung mit  $\delta = 1.0$  (▲); siehe Abschnitte II.A.4.b-d für eine Beschreibung der Modelle; für (a)  $q = -10$  und (b)  $q = +10$ . Der horizontale Verlauf von  $F_q^{(\text{gemischt})}(s)/s^{0.5}$  im 2. Modell bzw. von  $F_q(s)/F_q^{(\text{gemischt})}(s)$  im 3. Modell zeigt an, dass keine Verteilungs- bzw. keine Korrelations-Multifraktalität vorliegt. Beim 1. Modell sind wegen des relativ großen Werts von  $a$  beide Multifraktalitätsarten vorhanden; die Stärke variiert in Abhängigkeit von der Skala  $s$ . Die Rechnungen beruhen auf je 100 Datensätzen der Länge  $2^{18} = 262144$ .

ist die  $h(q)$ -Abhängigkeit hingegen in der breiten Verteilung der Werte  $x_i$  der Zeitreihe begründet; auf Korrelationen kommt es dabei nicht an. Um die beiden Multifraktalitätsarten zu unterscheiden, vergleicht man am besten die MF-DFA Fluktuationsfunktionen  $F_q(s)$  der Originaldaten mit den MF-DFA Fluktuationsfunktionen  $F_q^{(\text{gemischt})}(s)$  zufällig gemischter Daten. Eine ähnliche Prozedur wurde in Abschnitt II.A.2.b zur Korrektur der systematischen Abweichungen der Standard-DFA auf kurzen Zeitskalen vorgeschlagen; hier geht es aber um die langen Zeitskalen. Wenn die Multifraktalität durch Korrelationen verursacht ist, wird sie durch das Mischen beseitigt. Darum ist  $F_q^{(\text{gemischt})}(s) \sim s^{0.5}$ , also  $h(q) = 0.5$  für alle  $q$  bei Korrelations-Multifraktalität. Anders ist die Lage bei Verteilungs-Multifraktalität, denn an der Verteilung der Werte  $x_i$  der Zeitreihe ändert sich durch das Mischen nichts, so dass  $F_q^{(\text{gemischt})}(s) = F_q(s) \sim s^{h(q)}$ , d.h.  $h(q)$  ist unverändert.

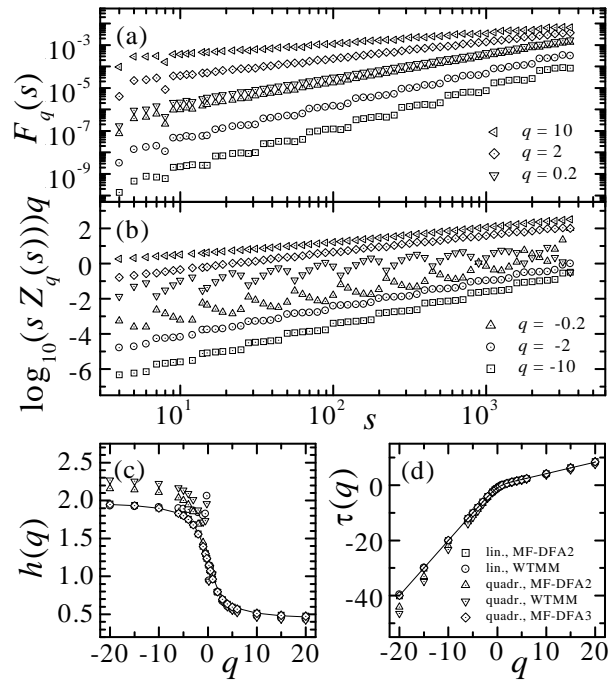
Man kann auch sagen, dass das Skalenverhalten des Quotienten  $F_q(s)/F_q^{(\text{gemischt})}(s)$  die Korrelationen in der Reihe charakterisiert, d.h. er ist konstant, wenn es keine Korrelationen gibt und sonst entsprechend der Korrelations-Multifraktalität von  $q$  abhängig. Genauso charakterisiert der Quotient  $F_q^{(\text{gemischt})}(s)/s^{0.5}$  die Verteilung der Werte, d.h. er ist konstant, wenn die Verteilung hinreichend eng ist und sonst entsprechend der Verteilungs-Multifraktalität von  $q$  abhängig. „Hinreichend eng“ bedeutet hier, dass alle Momente der Verteilung entsprechend Gl. (II.A.56) endlich sind. Es kann durchaus sein, dass beide Quotienten,  $F_q(s)/F_q^{(\text{gemischt})}(s)$  und  $F_q^{(\text{gemischt})}(s)/s^{0.5}$ , nicht konstant sind, und auch beide können Multifraktalität, d.h. ein von  $q$  abhängiges Skalenverhalten zeigen. Das Verhalten der Quotienten ist in Abb. II.A.17 für jeden der drei Fälle beispielhaft gezeigt, und zwar für die Beispiele 2 bis 4 aus den vorhergehenden Abschnitten jeweils für die Momente  $q = \pm 10$ .

## f) Vergleich mit der WTMM-Methode

Da die WTMM Methode (siehe Abschnitt II.A.3.f) schon seit mehreren Jahren zur Multifraktalanalyse nichtstationärer Zeitreihen angewendet und weiterentwickelt wird [MUZYetal-91, MUZYetal-93, MUZYetal-94, ARNEODOetal-95, ARNEODOetal-98b, ARNEODOetal-02], ist ein Vergleich der Leistungsfähigkeit der neuen MF-DFA [KANTELHARDTetal-02a] mit der WTMM anhand einer trendbehafteten Datenreihe angebracht. In Abb. II.A.18 wird die MF-DFA Fluktuationsfunktion  $F_q(s)$  für das binomiale Multifraktalmodell (siehe Abschnitt II.A.4.b) verglichen mit der entsprechend Gl. (II.A.37) umgerechneten verallgemeinerten WTMM-Zustandssumme  $Z_q(s)$ . Um die Fähigkeiten zur Trendbereinigung zu testen, sind zu der multifraktalen Datenreihe lineare und quadratische Trends hinzugefügt. Beide Methoden beseitigen diese Trends, wenn eine hinreichend hohe Ordnung der Trendbereinigung gewählt wird (Polynom-Ordnung bzw. Wavelet-Ordnung). Die Abweichungen von den theoretischen Werten der verallgemeinerten Fluktuationsexponenten  $h(q)$  (siehe Gl. (II.A.51)) sind für beide Methoden etwa gleich groß; das bedeutet, dass die Ergebnisse praktisch äquivalent sind.

Ähnliche Ergebnisse liefern beide Methoden auch für monofraktale Datenreihen, denen zufällige hohe Einzelimpulse überlagert sind, wie es z.B. bei Messdaten mit Artefakten vorkommt [KANTELHARDTetal-02a]. Die Impulse verursachen eine gewisse Multifraktalität auf kleinen Skalen  $s$ , aber der monofraktale Charakter der Daten zeigt sich auf großen Zeitskalen. Die störenden Auswirkungen der Impulse auf die Ergebnisse der MF-DFA und der WTMM sind gleich, was die obige Aussage zur Äquivalenz untermauert.

Schließlich soll die Genauigkeit der Ergebnisse bei kurzen Datenreihen verglichen werden. Ausführliche Untersuchungen [KANTELHARDTetal-02a] zeigen, dass sowohl die systematischen als auch die statistischen Fehler der mit WTMM bestimmten Fluktuationsexponenten  $h(q)$  leicht größer sind als für die entsprechenden MF-DFA Ergebnisse, und zwar insbesondere für kurze Datenreihen und bei stark negativen Momenten. Die auf der nächsten Seite aufgelisteten Werte gelten für  $h(q) < 1$ , d.h. für stationäre Reihen. Auch hier sind die Ergebnisse mindestens äquivalent und lassen keinerlei Nachteil für die methodisch einfachere MF-DFA erkennen.



**Abb. II.A.18:** Vergleich der multifraktalen DFA mit der WTMM Methode anhand des binomialen Multifraktalmodells mit  $a = 0.75$  mit zusätzlichen Trends für die Momente  $q = -10$  ( $\square$ ),  $q = -2$  ( $\circ$ ),  $q = -0.2$  ( $\triangle$ ),  $q = +0.2$  ( $\nabla$ ),  $q = +2$  ( $\diamond$ ) und  $q = +10$  ( $\triangleleft$ ). (a) Die MF-DFA2 Fluktuationsfunktion  $F_q(s)$  ist für Daten mit linearem Trend  $x_i \rightarrow x_i + i/500N$  doppelt logarithmisch gegen  $s$  aufgetragen. (b) Die entsprechend Gl. (II.A.37) reskalierte verallgemeinerte WTMM Zustandssumme  $[s Z_q(s)]^{1/q}$  ist für dieselben Datenreihen in gleicher Art gegen  $s$  aufgetragen; es wurde das Gauss-Ableitungs-Wavelet 2. Ordnung verwendet. (c) bzw. (d): Vergleich der im Bereich  $50 < s < 2000$  bestimmten Steigungen  $h(q)$  bzw.  $\tau(q)$  für Daten mit linearen Trends ( $\square$ , MF-DFA2;  $\circ$ , WTMM 2. Ordnung) und quadratischen Trends ( $\triangle$ , MF-DFA2;  $\nabla$ , WTMM 2. Ordnung;  $\diamond$ , MF-DFA3). Quadratische Trends verursachen Abweichungen von der theoretischen Linie, außer wenn mit MF-DFA3 eine hinreichend hohe Ordnung der Trendbereinigung gewählt wird. Die Ergebnisse sind über 100 Reihen der Länge  $N = 65536$  gemittelt (nach [KANTELHARDTetal-02a]).



Methode	Länge $N$	$\Delta h(q = -10)$ systematisch	$\Delta h(q = -10)$ statistisch	$\Delta h(q = +10)$ systematisch	$\Delta h(q = +10)$ statistisch
MF-DFA	$2^{13}$ (= 8192)	+0.05	$\pm 0.04$	-0.02	$\pm 0.04$
WTMM	$2^{13}$ (= 8192)	+0.08	$\pm 0.05$	-0.05	$\pm 0.05$
MF-DFA	$2^{16}$ (= 65536)	+0.02	$\pm 0.02$	-0.01	$\pm 0.03$
WTMM	$2^{16}$ (= 65536)	+0.06	$\pm 0.03$	-0.03	$\pm 0.03$

### g) Vergleich mit der Methode von Lovejoy, Schertzer und Mitarbeitern

Einen etwas anderen Ansatz zur Untersuchung der Multifraktalität vor allem in geophysikalischen Zeitreihen haben Lovejoy, Schertzer und Mitarbeiter entwickelt [SCHERTZER&LOVEJOY-87, LOVEJOY&SCHERTZER-91, LAVALLEEetal-93, TESSIERetal-96, PANDEYetal-98], siehe auch [RODRIGUEZ-ITURBE&RINALDO-97]. Sie gehen von einem „konservativen Prozess“  $\varepsilon(j)$  aus, dessen entsprechende Strukturfunktion skaliert wie (vgl. Gl. (II.A.36) und (II.A.38))

$$C_q(s) \equiv \left\langle |\varepsilon(j+s) - \varepsilon(j)|^q \right\rangle \sim s^{-K(q)} \quad (\text{II.A.63})$$

mit  $K(1) = K(0) = 0$ . Während die Bedingung für  $q = 0$  trivial ist, bedeutet die Bedingung  $K(1) = 0$ , dass der Mittelwert der Differenzen unabhängig von der Skala  $s$  ist, d.h. der Prozess konservativ („erhaltend“) ist. Um nicht-konservative Prozesse zu modellieren, erfolgt anschließend – wie bei der Erzeugung langreichweitig korrelierter Zahlen mit Fourier-Filter-Methode (siehe Abschnitt II.A.1.c) und unserem verallgemeinerten Binomialmodell (siehe Abschnitt II.A.4.b) – eine fraktionale Integration der Ordnung  $H$ , die von  $\varepsilon(j)$  zu unserem Profil  $Y(j)$  führt. Daher gilt nicht  $K(q) = -qh(q)$ , sondern (vgl. Gl. (II.A.63) mit (II.A.35) bis (II.A.38))

$$K(q) = Hq - qh(q) = Hq - 1 - \tau(q). \quad (\text{II.A.64})$$

$H$  bezeichnet hier wieder den klassischen Hurst-Exponenten aus Abschnitt II.A.1.d, aber Lovejoy, Schertzer und Mitarbeiter verwenden stattdessen  $H' = H - 1$ . Ihre Annahme der Existenz von „universellen Multifraktalen“, bei denen das Skalenverhalten über alle Längen oder Zeitskalen  $s$  dasselbe ist, führen Lovejoy, Schertzer und Mitarbeiter auf einen Ansatz für die Renyi-Exponenten  $\tau(q)$  des universellen Multifraktals,

$$\tau(q) = Hq - 1 - K(q) = (H' + 1)q - 1 - \frac{C_1}{\alpha' - 1} (q^{\alpha'} - q) \quad \text{für } q > 0, \quad (\text{II.A.65})$$

mit den beiden zusätzlichen Parametern  $C_1$  und  $\alpha'$ . Hier ist zu beachten, dass  $\tau(q)$  für negative Werte von  $q$  nicht definiert ist, weil der Parameter  $\alpha'$  nicht ganzzahlig sein muss. In der Formel (II.A.65) soll  $\alpha'$  die Multifraktal-Klasse charakterisieren und eine ähnliche Bedeutung wie  $\delta$  in der Levy-artigen Verteilung (II.A.57) haben [LAVALLEEetal-93]. In der numerischen Prozedur werden nicht die Spektren  $K(q)$  bestimmt, sondern direkt die beiden Parameter  $C_1$  und  $\alpha'$  ermittelt und damit  $H'$  durch einen Vergleich mit dem spektralen Exponenten  $\beta$  (siehe Gl. (II.A.5)) berechnet.

Diese Prozedur führt zu einer Charakterisierung des Skalenverhaltens der positiven Momente durch die drei Parameter  $H'$ ,  $C_1$  und  $\alpha'$ . Ein direkter Vergleich der Methode mit der MF-DFA oder der WTMM ist nicht möglich, weil (i) die Persistenz getrennt von der Multifraktalität analysiert wird, (ii) die numerische Methode nur unter der Voraussetzung eines durch (II.A.65) beschriebenen universellen Multifraktals anwendbar ist. Es zeigt sich, dass der Ansatz (II.A.65) in vielen Fällen trotzdem eine akzeptable Beschreibung für die positiven Momente liefert.

### II.A.5. Phasen-ausgerichtete Signal-Mittelung (PRSA)

Bisher standen in diesem Kapitel Methoden zur Bestimmung und Charakterisierung von Langzeitkorrelationen und multifraktalen Skaleneigenschaften in nichtstationären und trendbehafteten Zeitreihen im Mittelpunkt. Es gibt jedoch auch Fälle, bei denen die für die Charakterisierung relevan-

ten Informationen nicht im Skalenverhalten, sondern in Periodizitäten mit bestimmten Frequenzen stecken. So können sich einfache geschlossene Regelkreise in Oszillationen mit einer bestimmten Frequenz niederschlagen. Üblicherweise wird dann zur Erkennung der Periodizitäten die Spektralanalyse (siehe Abschnitt II.A.1.c) angewandt, die allerdings Stationarität der Signale voraussetzt. Insbesondere biomedizinische Signale von komplexen Systemen sind aber meist nichtstationär, weil sie ständig inneren oder äußeren Störeinflüssen ausgesetzt sind, die die Oszillationen verändern oder unterbrechen. Dadurch werden die Periodizitäten zu Quasiperiodizitäten, bei denen die Phasen-Synchronisation über längere Zeiten aufgrund von schwankender Frequenz oder von Phasensprüngen verloren geht, d.h. die Kohärenzzeit wird endlich. Ein Vergleich mit idealen Sinusschwingungen ohne Phasensprünge (mit unendlicher Kohärenzzeit), wie er bei der Spektralanalyse erfolgt, kann dann die Periodizitäten schlecht nachweisen, weil die Phasensprünge viel zusätzliches Rauschen verursachen. Es ist besser, die Nichtstationaritäten zu berücksichtigen und in einem geeigneten Verfahren zu eliminieren; dann kann die Spektralanalyse bedenkenlos eingesetzt werden.

In diesem Abschnitt beschreibe ich die von mir gemeinsam mit A. Bauer und G. Schmidt (Kardiologie der TU München) entwickelte Methode der Phasen-ausgerichteten Signal-Mittelung (phase rectified signal averaging, PRSA), die die eben skizzierte Aufgabe leistet. Die Methode wurde im Zusammenhang mit der Analyse der Herzfrequenz-Fluktuationen bei Münchner Herz-Infarkt-Patienten entwickelt und auf ihre Überlegenheit gegenüber der Standard-Spektralanalyse anhand von zwei Blindstudien evaluiert (siehe Abschnitt II.B.5) [BAUERetal-04]. Unsere Methode ist generell zur Untersuchung von Quasiperiodizitäten in nichtstationären Signalen geeignet und auch zum Studium von Synchronisation und Kreuzkorrelationen zwischen mehreren Signalen.

### a) Beschreibung der Methode

Wir gehen wieder von einer beliebigen fluktuierenden Zeitreihe  $(x_i)_{i=1}^N$  mit Mittelwert Null  $\langle x_i \rangle = 0$  aus. Die Methode besteht aus drei Schritten, die auch in Abb. II.A.19 skizziert sind.

Im *ersten* Schritt werden etwa die Hälfte aller Indizes  $i$  als Triggerpunkte  $z(k)$  ausgewählt. Ein geeignetes Triggerkriterium ist beispielsweise ein Anstieg der betrachteten Messgröße,

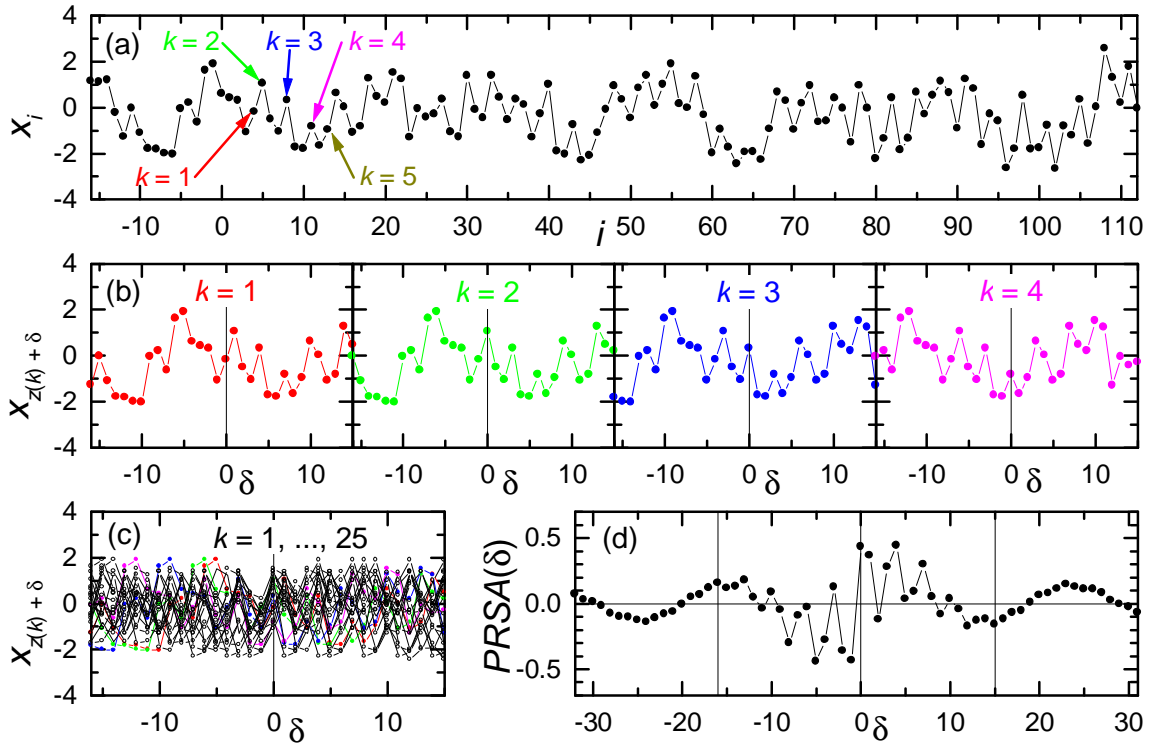
$$x_i > x_{i-1} \quad \text{für } i = z(k), \quad k = 1, \dots, M, \quad (\text{II.A.66})$$

wobei  $M$  die Gesamtanzahl der Triggerpunkte bezeichnet. In Abb. II.A.19(a) sind fünf solche Triggerpunkte markiert. Prinzipiell könnte man auch umgekehrt alle Indizes mit Abnahme der Messgröße ( $x_i < x_{i-1}$ ) auswählen anstelle der Anstiege im Kriterium (II.A.66). Ein Unterschied im Ergebnis zeigt dann, dass das Signal nicht invariant ist gegenüber Zeitumkehr. Quasiperiodische Oszillationen im Signal lösen Triggerpunkte vor allem in der Phase des steilsten Anstiegs aus, d.h. wenn die Phase der Oszillationen nahe 0 ist. Dadurch wird die Phasenlage der Oszillationen unabhängig von Nichtstationaritäten aus dem Signal selbst gewonnen.

Weiterhin ist es oft – besonders zur Analyse niedriger Frequenzen – angebracht, längerfristige Kriterien zu verwenden, bei denen Mittelwerte (oder Summen) über  $T$  Messwerte  $x_i$  verglichen werden,

$$\sum_{n=1}^T x_{i+n-1} > \text{oder} < \sum_{n=1}^T x_{i-n} \quad \text{für } i = z(k), \quad k = 1, \dots, M. \quad (\text{II.A.67})$$

Für  $T = 1$  entspricht das dem Kriterium (II.A.66). Es kann mathematisch gezeigt werden, dass die PRSA-Methode am empfindlichsten ist für Oszillationen mit der Frequenz  $f \approx 1/(2.7 T)$ , falls die Oszillationen völlig periodisch sind (Frequenzen in Einheiten der Datenrate der Zeitreihe). Für Oszillationen mit endlicher zeitlicher Phasenkohärenz erhöht sich dieser Wert leicht; wir finden empirisch  $f \approx 1/(2.5 T)$ . Höhere Frequenzen werden unterdrückt. Der Parameter  $T$  setzt daher eine Obergrenze für die Frequenz der Quasiperiodizitäten, die zuverlässig erkannt werden können. Beim Kriterium (II.A.66) werden die hohen Frequenzen im Signal nicht unterdrückt. Mit allen Kriterien



**Abb. II.A.19:** Illustration zur Vorgehensweise bei der Phasen-berichtigten Signal-Mittelung (PRSA). (a) In der Zeitreihe werden Triggerpunkte definiert, z.B. für alle Stellen, an denen der Messwert ansteigt entsprechend dem Kriterium (II.A.66); hier sind fünf solche Triggerpunkte markiert. (b) In Fenstern der Breite  $2L$  (hier  $L = 16$ ) werden Kopien der Zeitreihe erstellt; hier sind vier solche Kopien gezeigt. (c) Die Kopien aus den verschiedenen Fenstern werden übereinander geschoben (Phasen-Ausrichtung) und gemittelt; hier sind 25 Kurven übereinander gezeigt. (d) Das Ergebnis ist der Phasen-ausgerichtete Signal-Mittelwert (PRSA) als Funktion des Abstands  $\delta$  von den Triggerpunkten; hier habe ich  $L$  auf 32 erhöht, damit man beide charakteristischen Periodizitäten ( $f = 0.05$  und  $0.3$  in Einheiten der Datenrate) erkennen kann.

werden im Durchschnitt etwa die Hälfte der Indizes  $i$  als Triggerpunkte  $z(k)$  markiert, denn die Wahrscheinlichkeit, dass das  $<$  Zeichen oder das  $>$  Zeichen gilt, ist jeweils fast 0.5. Gleichheit kommt insbesondere dann nur selten vor, wenn die Auflösung der gemessenen Größe  $x_i$  hoch ist. Zusätzlich lässt sich durch geeignete ergänzende Kriterien für die betrachteten Triggerpunkte leicht ausschließen, dass Artefakte im Signal Triggerereignisse verursachen.

Im *zweiten* Schritt werden – zentriert um jeden Triggerpunkt  $z(k)$  – Fenster der Breite  $2L$  definiert und separate Kopien der Zeitreihe in jedem Fenster betrachtet, siehe Abb. II.B.19(b), in der  $L = 16$  ist. Die Punkte im Fenster Nummer  $k$  sind dann  $x_{z(k)+\delta}$  mit den Abständen  $\delta = -L, 1-L, \dots, -1, 0, 1, \dots, L-2, L-1$  vom Triggerpunkt. Man beachte, dass viele Fenster überlappen. Die Fensterbreite  $L$  sollte am besten der erwarteten Kohärenzzeit für die zu analysierenden Quasiperiodizitäten entsprechen. Sie muss mindestens gleich dem Kehrwert der tiefsten Frequenz sein, die analysiert werden soll. Periodische Anteile mit Frequenzen  $f < 1/(2L)$  lassen sich in den Fenstern der Breite  $2L$  nicht mehr darstellen. Darum bestimmt der Parameter  $L$  eine untere Grenze für die abgebildeten Frequenzen, während  $T$  aus dem Triggerkriterium (II.A.67) die obere Grenze festlegt.

Im *dritten* Schritt wird der Phasen-ausgerichtete Signal-Mittelwert (phase rectified signal average, PRSA) berechnet, indem die Kurven in allen Fenstern übereinander ausgerichtet und gemittelt werden (siehe Abb. II.A.19(c) und (d)),

$$PRSA(\delta) = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M x_{z(k)+\delta} \quad \text{für } \delta = -L, 1-L, \dots, -1, 0, 1, \dots, L-2, L-1. \quad (\text{II.A.68})$$

Das Ergebnis der Mittelungsprozedur (II.A.68) ist beispielhaft in Abb. II.A.19(d) gezeigt, wobei die Fensterbreite auf  $L = 32$  verdoppelt wurde, damit man beide im Signal detektierten Oszillationen sehen kann. Man erkennt, wie sich Quasiperiodizitäten im Signal im Phasen-ausgerichteten Signal-Mittelwert niederschlagen. Das simulierte, ursprüngliche Signal, Abb. II.B.19(a), enthält neben  $1/f$  Rauschen zwei nichtstationäre Periodizitäten mit den Frequenzen 0.05 und 0.3 in Einheiten der Datenrate. Die Nichtstationarität wurde durch zufällige Phasensprünge nach im Mittel vier Oszillationsperioden simuliert. Der größte Sprung in Abb. II.B.19(d) tritt in der Mitte von PRSA( $\delta$ ) auf von PRSA( $-1$ ) zu PRSA(0), weil aufgrund des Triggerkriteriums (II.A.66) stets  $x_{z(k)} > x_{z(k)-1}$  gilt. Rechts und links von diesem Zentrum erkennt man vier bis fünf Oszillationsperioden der hohen Frequenz 0.3 und aufgrund der gewählten Fensterbreite  $L = 32$  nur gut anderthalb Oszillationsperioden der tiefen Frequenz 0.05. Aus der Anzahl der erkennbaren Perioden lässt sich die Kohärenzzeit abschätzen, soweit  $L$  hinreichend groß ist (hier nur für die hohe Frequenz). Es fällt auf, dass sich die Periodizitäten im PRSA-Bild in Abb. II.B.19(d) schon mit bloßem Auge wesentlich besser erkennen lassen als im Original-Signal in Abb. II.B.19(a). Der Grund ist, dass in Abb. II.B.19(d) alle Oszillationen in ihrer Phase auf die Mitte ausgerichtet sind.

In ihrem Funktionsprinzip ähnelt die Methode einem digitalen Speicheroszillographen: Um ein (elektrisches) Signal angezeigt zu bekommen, muss man zuerst ein Triggerkriterium festlegen, z.B. einen Anstieg des Signals über einen gewissen Schwellenwert. Dann speichert der Oszillograph Fenster mit der Vor- und Nachgeschichte aller solchen Ereignisse und zeigt den gemittelten Verlauf auf dem Bildschirm an. Dadurch erkennt man das typische Verhalten des Signals um die Triggerereignisse herum, während sich alles zufällige Verhalten, wie z.B. Rauschen und Störungen, mit der Zeit (d.h. mit zunehmender Anzahl gemittelter Fenster) herausmittelt. Bei der PRSA ist das Triggerkriterium allerdings sehr allgemein gehalten; es wird sozusagen auf alle Stellen getriggert, zu denen die (diskrete) Ableitung des Signals positiv ist. Bei einem digitalen Speicheroszillographen sind überlappende Fenster in der Regel nicht möglich.

## b) Eigenschaften des Frequenzspektrums

Bei der Standard-Spektralanalyse mit Fourier-Transformation (siehe Abschnitt II.A.1.c) löschen sich zwei gleich lange, periodische Abschnitte mit um  $\pi$  gegeneinander verschobener Phasenlage exakt gegenseitig aus. Wenn man sich ein Signal vorstellt als zusammengesetzt aus vielen Segmenten mit gleicher Frequenz aber zufälligen Phasen – die Segmentlänge entspricht der Kohärenzzeit –, so wird zwar auch die Spektralanalyse diese Frequenz nachweisen können, weil zufällig eine Phasenlage überwiegt. Aber die Intensität des spektralen Maximums wird nur von den wenigen Segmenten bestimmt, die nicht durch andere Segmente mit um  $\pi$  verschobener Phase kompensiert sind. Der Unterschied zum (Rausch-)Untergrund ist daher deutlich geringer, als wenn alle Segmente in ihrer Phase ausgerichtet werden und dann gemeinsam zur spektralen Intensität beitragen. Der Unterschied ist in dem realen Beispiel in Abb. II.B.20 für Zeitintervalle zwischen aufeinander folgenden Herzschlägen eines Probanden, die zwei Quasiperiodizitäten enthalten, deutlich zu sehen. Wenn mehrere Frequenzen im Signal vorhanden sind, ist die Ausrichtung der Phasen zwar nicht für alle Fenster ideal, aber sie bringt trotzdem eine merkliche Verringerung des Rausch-Untergrunds, wie der Vergleich von Abb. II.B.20(b) und (d) klar zeigt. Aufgrund der Beseitigung von Nichtstationaritäten und Phasensprüngen lassen sich die Periodizitäten wesentlich besser erkennen, wenn man eine Spektralanalyse des Phasen-ausgerichteten Signal-Mittelwerts durchführt (Abb. II.B.20(d)) als bei der Spektralanalyse des Original-Signals in Abb. II.B.20(b).

Für Signale mit kontinuierlichem Frequenzspektrum  $P(f) \sim f^{-\beta}$  (siehe Gl. (II.A.5)), wie sie z.B. bei Herzschlag-Intervallen als  $1/f$ -Rausch-Hintergrund auftreten (siehe Kapitel II.B.1 unten), lassen sich die Auswirkungen der PRSA-Transformation direkt herleiten. Dazu muss die Wahrscheinlichkeit  $p_f$  betrachtet werden, dass eine spezifische oszillierende Komponente  $x_f(t) = A_f \sin(2\pi f t)$  mit der Fre-

quenz  $f$ , die in der Zeitreihe  $x(t=i) \equiv x_i$  enthalten ist, die transformierte PRSA( $\delta$ ) beeinflusst. Nichtstationaritäten werden in dieser Herleitung vernachlässigt.

Zunächst findet man für den Amplitudenfaktor  $A_f$  der betrachteten spektralen Komponente

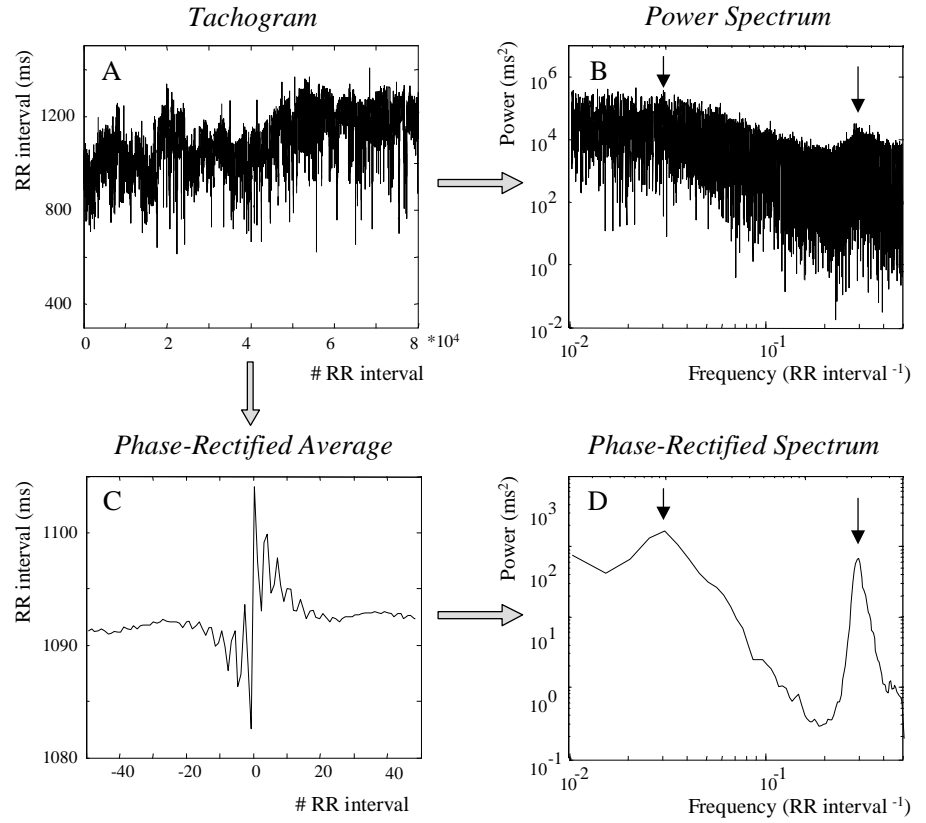
$$\begin{aligned} P(f) &\sim f^{-\beta} \sim A_f^2 \\ \Rightarrow A_f &\sim f^{-\beta/2}. \end{aligned} \quad (\text{II.A.69})$$

Aufgrund der linearen Mittelungsprozedur (II.A.68) ist die Auswirkung der Komponente  $x_f(t)$  auf PRSA( $\delta$ ) einerseits proportional zu ihrem Amplitudenvorfaktor  $A_f$ , so dass  $p_f \sim A_f$ . Andererseits muss die Komponente  $x_f(t)$  Triggerereignisse auslösen, um nicht beim Mittelungsprozess unterzugehen.

Dafür muss nach dem Kriterium (II.A.66)  $x_f(t)$  größer sein als  $x_f(t-1) \approx x_f(t) - x'_f(t) = x_f(t) - 2\pi f A_f \cos(2\pi f t)$  (mit Taylor-Entwicklung bis zur ersten Ordnung, die für nicht zu hohe Frequenzen gilt). Die Maxima von  $x_f(t) - x_f(t-1) = 2\pi f A_f \cos(2\pi f t)$  treten für  $t = n/f$  bei allen ganzen Zahlen  $n$  auf; der Wert der Maxima ist  $2\pi f A_f$ . Daher finden wir, dass die Wahrscheinlichkeit, mit der die betrachtete spektrale Komponente synchronisierte Triggerereignisse auslöst, proportional zu  $f A_f$  ist. Zusammen mit  $p_f \sim A_f$  von oben ergibt sich für die gesuchte Wahrscheinlichkeit  $p_f \sim A_f^2 f$ . Daher wird das spektrale Gewicht der Komponente mit Frequenz  $f$  in PRSA( $\delta$ ) durch  $A_f^2 f$  bestimmt, anstelle von  $A_f$  beim Frequenzspektrum des ursprünglichen Signals in Gl. (II.A.69). Für das Frequenzspektrum des Phasen-ausgerichteten Signal-Mittelwerts gilt somit

$$P_{\text{PRSA}}(f) \sim A_f^4 f^2 \sim f^{-2\beta+2} = f^{-\beta'} \Rightarrow \beta' = 2\beta - 2. \quad (\text{II.A.70})$$

Der spektrale Exponent  $\beta'$  der PRSA-Transformierten ist also nicht gleich  $\beta$ , sondern durch eine einfache Beziehung damit verknüpft. Das Ergebnis gilt für alle Werte von  $\beta$ . In dem Spezialfall von  $1/f$ -Rauschen ( $\beta = 1$ ), der in physiologischen Signalen besonders häufig ist, wird das Spektrum der PRSA flach ( $\beta' = 0$  nach Gl. (II.A.70)), so dass sich zusätzliche Quasiperiodizitäten besonders leicht – auch schon ohne eine doppelt logarithmische Auftragung – erkennen lassen. Dies ist ein weiterer Vorteil der PRSA-Methode besonders bei medizinischen Anwendungen.



**Abb. II.A.20:** Beispiel für die Auswirkungen der PRSA-Transformation auf das Frequenzspektrum. Ausgehend von einer Reihe von Zeitintervallen (RR Intervalle) zwischen aufeinander folgenden Herzschlägen (Tachogramm, A) wird einerseits direkt das Frequenz-Spektrum berechnet (B), das mit gutem Willen zwei Maxima erkennen lässt, die Quasiperiodizitäten entsprechen. Andererseits wird der Phasen-ausgerichtete Mittelwert berechnet (mit  $T = 1$ ,  $L = 50$ , C) und daraus das Frequenzspektrum, das Phasen-ausgerichtete Spektrum ermittelt (D), an dem sich die Quasiperiodizitäten viel besser ablesen lassen (Abbildung von A. Bauer).

Zusätzlich zu dieser theoretischen Betrachtung habe ich mehrere numerische Tests der PRSA-Methode mit künstlichen Signalen bestehend aus skalierendem Rauschen und schwachen zusätzlichen Quasiperiodizitäten durchgeführt. Die Quasiperiodizitäten habe ich als stückweise periodische Signalkomponenten  $x_f(t) = A_f \sin(2\pi f t + \varphi)$  mit Phasensprüngen  $\Delta\varphi$  nach im Mittel jeder vierten Periode und Frequenzsprüngen  $\Delta f$  im Bereich von  $\pm 10\%$  nach im Mittel jeder 16ten Periode simuliert. Die Tests zeigen, dass die PRSA mit anschließender Spektralanalyse eine signifikante Verbesserung in der Erkennung von schwachen Quasiperiodizitäten ermöglicht im Vergleich zur Standard-Spektralanalyse, wie es schon der Vergleich von Abb. II.A.20(b) und (d) erwarten lässt. Für realistisch simulierte Herzschlag-Intervalle, die auch nahezu unkorrelierte Abschnitte enthalten (siehe Kapitel II.B.3 für eine Beschreibung des verwendeten Modells), konnte ich konkret zeigen, dass die Intensitäts-Schwelle zur signifikanten Erkennung der Quasiperiodizitäten bei der PRSA-Methode je nach Frequenz der Quasiperiodizitäten um 70 bis 85% niedriger ist als bei der Standard-Spektralanalyse.

### c) Erweiterung zur Analyse von Kreuzkorrelationen und Phasensynchronisation

Bei dem schon oben erwähnten Speicheroszillograph ist es möglich, die Beziehungen zwischen zwei Signalen zu untersuchen, indem die Triggerereignisse aus dem einen Signal abgeleitet werden und die Fenster für die Signalmittelung aus dem anderen Signal (externe Triggerung). Damit kann man erkennen, wie sich besondere Ereignisse in dem einen Signal auf das andere auswirken und wie die beiden Teile des Systems wechselwirken. Das gleiche Prinzip ist auf die PRSA-Methode übertragbar, indem man die Triggerpunkte aus einer Zeitreihe  $x_i$  ableitet (erster Schritt) aber die entsprechenden Fenster aus einer anderen Zeitreihe  $y_i$  nimmt (zweiter Schritt). Wenn zwischen den beiden Zeitreihen keine Beziehung besteht, ist  $\text{PRSA}(\delta)$  einfach flach. Es schlagen sich darin nur die quasiperiodischen Komponenten der Zeitreihe  $y_i$  nieder, die zu den aus der Zeitreihe  $x_i$  gewonnenen Triggerpunkten phasensynchronisiert sind. Damit sollte es möglich sein, die Phasensynchronisation auch nichtstationärer Datenreihen zu analysieren.

Ferner lässt sich aus dem Vergleich mit der  $\text{PRSA}(\delta)$ -Kurve, die sich durch Vertauschung der beiden Zeitreihen  $x_i$  und  $y_i$  ergibt, möglicherweise die Richtung der Kopplung zwischen den beiden betrachteten Teilen eines komplexen Systems verstehen. Erste Anwendungen auf die Kopplung von Herzschlag, Atmung und Blutdruckregulation, die aber den Rahmen dieser Arbeit sprengen würden, sind hier viel versprechend.

## ***II.B. Korrelationsverhalten von Herz- und Atemrhythmus***

### **II.B.1. Einführung, Vergleich von Gesunden und Herzkranken**

In diesem Kapitel betrachte ich als erste Anwendung der Methoden zur Analyse von nichtstationären Zeitreihen Messdaten des menschlichen Herz-Kreislauf-Systems. Das Ziel ist es, (i) die in diesem komplexen System bei gesunden Probanden auftretende natürliche Schwankungsbreite im Fluktuations- und Korrelationsverhalten der medizinisch interessanten und messbaren Signale wie dem Herz- und Atemrhythmus zu erfassen, um eine Ausgangsbasis für den Vergleich mit Kranken zu erhalten, und (ii) die Regulationsmechanismen und Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Komponenten besser zu verstehen, um so das physiologische Verständnis voranzubringen.

Das Herz-Kreislauf-System dient mittels des Transportes von Sauerstoff, Nahrung usw. der Versorgung des Körpers zur Erhaltung seiner Funktion. Es wird vom autonomen Nervensystem gesteuert, das – wie der Name sagt – autonom, d.h. nicht vom Bewusstsein beeinflusst ist; es regelt alle lebenswichtigen („vegetativen“) Körperfunktionen. Davon zu unterscheiden ist das somatische Nervensystem, mit dem z.B. die Muskeln im Bewegungsapparat gesteuert werden, und das direkt der Bewusstseinskontrolle unterliegt. Es ist bekannt, dass die Regelung der autonomen Funktionen sich als Wechselspiel von sympathischem und parasympathischem Nervensystem verstehen lässt, die beide Teil des autonomen Nervensystems sind. Während das sympathische Nervensystem beim Herzrhythmus eine aktivierende (beschleunigende) Wirkung hat, führt eine parasympathische Stimulation des Herzens eher zu einer Absenkung der Herzfrequenz. In Bezug auf die Verdauungsaktivität beispielsweise ist die Wirkung der beiden Teile des autonomen Systems umgekehrt. Das Wechselspiel zwischen sympathischem und parasympathischem Nervensystem ist die Grundlage für viele Versuche einer Modellierung des beobachteten Fluktuationsverhaltens des Herzrhythmus. Dabei spielt die nichtlineare Kopplung der beiden Teilsysteme eine wichtige Rolle.

Ich beschränke mich hier auf das autonome Nervensystem und weiter auf den Herz- und Atemrhythmus, weil diese Signale relativ einfach zu messen und weniger externen oder durch bewusste Aktivität verursachten Störungen ausgesetzt sind. Dennoch sind auch der Herz- und der Atemrhythmus nicht stationär (siehe z.B. [GOLDBERGER-96]). Über die Schlagfrequenz (Herzfrequenz) und das Schlagvolumen des Herzens wird die Versorgung dem Bedarf des Körpers bei Ruhe sowie bei physischer und psychischer Leistung angepasst. Am Tag üben zusätzlich zur messbaren Leistung viele weitere Parameter einen großen Einfluss auf die Regulation dieser zentralen Versorgungsgrößen aus. Auch gut definierte Tests am Tage, wie ein physischer Belastungstest mit einem Fahrrad-Ergometer, hängen von der Testumgebung sowie der Motivation und weiteren inneren Einflüssen ab. Beim Schlaf hingegen liegt ein Zustand des Menschen vor, bei dem die äußeren Einflüsse konstant gehalten werden und die inneren Einflüsse weitgehend reduziert werden können. Insofern können Untersuchungen von Körperfunktionen im Schlaf als Untersuchungen in einem gut definierten Testzustand angesehen werden [VERRIERetal-96].

Bei den ersten Analysen der autonomen Funktionen, insbesondere des Herzrhythmus, im Hinblick auf das Fluktuations- und Korrelationsverhalten hat man die Aktivitäts- bzw. Passivitätsphasen am Tage und in der Nacht nicht berücksichtigt, sondern meist 24 Stunden-Aufzeichnungen als Ganzes analysiert. Diese lassen sich recht einfach mit tragbaren Rekordern für das Elektro-Kardio-Gramm (EKG, englisch ECG) anfertigen, die der Proband oder Patient mitnehmen kann. Im EKG erscheint für jeden Herzschlag ein so genannter QRS-Komplex, eine charakteristische Signalform, deren Zentrum, die R-Zacke, zur Bestimmung der Zeitintervalle (der so genannten RR-Intervalle) zwischen den einzelnen Herzschlägen verwendet wird. Man analysiert dann die (Zeit-)Reihe der RR-Intervalle  $t_i$ . Das Hauptziel bei den ersten Untersuchungen war eine Unterscheidung von (gesunden) Probanden und (kranken) Patienten. Nachdem [KOBAYASHI&MUSHA-82] (siehe auch [AK-

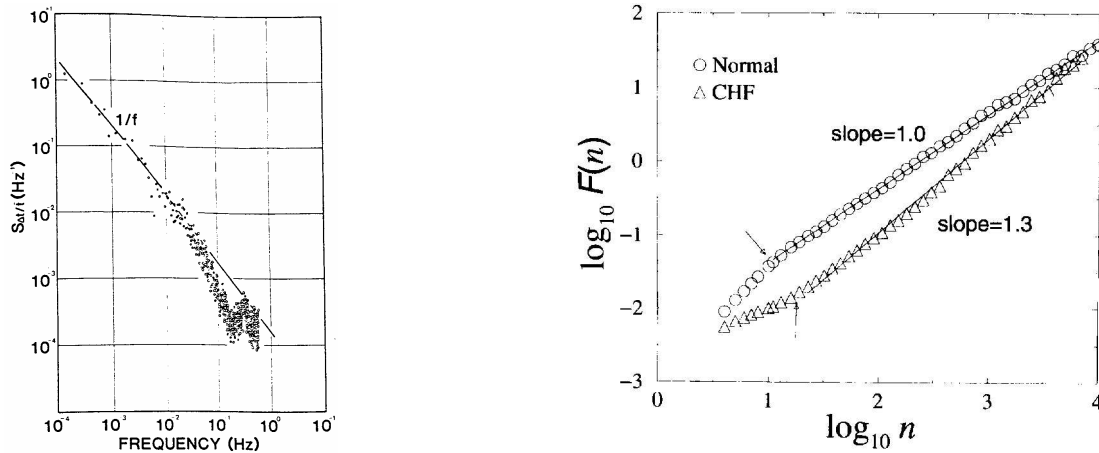


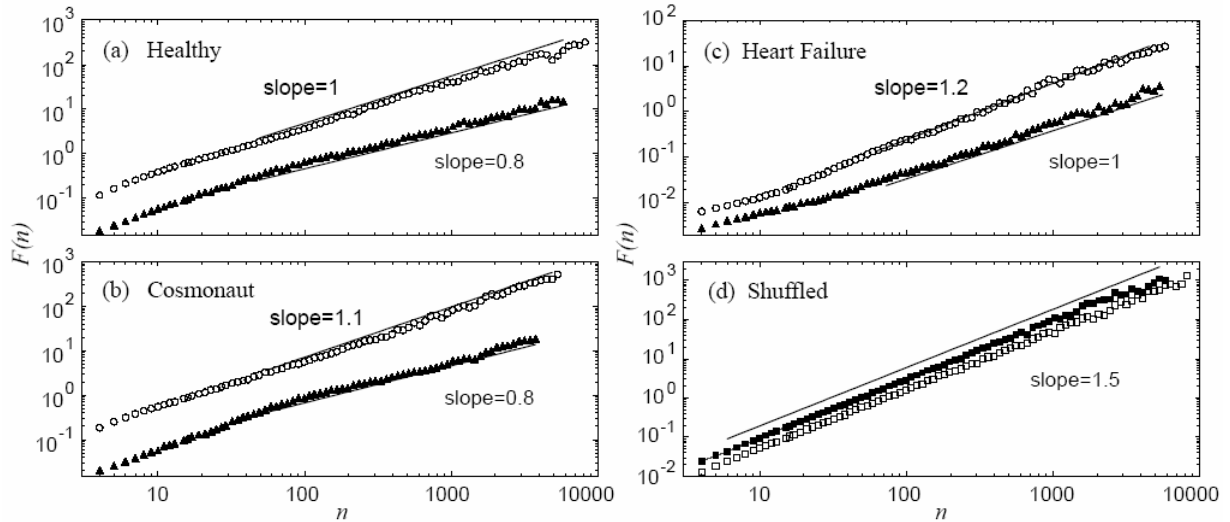
Abb. II.B.1: (a) Doppelt logarithmisch aufgetragenes Frequenz-Spektrum der Herzfrequenz-Fluktuationen eines gesunden Probanden zusammen mit einer angepassten  $1/f$  (d.h.  $\beta = 1$ ) Geraden (aus [KOBAYASHI&MUSHA-82]). (b) Vergleich der DFA1-Fluktuationsfunktion  $F(s = n)$  in Abhängigkeit von der Skala  $s = n$  (Einheit: Herzschläge) für je einen 24-Stunden Datensatz eines gesunden Probanden ( $\circ$ , Normal) und einen Patienten mit Herzinsuffizienz ( $\triangle$ , CHF). Man erkennt, dass der Herzkranke eine anfänglich kleinere aber asymptotisch größere Steigung  $\alpha$  aufweist (aus [PENGetal-95, PENGetal-98]).

SELRODetal-81]) gefunden hatten, dass das Frequenzspektrum des Herzrhythmus bei gesunden Probanden ein  $1/f$ -Verhalten zeigt (siehe Abb. II.B.1(a)), lag es nahe, entsprechende Analysen bei herzkranken Patienten durchzuführen. Weil auch die vom autonomen System generierten Signale nicht völlig stationär sind, sollten dafür besser Methoden verwendet werden, die Nichtstationaritäten (zumindest teilweise) beseitigen können. Dies geschah erstmals in Arbeiten der Gruppe von A. Goldberger [PENGetal-93, PENGetal-95, BULDYREVetal-95, HOetal-97, BULDYREVetal-98, PENGetal-98, AMARAetal-98], die zunächst auf einen Vergleich von gesunden Probanden und Patienten mit Herzinsuffizienz („congestive heart failure“, CHF) fokussiert waren. Unter dem Begriff Herzinsuffizienz versteht man eine Schwäche des Herzmuskels, die dazu führt, dass der Körper nicht immer, d.h. insbesondere nicht unter Belastung, ausreichend mit Blut versorgt werden kann. Die physikalischen Ursachen der Herzinsuffizienz können unterschiedlich sein, z.B. verengte oder unvollständig schließende Herzklappen oder eine Durchblutungsstörung des Herzmuskels.

Mit der DFA wurden ein deutlicher Unterschied im mittleren Skalenverhalten der beiden Gruppen und auch signifikante Unterschiede zwischen den Einzeldatenreihen festgestellt, die klar ein diagnostisches Potential haben ([PENGetal-95], siehe Abb. II.B.1(b)). Die DFA1-Fluktuationsfunktion weist bei Gesunden auf kleinen Zeitskalen ( $4 \leq s \leq 16$  Herzschläge) eine größere Steigung auf ( $\alpha_1 = 1.20 \pm 0.18$ ), als mit  $\alpha_2 = 1.00 \pm 0.12$  (entsprechend  $\beta = 1$ ) auf langen Zeitskalen ( $16 \leq s \leq 64$  Herzschläge). Bei den Herzkranken hingegen wurde auf den kleinen Zeitskalen eine reduzierte Steigung  $\alpha_1 = 0.80 \pm 0.26$  und auf großen Zeitskalen ein erhöhter Wert  $\alpha_2 = 1.13 \pm 0.22$  gefunden. Hier ist anzumerken, dass die Steigung  $\alpha_2$  bis zu einigen 10 000 Herzschlägen reicht, obwohl zur numerischen Bestimmung meist nur die Skalen  $s \leq 64$  Herzschläge verwendet wurden. Weiterhin wurde eine Altersabhängigkeit der Korrelationen gefunden [GOLDBERGERetal-00, GOLDBERGERetal-02].

Über die physiologische Bedeutung der Exponenten  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  kann man in den Veröffentlichungen nicht viel finden; sie werden eher als Indikatorzahlen behandelt. Die Bedeutung von  $\alpha_1$  steht in Beziehung zu kurzreichweitigen Korrelationen. In den Bereich von 3 bis 5 Herzschlägen fallen vor allem Oszillationen, die durch eine Kopplung der Atmung an den Herzschlag verursacht werden und die als (respiratorische oder Atem-) Sinus-Arrhythmie bekannt sind. Über die physiologische Bedeutung des Exponenten  $\alpha_2$  ist noch weniger bekannt, und die Analyse von 24-Stunden-Reihen hilft bei einer solchen Interpretation auch nicht weiter. Da die Exponenten  $\alpha_2$  oft größer als 1 sind, müssten viele der analysierten Datenreihen nichtstationär sein. Nichtstationäre Datenreihen diver-





**Abb. II.B.2:** Vergleich der DFA1-Fluktuationsfunktionen  $F(s = n)$  in Abhängigkeit von der Skala  $s = n$  (Einheit: Herzschläge) für nach Tag ( $\circ$ ) und Nacht ( $\blacktriangle$ ) aufgeteilte 24-Stunden Datensätze von (a) einem gesunden Probanden, (b) einem Kosmonauten und (c) einem Herzkranken, sowie (d) für einen Datensatz, bei dem die Inkremente gemischt wurden (aus [IVANOVetal-99a]).

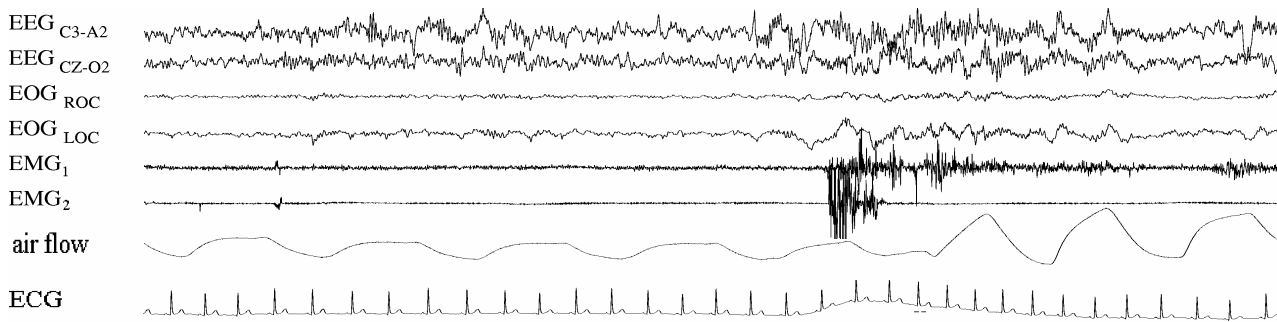
gieren mit der Zeit  $t$ , und zwar für große  $t$  proportional zu  $t^{\alpha-1}$ . Da die Reihe der Zeitintervalle zwischen aufeinander folgenden Herzschlägen aber nicht tatsächlich divergiert (sonst würde der Proband sterben), können die Exponenten nicht asymptotisch für große Zeitskalen  $s$  gelten.

Stationär ist hingegen die Reihe der Inkremente zwischen aufeinander folgenden Zeitintervallen, und daher basiert die Interpretation von Goldberger et al. [PENGetal-93, PENGetal-95, BULDYREVetal-95, HOetal-97, PENGetal-98, BULDYREVetal-98, AMARALetal-98] auf einer Betrachtung dieser Inkremente. Das Fluktuationsverhalten der Inkremente wird nach Abschnitt II.A.2.e durch  $\alpha' = \alpha - 1$  charakterisiert, denn einmal weniger Kumulieren (Aufsummieren) verringert die Fluktuationsexponenten um 1. Da dann  $\alpha' < 0.5$  gilt, sprechen Goldberger et al. von *Antikorrelationen* im Herzrhythmus. Diese Antikorrelationen sind nötig, um einen stationären Zustand zu bewahren; dafür müsste sogar  $\alpha' < 0$  werden. Es fällt auf, dass die Antikorrelationen bei Gesunden ( $\alpha'_2 = 0.00$ ) deutlich stärker sind als bei Herzkranken ( $\alpha'_2 = 0.13$ ). Damit würden stärkere Antikorrelationen eine bessere Regulation des Herzschlags anzeigen. Mir erscheint diese auf den Inkrementen basierende Interpretation allerdings etwas unglücklich, zumal fast alle Langzeit-Fluktuationsexponenten kleiner als 1 sind und damit Stationarität anzeigen, sobald man die Messdatenreihen nach verschiedenen Aktivitätsphasen getrennt analysiert.

## II.B.2. Unterscheidung verschiedener Aktivitäts- und Schlafphasen

### a) Herzrhythmus am Tag und in Nacht, sowie bei Ruhe und bei Training

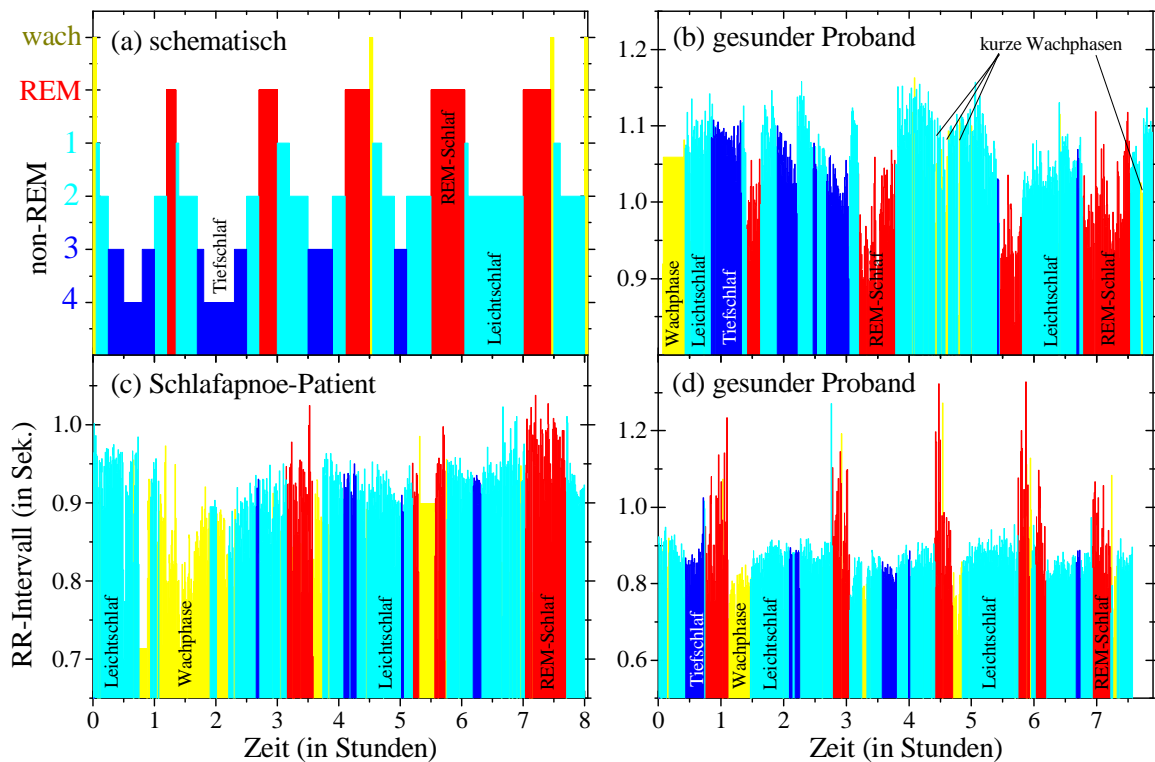
Ein erster Schritt in Richtung auf eine getrennte Analyse des Herzrhythmus in verschiedenen Aktivitätsphasen wurde 1999 unternommen mit der Aufteilung der 24-Stunden Datenreihen in Tag und Nacht [IVANOVetal-99a]. Da keine Information über die tatsächliche Aktivität der Probanden vorlag, wurden die 6 Stunden zwischen Mitternacht und 6 Uhr morgens als Nachtphase und die 6 Stunden von 12 Uhr mittags bis 18 Uhr abends als Tagphase gewertet. Die getrennte Analyse dieser 6-Stunden Segmente mittels DFA1 erbrachte, dass die Langzeit-Korrelationen in der Nacht schwächer sind als am Tag. Im Einzelnen wurden für gesunde Probanden folgende mittleren DFA1-Fluktuationsexponenten im Skalenbereich von 100 bis 2000 Herzschlägen (entsprechend  $\alpha_2$  bei [PENGetal-95]) gefunden:  $\alpha = 1.05 \pm 0.07$  am Tag und  $0.85 \pm 0.10$  in der Nacht. Dieses Ergebnis zeigt, dass das autonome System in seinen Regulationseigenschaften durchaus zwischen Tag- und



**Abb. II.B.3:** Typischer Verlauf der Aufzeichnungen einer kardiorespiratorischen Polysomnografie (Schlafstadien-Analyse) im Schlaflabor. Gezeigt ist ein 30 Sekunden-Segment mit EEG (Elektro-Encephalo-Gramm), EOG (Elektro-Okulo-Gramm), EMG (Elektro-Myo-Gramm), Atmung (registriert mit einem Thermistor vor der Nase) und EKG (Elektro-Kardio-Gramm, englisch: ECG). Auf solchen Segmenten basiert die manuelle Schlafstadien-Auswertung (aus [PENZEL-95]).

Nachtverhalten unterscheidet. Der Unterschied ist nicht nur für die Mittelwerte, sondern auch für jeden einzelnen Probanden-Datensatz signifikant; ein typisches Beispiel zeigt Abb. II.B.2(a). Für Kosmonauten der Mir Raumstation (Abb. II.B.2(b)) ergeben sich praktisch identische Werte, wenn deren Schlaf- und Wachperioden entsprechend berücksichtigt wurden, obwohl die Kosmonauten besonderem Stress und fehlender Gravitation ausgesetzt sind. Das bedeutet, dass die Unterschiede nicht im Tag-Nacht-Rhythmus, sondern im Wach-Schlaf-Rhythmus begründet liegen. Die Daten von Patienten mit Herzinsuffizienz (Abb. II.B.2(c)) zeigen  $\alpha = 1.20 \pm 0.09$  am Tag und  $0.95 \pm 0.15$  in der Nacht. Auch hier gibt es also die charakteristischen Tag-Nacht Unterschiede, wobei die Exponenten insgesamt – wie schon von [PENGETAL-95] gezeigt – größer sind. Warum allerdings die Regelung der Herzschlag-Inkrementen bei den Herzkranken im Schlaf stärker antikorreliert sein sollte, und damit entsprechend der Interpretation von Goldberger et al. gesünder als bei Gesunden am Tag, ist nicht nachvollziehbar.

Bei den Analysen von [IVANOVetal-99a] bleibt der Wert  $\alpha = 1.05$  für den Tag-Teil immer noch im nichtstationären Bereich, und man fragt sich, ob nicht durch eine weitere Aufteilung der Datenreihe entsprechend den unterschiedlichen Aktivitätsphasen Werte im stationären Bereich  $\alpha < 1$  erhalten werden können. Bei einer Untersuchung in dieser Richtung [KARASIKetal-02] wurde das Fluktuationsverhalten des Herzrhythmus während je zwei vorgegebenen körperlichen Trainings-, Erholungs- und Ruhephasen (Dauer 6 bis 10 Minuten) verglichen. Obwohl die Skalenbereiche für die Fluktuationsexponenten wieder etwas anders gewählt wurden ( $8 \leq s \leq 14$  Herzschläge für  $\alpha_1$  und  $30 \leq s \leq 300$  Herzschläge für  $\alpha_2$ ), kann man erkennen, dass die Unterschiede zwischen Ruhe- und Trainingsperioden deutlich größer sind als die im Vergleich von Gesunden und Herzinsuffizienz-Kranken gefundenen; dabei entspricht die Trainingsphase tendenziell den Herzkranken und die Ruhephase den Gesunden in der Nacht. Die Resultate im Einzelnen lauten  $\alpha_1 = 1.43 \pm 0.30$  bzw.  $\alpha_2 = 0.77 \pm 0.20$  in Ruhe und  $\alpha_1 = -0.09 \pm 0.30$  bzw.  $\alpha_2 = 1.09 \pm 0.17$  während des Trainings. Das kann man so verstehen, dass das Herz-Kreislauf-System der Herzkranken ständig in einer Art von Stresszustand ist wie er bei Gesunden nur während des körperlichen Trainings auftritt. Übrigens hängen die Ergebnisse für die Fluktuationsexponenten nicht signifikant davon ab, ob z.B. eine Ruhephase vor oder nach dem Training analysiert wird, obwohl die durchschnittliche Herzfrequenz nach dem Training noch deutlich erhöht bleibt. Es ist anzumerken, dass zur Ermittlung der negativen  $\alpha_1$ -Werte im Training die DFA mit doppelter Summierung eingesetzt werden muss. Dass das Training wegen  $\alpha_2 > 1$  als nichtstationärer Zustand aufgefasst werden muss, verwundert nicht, denn die Probanden können das Training auch nur eine gewisse Zeit durchhalten. In den Ruhephasen ist  $\alpha_2$  deutlich kleiner als 1 und sogar kleiner als der nächtliche Mittelwert  $0.85 \pm 0.10$  von [IVANOVetal-99a]. Dieses Ergebnis legt nahe, auch die Schlafphase genauer zu betrachten.



**Abb. II.B.4:** (a) Schematische Darstellung der typischen Schlafphasen im Verlauf einer Nacht (Somnogramm), wobei die non-REM Stadien 1 und 2 zu Leichtschlaf und die Stadien 3 und 4 zu Tiefschlaf zusammengefasst werden. (b)-(d) Ermittelter Schlafphasenverlauf für zwei gesunde Probanden (b)+(d) sowie einen Schlafapnoe-Patienten (c), der längere Wachphasen hat und zu wenig Tiefschlaf. Die Höhe der (farbigen) Balken in (b)-(d) gibt die 30 Sekunden-Mittelwerte der Herzfrequenz an; in (a) hat sie keine Bedeutung. Man erkennt, dass der Herzschlag beim Probanden (b) im REM-Schlaf beschleunigt ist, während er beim Probanden (d) verlangsamt ist.

## b) Schlafstadien

Im Schlaf wechseln aktive und weniger aktive Phasen ab [BERGER-92]. Die Schlafstadien lassen sich hauptsächlich durch Muster und Wellen im Elektro-Encephalo-Gramm (EEG, verschiedene elektrische Ableitungen am Hinterkopf) unterscheiden, für deren Klassifikation ein international einheitliches Handbuch [RECHTSCHAFFEN&KALES-68] benutzt wird. Abbildung II.B.3 zeigt Beispiele für die gemessenen elektrophysiologischen Signale. Danach unterscheidet man vier so genannte Nicht-REM Stadien und den REM-Schlaf (REM = „rapid eye movement“). Die Nachruhe beginnt bei Gesunden mit dem Leichtschlaf, Stadium 1, aus dem man noch sehr leicht aufweckbar ist, siehe Abb. II.B.4(a). Darauf folgt der Leichtschlaf, Stadium 2, das mit Abstand häufigste Schlafstadium. Daran schließt sich der Tiefschlaf mit den Stadien 3 und 4 an, dem vor allem eine physische Erholungsfunktion zugeschrieben wird. Auf den Tiefschlaf folgt oft der REM-Schlaf, der eine Lähmung der meisten Muskeln aber rasche Bewegungen der (geschlossenen) Augen mit sich bringt. Zur Detektion werden das Elektro-Okulo-Gramm (EOG), eine elektrische Ableitung der Potenziale der Augenmuskeln, und das Elektro-Myo-Gramm (EMG, meist am Kinnmuskel gemessen) analysiert. Vereinfachend kann der REM-Schlaf dem Traumschlaf gleich gesetzt werden; er dient überwiegend der psychischen Erholung und hat Funktionen bei der Gedächtnisverarbeitung.

Der geschilderte Ablauf der Schlafstadien dauert etwa 90 Minuten und wiederholt sich vier bis sechs Mal pro Nacht. Dabei findet eine Verschiebung der Anteile der Schlafstadien derart statt, dass gegen Schlafbeginn der Tiefschlaf und gegen Schlafende der REM-Schlaf überwiegt. Allerdings ist der Ablauf meist nicht so systematisch. Drei reale Beispiele von Schlafstadien-Profilen

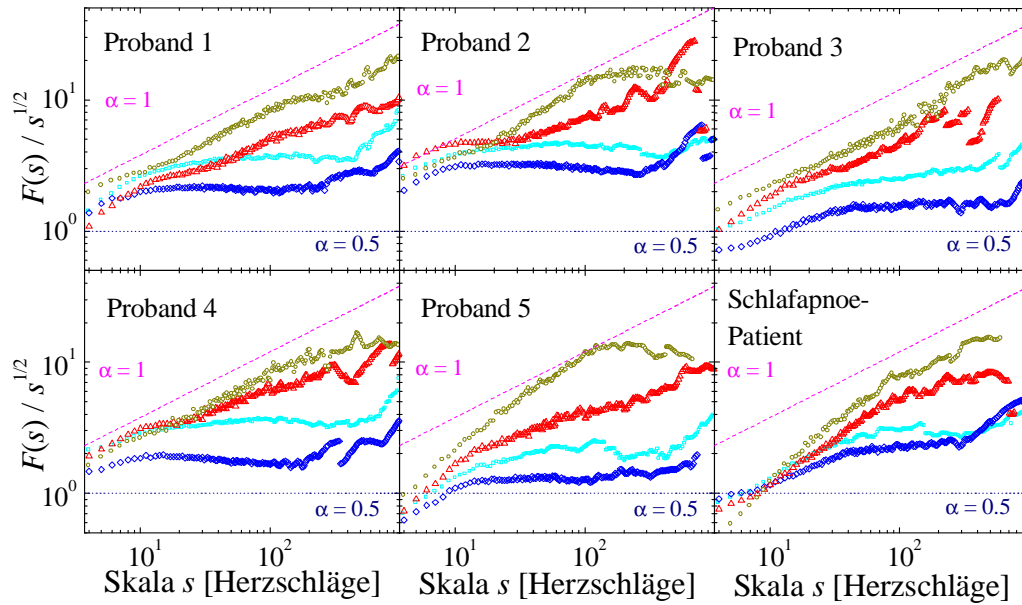
(Somnogrammen) zeigt Abb. II.B.4(b) bis (d). Man erkennt, dass auch kurze Wachphasen in der Nacht auftreten, die meist vom Probanden nicht bemerkt werden; letztere heißen „Arousals“. Bei der Analyse von Somnogrammen ist zu beachten, dass die Klassifikation immer in Segmenten von 30 Sekunden Dauer erfolgt, und dass beachtliche Unterschiede zwischen den Ergebnissen verschiedener Auswerter bestehen [WITHNEYetal-98, NORMANetal-00, KUNZetal-00, PENZEetal-03c]. Abhängig von den Schlafstadien und dem Alter der Probanden liegt die Übereinstimmung zwischen 30% und 90% [KUNZetal-00], wobei insbesondere bei Leichtschlaf 1 im Mittel nur 38%, sonst aber typischerweise 70% Übereinstimmung besteht.

Die typische Dauer und Abfolge der Schlafstadien und Wachphasen in der Nacht wurde kürzlich anhand von 300 Somnogrammen untersucht [LOetal-01, LOetal-03]. Gesunde Probanden verbringen demnach 57% der Zeit im Leichtschlaf, 12% im Tiefschlaf, 18% im REM-Schlaf und 11% in nächtlichen Wachphasen (2% nicht auswertbar). Die Dauern  $t$  aller Schlafphasen folgen in guter Näherung einer Exponentialverteilung  $P(t) \sim \exp[-t/t_c]$  mit praktisch gleichen charakteristischen Zeiten  $t_c$  zwischen 9 und 11 Minuten für Leicht-, Tief- und REM-Schlaf. Das bedeutet, dass typischerweise mehrere hundert Herzschläge zu jeweils einer Schlafphase gehören. Hingegen sind die Dauern der nächtlichen Wachphasen nicht exponentiell verteilt, sondern sie werden erstaunlich gut durch eine Potenzgesetz-Verteilung  $P(t) \sim t^{-\delta}$  beschrieben mit Exponenten  $\delta$  um 1.1 für gesunde Probanden und 1.3 für Schlafapnoe-Patienten.

Mit den Schlafstadien gehen Veränderungen der Körperfunktionen einschließlich der autonomen Funktionen einher [BURGESSetal-97]. Die Herzfrequenz sinkt und erreicht ihre niedrigsten Werte im Tiefschlaf [GEORGE&KRYGER-85]. Im REM-Schlaf steigt sie wieder auf Werte, die fast dem Wachen entsprechen [ZEMAITYTEetal-86]; es gibt aber Ausnahmen (siehe Abb. II.B.4(d)). Korrelationen direkt aufeinander folgender Herzschläge, d.h. extreme Kurzzeitkorrelationen wurden mit Hilfe von Poincaré-Plots untersucht [RAETZ-91]. Aus den Unterschieden zwischen REM und Nicht-REM Schlaf konnte schon damit auf die Existenz unterschiedlicher Regulation in den Schlafstadien geschlossen werden. Im nächsten Abschnitt geht es um die Veränderungen des Langzeit-Korrelationsverhaltens in den Schlafstadien.

### c) Herzrhythmus in den verschiedenen Schlafstadien

Um die Herzschlags-Fluktuationen getrennt in den Schlafstadien zu analysieren, muss der Datensatz der Zeitintervalle  $t_i$  zwischen aufeinander folgenden Herzschlägen zunächst entsprechend der von Auswertern im Schlaflabor bestimmten Phasen aufgeteilt werden. Da die Klassifikation immer in Segmenten von 30 Sekunden Dauer erfolgt, und beachtliche Unterschiede zwischen den von verschiedenen Auswertern durchgeführten Klassifikationen auftreten, habe ich nur Schlafstadien verwendet, die länger als 3 Minuten (ca. 200 Herzschläge) andauern und davon immer die ersten und die letzten 45 Sekunden ignoriert. Auf diese Art wird ein möglicherweise störender Einfluss von Übergängen zwischen verschiedenen Schlafstadien verhindert. Da die Schlafstadien 1 und 2 (beides Leichtschlaf) sowie 3 und 4 (beides Tiefschlaf) physiologisch sehr ähnlich sind, habe ich Übergänge zwischen 1 und 2 sowie zwischen 3 und 4 vernachlässigt, um längere zusammenhängende Abschnitte für die Analyse der Langzeitkorrelationen zu erhalten. Trotzdem sind die einzelnen Schlafstadien noch zu kurz für eine getrennte Analyse. Daher habe ich alle Leichtschlaf-, alle Tiefschlaf-, alle REM- und alle Wachphasen einer jeden Nacht zusammen analysiert. Das geschah nicht durch Aneinanderhängen der Abschnitte, sondern dadurch, dass im Zuge der DFA-Prozedur für jede Skala  $s$  alle möglichen Segmente z.B. aus allen verfügbaren Leichtschlaf-Stadien der Nacht betrachtet wurden, um damit die Leichtschlaf-Fluktuationsfunktion  $F_{LS}(s)$  zu berechnen. Entsprechend erhält man die DFA-Fluktuationsfunktionen für Tiefschlaf, REM-Schlaf und Wachphasen. Da die Anzahl der Segmente ungefähr proportional zur Länge der einzelnen Stadien ist, ist auch gewährleistet, dass die längeren Stadien ein entsprechend höheres Gewicht im Mittelwert bekom-

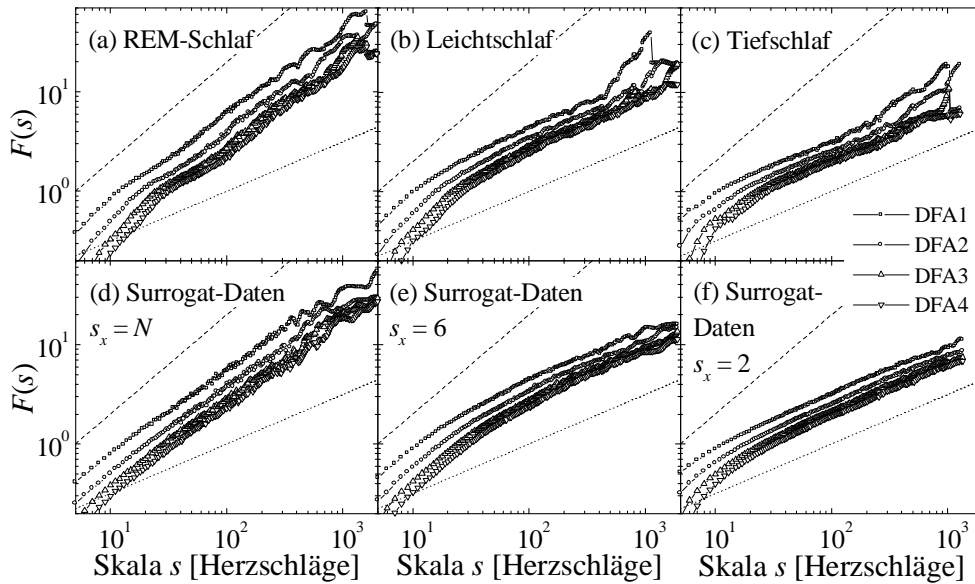


**Abb. II.B.5:** DFA2-Auswertung der Herzschlag-Fluktuationen in den Schlafstadien REM ( $\triangle$ , rot), Leichtschlaf ( $\square$ , hellblau) und Tiefschlaf ( $\diamond$ , dunkelblau) sowie während der nächtlichen Wachphasen ( $\circ$ , dunkelgelb) für fünf gesunde Probanden und einen Schlafapnoe-Patienten. Die DFA2-Fluktuationsfunktionen  $F(s)$  wurden durch  $s^{1/2}$  dividiert und doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  aufgetragen, so dass ein waagerechter Verlauf unkorreliertes Verhalten anzeigt, während eine positive Steigung auf Langzeitkorrelationen hindeutet. Die den Exponenten  $\alpha = 0.5$  und  $1.0$  entsprechenden Geraden sind zum Vergleich gezeigt.

men. Phasen, die kürzer als die betrachtete Skalenlänge  $s$  sind, können nicht berücksichtigt werden. Daher können die Analyseergebnisse nur bis zur typischen Schlafstadienlänge sinnvoll interpretiert werden; das sind etwa 7 Minuten oder ca. 500 Herzschläge. Man benötigt wegen der vielen Schlafstadien aber nicht den Faktor  $1/4$  wie sonst bei der DFA (vgl. Abschnitt II.A.2.a).

Vor der eigentlichen Analyse muss sichergestellt werden, dass die Messdaten (i) keine Artefakte der Messung und (ii) keine arrhythmischen Herzschläge enthalten, wie sie bei Erkrankungen oder Verletzungen des Herzmuskels oder des Reizleitungssystems, seltener auch bei Gesunden (als „Herzstolpern“) vorkommen. Dazu wurde ein einfacher Test angewendet, bei dem alle Herzschlagintervalle, die entweder (i) länger als 1.5 Sekunden oder (ii) kürzer als 0.33 Sekunden sind oder sich (iii) um mehr als 0.67 Sekunden vom vorhergehenden Intervall unterscheiden, als mögliche Artefakte klassifiziert und herausgeschnitten werden. Zusätzlich wurden alle Phasen weggelassen, bei denen mehr als 1% der Intervalle aus diesen Gründen herausgeschnitten wurden.

In der ersten Studie [PENZE*etal*-99, BUNDE*etal*-00] haben wir die Herzschlagdaten von 15 gesunden Probanden (Alter  $33 \pm 6$  Jahre) während je zwei Nächten getrennt nach Schlafstadien analysiert; die Schlafzeit betrug  $7.5 \pm 0.75$  Stunden pro Nacht. Um die Statistik zu verbessern wurden zusätzlich 47 Datensätze von 26 Patienten (Alter  $48 \pm 9$  Jahre) mit leichter Schlafapnoe (siehe nächster Abschnitt) analysiert, bei denen diese nächtliche Atmungsstörung noch keine Veränderungen im Schlafrhythmus verursacht hatte. Beispielhafte Ergebnisse für die DFA2-Fluktuationsfunktionen zeigt Abb. II.B.5. Man erkennt, dass die Kurven für Tief- und auch für Leichtschlaf auf großen Zeitskalen ungefähr waagerecht verlaufen, was ein bis auf Kurzzeit-Korrelationen unkorreliertes Verhalten anzeigt. Im Gegensatz dazu sind bei allen Probanden und Patienten im REM-Schlaf und auch in den nächtlichen Wachphasen Langzeitkorrelationen zu sehen. Im Skalenbereich von 50 bis 500 Herzschlägen liegen die Fluktuationsexponenten  $\alpha$  für REM-Schlaf in der Nähe von 0.85, was einem Korrelationsexponenten  $\gamma$  von ungefähr 0.7 entspricht. Auch für die nächtlichen Wachphasen ist der Wert  $\alpha \approx 0.95$  hoch aber noch im stationären Bereich. Im Gegensatz dazu liegt der Fluktuationsexponent während der Leicht- und Tiefschlafphasen nahe 0.5, und nur auf sehr kurzen



**Abb. II.B.6:** Vergleich der Ergebnisse von DFA1 bis DFA4 (von oben nach unten) der schlafstadienbezogenen Herzdatenauswertung bei einem gesunden Probanden (a)-(c) und für Surrogat-Daten (d)-(f). Während im REM-Schlaf bei diesem Probanden schon die DFA1 alle Nichtstationaritäten beseitigen kann, erkennt man in Leicht- und Tiefschlaf bei DFA1 noch einen stärkeren Anstieg auf großen Skalen, der von Nichtstationaritäten verursacht wird, so dass hier mindestens DFA2 oder DFA3 verwendet werden muss. Die (monofraktalen) Surrogat-Daten wurden mit der Fourier-Filter-Methode mit Langzeit-Korrelationen  $\alpha = 0.85$  ( $\beta = 0.7$ ) erzeugt (d, für REM-Schlaf) und für die non-REM Schlafstadien in Blöcke zu je  $s_x = 6$  (e, für Leichtschlaf) bzw. 2 (f, für Tiefschlaf) Datenpunkten aufgeteilt; die Reihenfolge dieser Blöcke wurde dann gemischt, so dass nur Kurzzeitkorrelationen auf Zeitskalen unter  $s_x$  bleiben. Die simulierten Schlafstadien-Längen entsprechen exakt den echten Längen für den in (a)-(c) betrachteten Probanden. Die gestrichelten Geraden haben die Steigung 1.0 und die gepunkteten Geraden die Steigung 0.5 (nach [BUNDEetal-00]).

Zeitskalen treten deutlich höhere Werte auf, die Kurzzeit-Korrelationen anzeigen. Diese Kurzzeitkorrelationen sind auf die Kopplung an die Atmung zurückzuführen, die sich als Sinus-Arrhythmie manifestiert und den Herzschlag auf Zeitskalen von ca. 3-5 Herzschlägen beeinflusst.

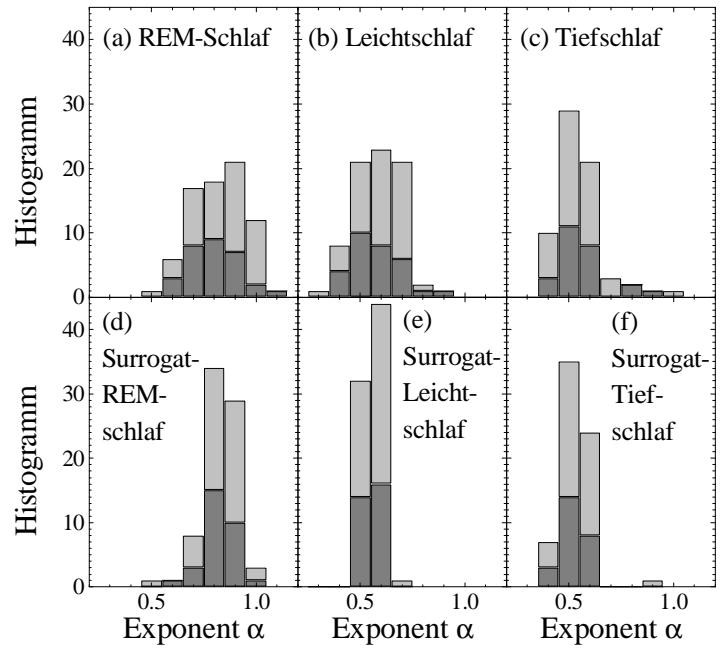
Das bedeutet, dass die Fluktuationen des Herzrhythmus zwischen den einzelnen Schlafstadien stärkere Unterschiede zeigen als zwischen gesunden Probanden und Patienten mit Herzinsuffizienz (siehe Abschnitt II.B.1). Erstmals wurden Phasen nachgewiesen in denen der menschliche Herzschlag bis auf Kurzzeitkorrelationen praktisch unkorreliert ist, d.h. die Fluktuationen kein „Gedächtnis“ haben. Für die non-REM Stadien erscheint die Beschreibung durch antikorrelierte Inkremente nicht sinnvoll, denn warum sollte man unkorrelierte Zufallszahlen als Daten mit extrem stark antikorrelierten Inkrementen beschreiben. Auch für das Verhalten im REM-Schlaf erscheint mir die Interpretation als langreichweitig korrelierte Reihe sinnvoller, denn alle Exponenten sind im stationären Bereich  $\alpha < 1$ . Die Ähnlichkeit zwischen den Wachphasen und dem REM-Schlaf ist auffällig. Zwar ist der REM-Schlaf physiologisch wesentlich verschieden vom Wachen, weil fast alle willkürlichen (vom somatischen Nervensystem innervierten) Muskeln gehemmt sind, aber in Bezug auf das autonome Nervensystem sind die Unterschiede offensichtlich gering. Da der REM-Schlaf oft mit dem Traumschlaf gleichgesetzt wird, liegt es nahe, die Langzeitkorrelationen auf das Träumen oder allgemeiner gesprochen auf eine verstärkte kortikale Beeinflussung, d.h. eine verstärkte Hirnaktivität, zurückzuführen.

Um sicher zu gehen, dass die Ergebnisse nicht durch Trends oder andere Nichtstationaritäten verfälscht werden, haben wir eine vergleichende Untersuchung mit DFA1 bis DFA4 durchgeführt, siehe Abb. II.B.6. Man erkennt, dass in dem gezeigten typischen Beispiel nur die DFA1- und DFA2-Ergebnisse (jeweils oberste zwei Kurven) im Leicht- und Tiefschlaf von Trends beeinflusst werden,

während die DFA3 und im REM auch schon DFA1 und DFA2 ein gleichmäßiges Skalenverhalten bis hin zu großen Skalen  $s$  aufweisen. Um die Interpretation zu untermauern, haben wir mittels der Fourier-Filter-Methode realistische Surrogat-Daten erzeugt, für die die DFA-Ergebnisse direkt mit denen der Originaldaten verglichen werden können, siehe Abb. II.B.6(d)-(f). Für den REM-Schlaf ergeben einfache langreichweitig korrelierte Zufallszahlen mit  $\alpha = 0.85$  ( $\beta = 0.7$ ) ein sehr ähnliches Verhalten wie die echten Daten bis auf leichte Abweichungen im Bereich der Kurzzeitkorrelationen. Durch einen simulierten Übergang zu unkorreliertem Verhalten für  $s > s_{\times}$  lässt sich auch die Übergangszeit  $s_{\times}$  bestimmen, nach der die Korrelationen in den non-REM Stadien abklingen; sie beträgt etwa 6 Herzschläge für Leichtschlaf und nur 2 Herzschläge für Tiefschlaf. Demnach ist das „Gedächtnis“ des Herzrhythmus im Tiefschlaf sehr verkürzt, und beide non-REM Schlafstadien haben eine physiologisch vom REM-Schlaf verschiedene Regelung des Herzrhythmus.

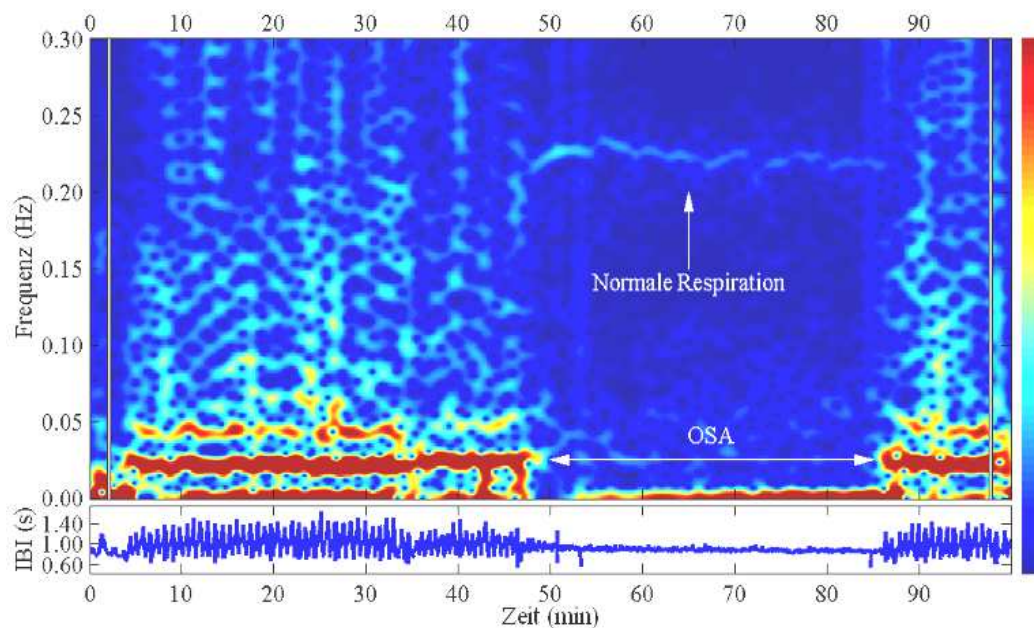
Um einen Überblick über alle untersuchten Probanden und Patienten

zu geben, zeigt Abb. II.B.7 Histogramme für die DFA2-Fluktuationsexponenten  $\alpha_2$ , und zwar in der oberen Reihe für die echten Herzschlagdaten und in der unteren Reihe für die wie bei Abb. II.B.6 beschrieben für jeden einzelnen Probanden mit den individuellen Schlafstadienlängen erzeugten Surrogat-Daten. Man erkennt, dass bei allen Probanden und Patienten die Korrelationen nur im REM-Schlaf ausgeprägt sind, und dass das entsprechende Histogramm um 0.85 zentriert ist, während die non-REM Histogramme um 0.5 bis 0.6 zentriert sind. Das bestätigt die oben aus einzelnen Datensätzen abgeleiteten Aussagen. Im Einzelnen sind die Mittelwerte der Fluktuationsexponenten für alle gesunden Probanden im Skalenbereich von  $70 \leq s \leq 300$  Herzschlägen im Tiefschlaf  $\alpha_2 = 0.55 \pm 0.11$ , im Leichtschlaf  $\alpha_2 = 0.60 \pm 0.13$ , im REM-Schlaf  $\alpha_2 = 0.81 \pm 0.13$  und in den nächtlichen Wachphasen  $\alpha_2 = 0.94 \pm 0.20$ . Da die stärkeren Korrelationen in dem Fluktuationsverhalten eines zusammengesetzten Datensatzes stärker durchschlagen, findet man für die ganze Nacht Werte des Fluktuationsexponenten in der Nähe von  $\alpha_2 = 0.8$  in Übereinstimmung mit [IVANOVetal-99a]. Einen wesentlichen Beitrag zu diesem Ergebnis liefern allerdings auch die starken zusätzlichen Fluktuationen, die an den Übergängen zwischen den Schlafstadien auftreten.



**Abb. II.B.7:** Histogramme für die im Bereich  $70 \leq s \leq 300$  Herzschläge ermittelten DFA2-Fluktuationsexponenten  $\alpha_2$  für die Herzschlagdaten von 15 gesunden Probanden (dunkelgrau) und 26 Patienten mit leichter Schlafapnoe (hellgrau) von je zwei Nächten im (a) REM-Schlaf, (b) Leichtschlaf und (c) Tiefschlaf. Während das Histogramm in (a) um 0.85 zentriert ist, sind die Ergebnisse in den non-REM Stadien nicht von unkorreliertem Verhalten  $\alpha \approx 0.5$  unterscheidbar. In (e)-(f) sind die Ergebnisse für entsprechende Surrogatdatenreihen gezeigt, bei denen die Längen der Schlafstadien exakt dem Original entsprechen. Man erkennt, dass die Breite des Histogramms für Tiefschlaf (c)+(f) weitgehend durch die Kürze der Schlafstadien verursacht ist, die typischerweise nur 12% der Nacht ausmachen, während im REM- und Leichtschlaf noch eine zusätzliche Variation hinzukommt. Insgesamt stimmt schon das einfache Surrogat-Modell für alle Patienten und Probanden erstaunlich gut (nach [BUNDEetal-00]).





**Abb. II.B.8:** Spektralanalyse der Herzfrequenz eines Schlafapnoe-Patienten. Gezeigt ist farbkodiert die spektrale Leistung in Fenstern der Breite 30 Sekunden in Abhängigkeit von der Zeit. Man erkennt die periodische Variation des Herzschlags durch die normale Atmung (Sinus-Arrhythmie) im Bereich von 0.2 bis 0.25 Hz in der Phase der normalen Respiration und durch die Schlafapnoen verursachte Herzschlag-Periodizitäten im Bereich unter 0.05 Hz in den Phasen mit Schlafapnoen, d.h. Atemstillständen im Schlaf. Die geglätteten Herzschlagintervalle (IBI = inter beat interval) sind unten dargestellt (von T. Penzel).

#### d) Atmungsstörung „Schlafapnoe“ und systematischer Vergleich der Ergebnisse von DFA und Standard-Analyse der Herzfrequenz-Variabilität

Da der Schlaf fast ein Drittel des menschlichen Lebens einnimmt, ist es nicht erstaunlich, dass zahlreiche Erkrankungen ihre Ursache im Schlaf haben. Neben der Insomnie, der Schlaflosigkeit, ist die Schlafapnoe die häufigste Schlafstörung [PENZEL-95]; etwa vier Prozent der erwachsenen Männer leiden darunter. Die Schlafapnoe ist durch sich wiederholende nächtliche Atemstillstände oder Atemwegsversperrungen von 40 bis 60 Sekunden Dauer gekennzeichnet, die viele hundert Mal auftreten und enorme Schwankungen des Blutsauerstoffgehalts und der Herzfrequenz zur Folge haben. Man vermutet, dass die schlafbezogenen Atmungsstörungen ein wichtiger Risikofaktor für kardiovaskuläre Erkrankungen wie Schlaganfall und Herzinfarkt darstellen. Bei jedem einzelnen Atemstillstand (Apnoe) sinkt der Sauerstoffgehalt im Blut ab, bis die Chemorezeptoren Alarm schlagen und ein Aufwachen auslösen, welches aber unterhalb der Wahrnehmungsschwelle liegt. Diese zentralnervösen Aktivierungen nennt man Arousal. Durch sie wird die natürliche Schlafstruktur zerstört und der Erholungswert des Schlafes geht verloren [PETER-92]. Die Ausprägung der Erkrankung „Schlafapnoe“ wird durch den so genannten Apnoe-Hypopnoe-Index (AHI) beschrieben, der die Anzahl der Atemstillstände oder fast-Atemstillstände pro Stunde angibt.

Die Ergebnisse eines Wettbewerbs zur Erkennung von Schlafapnoen aus dem EKG, der im Rahmen der Internet-Datenbank „PhysioNet“ vor kurzem durchgeführt wurde [PENZEletal-02], zeigen, dass Schlafapnoen einen deutlichen Einfluss auf die Herzfrequenz haben und sich mit verschiedenen Methoden mit großer Sicherheit im EKG erkennen lassen. Schon im Frequenzspektrum des Herzschlags lassen sich die Apnoen deutlich sehen, wie Abb. II.B.8 zeigt. Vor allem die Beschleunigung des Herzschlags gegen Ende einer solchen Atempause ist sehr auffällig. Das Skalenverhalten der Fluktuationen und Korrelationen im Herzrhythmus wird hingegen überraschend wenig von den Schlafapnoen verändert [PENZEletal-99, LIEBOVITCHetal-02, PENZEletal-03b]. Obwohl der Einfluss der Atmung auf den Herzschlag bei diesen Patienten etwas erhöht ist, die Schlafstadien



zerstückelt werden und (in einem fortgeschrittenen Stadium der Erkrankung) der Tiefschlaf deutlich reduziert ist, konnten wir in den einzelnen Schlafstadien praktisch das gleiche Korrelationsverhalten des Herzschlags nachweisen wie bei Gesunden.

In den Histogrammen Abb. II.B.7 wurden bereits die Ergebnisse für Patienten mit leichter Schlafapnoe mit den Ergebnissen für Gesunde zusammen gezeigt; man erkennt keine signifikanten Unterschiede in den Verteilungen. Auch für Patienten mit stärkeren Apnoen ( $AHI > 40/h$ ) bleiben die Abweichungen bei fast allen Schlaf- (und Wach-) Stadien innerhalb der Fehlerbalken. Allerdings nimmt  $\alpha_2$  im Leichtschlaf systematisch mit zunehmender Stärke der Schlafapnoe ab, und zwar von 0.60 über 0.54 auf 0.43. Das ist auf die zusätzlichen Schwankungen des Herzrhythmus mit den periodisch auftretenden Apnoen (siehe auch Abb. II.B.8) zurückzuführen, denn diese Periodizitäten auf Zeitskalen von ca. 50 Sekunden (0.02 Hz) erhöhen die Fluktuationen am Anfang des  $\alpha_2$ -Bereichs (70 bis 300 Herzschläge) und verringern so dort die Steigung der Fluktuationsfunktion; entsprechend ist die Steigung im  $\alpha_1$ -Bereich (10 bis 40 Herzschläge) etwas erhöht.

Standardmäßig [TASKFORCE-96] erfolgt die Analyse der Herzfrequenz-Variabilität nicht durch DFA, sondern durch Spektralanalyse. Dabei wird das Ausgangssignal „Herzfrequenz“ zuerst in Segmente von 5 Minuten geteilt und dann neu digitalisiert, so dass in jedem Segment 1024 zeitlich äquidistante Punkte liegen. Die Herzfrequenz wird dabei zwischen den ca. 300-400 einzelnen Herzschlägen jedes Segments linear interpoliert. Anschließend wird die spektrale Leistung in drei fest definierten Frequenzbändern, HF (high frequency,  $0.15 \text{ Hz} < f \leq 0.4 \text{ Hz}$ ), LF (low frequency,  $0.04 \text{ Hz} < f \leq 0.15 \text{ Hz}$ ) und VLF (very low frequency,  $0.0033 \text{ Hz} < f \leq 0.04 \text{ Hz}$ ) bestimmt [TASKFORCE-96]. Frequenzen unter 0.0033 Hz werden dem ULF-Band (ultra low frequency) zugerechnet, aber meist nicht ausgewertet, weil dafür die 5 Minuten-Segmente nicht reichen. Zusätzlich berechnet man das Verhältnis der spektralen Leistung im LF und HF-Band.

Es stellt sich nun die Frage, welche Methoden oder konkreter welche der Parameter am besten für eine Unterscheidung der vier Schlafstadien-Klassen (Leicht, Tief- und REM-Schlaf sowie Wachphasen) bzw. der drei Schlafapnoe-Klassen (gesund,  $AHI \leq 40/h$ ,  $AHI > 40/h$ ) geeignet sind. Dazu haben wir eine Diskriminanz-Analyse [LITZ-00] durchgeführt [PENZEletal-03a]. Dabei waren die Standard-Herzfrequenz-Variabilitäts-Parameter HF, LF, VLF und LF/HF auf der einen und die beiden Fluktuationsexponenten  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  auf der anderen Seite Ausgangsvariable für den Vergleich, und zwar jeweils einmal mit und einmal ohne Intervall-Mittelwert und Standardabweichung (SDNN). Das Ziel der Diskriminanz-Analyse ist es, die Datensätze in Bezug auf die Zielvariablen einzuordnen, die hier die 4 Schlafstadien-Klassen und die 3 Schlafapnoe-Klassen, also insgesamt 12 mögliche Kategorien waren. Mit den beiden DFA-Parametern gelang eine korrekte Zuordnung zu den Schlafstadien-Klassen in 78% der Fälle, wobei der Wert noch leicht auf 85% anstieg, wenn Intervall-Mittelwert und Standardabweichung hinzugenommen wurden. Für die vier Parameter der Standard-Spektralanalyse waren diese Werte mit 51% bzw. 55% deutlich geringer. Demnach sind die Skalenexponenten der DFA besser zur Unterscheidung von Schlafstadien ausgehend vom EKG geeignet als die Standard-Spektralanalyse. Deutlich geringer sind die Unterschiede bei der Zuordnung zu den drei Schlafapnoe-Klassen. Hier erreichten die beiden DFA-Parameter ohne Mittelwert und Standardabweichung 60% korrekte Zuordnungen und mit diesen beiden Variablen 74%, während die vier Spektralanalyse-Parameter auf 64% bzw. 70% kamen. Insbesondere die Standardabweichung trägt wesentliche Information über den Schweregrad der Schlafapnoe, die unabhängig von den DFA-Exponenten ist, aber nicht unabhängig von den Spektralanalyse-Parametern.

Insgesamt sind die „relativen“ DFA-Exponenten, die Fluktuationen auf verschiedenen Zeitskalen in Beziehung zueinander setzen, aussagekräftiger als die „absoluten“ Standard-Parameter der Herzfrequenz-Variabilität. Das gilt in Bezug auf die Schlafapnoe aber nur, wenn noch ein oder zwei „absolute“ Parameter wie Intervall-Mittelwert und Standardabweichung hinzugenommen werden. In Bezug auf die Unterscheidung zwischen gesunden Probanden, Patienten mit Herzinsuffizienz und

Patienten nach einem Herzinfarkt wird die Frage, ob relative oder absolute Parameter besser sind, z.B. in [ASHKENAZYetal-01a] diskutiert. Es ist anzumerken, dass die oben berichtete, zu 85% korrekte Zuordnung der Schlafstadien nicht allein auf dem EKG basiert, sondern dass die Grenzen zwischen den Schlafstadien schon aus dem Somnogramm bekannt waren. Ein Algorithmus zur Erkennung der Schlafstadien ohne eine solche Voreinteilung wird unten in Abschnitt II.B.2.f diskutiert.

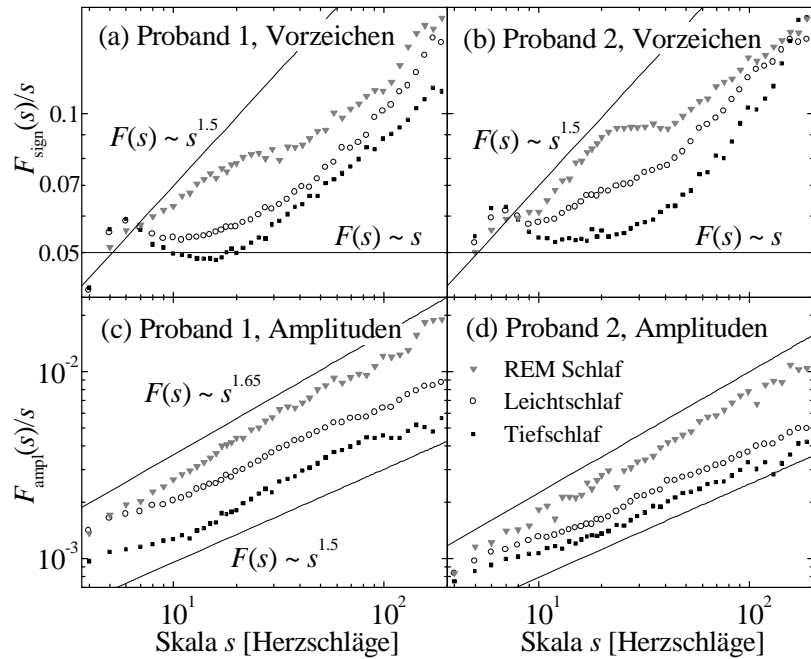
### e) Ergebnisse der Amplituden- und Vorzeichen-DFA; Multifraktalität

In Abschnitt II.A.2.e habe ich die Vorzeichen- und Amplituden-DFA erklärt, bei der die Zeitreihe vor der eigentlichen Analyse in die Vorzeichen- und die Amplituden-Reihe der Inkremente transformiert wird

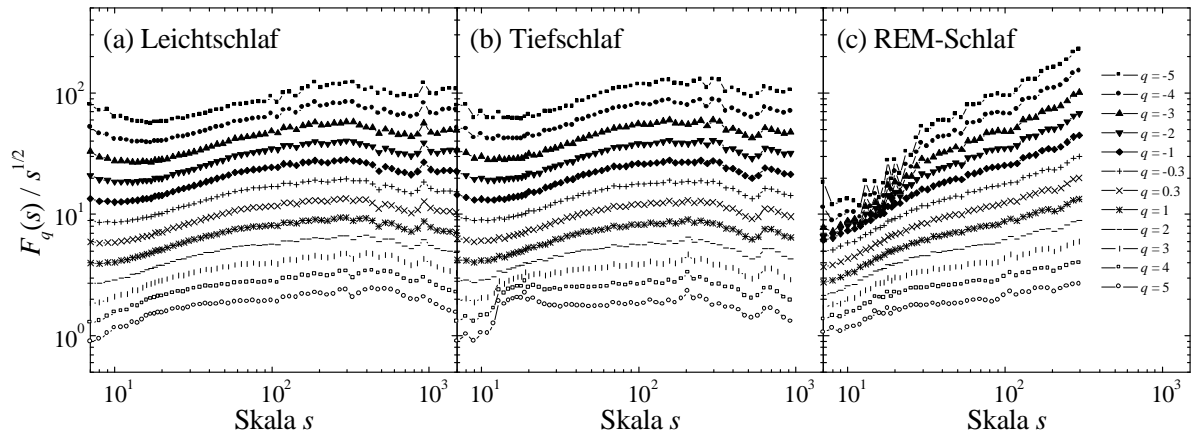
[ASHKENAZYetal-01, ASHKENAZYetal-03a]. Diese Methode haben wir auf Herzschlag-Zeitreihen von gesunden Probanden in den verschiedenen Schlafstadien angewandt [KANTELHARDTetal-02b, IVANOVetal-04]. Abbildung II.B.9 zeigt repräsentative Ergebnisse.

Die Vorzeichenreihe der Herzschlag-Inkremente ist nur kurzzeitkorreliert, d.h. auf großen Skalen  $s > 100$  Herzschlägen beträgt der Fluktuationsexponent wegen der doppelten Summierung  $\alpha_{\text{sign}} = 1.5$ . Auf kleinen Skalen erkennt man ein Maximum von  $F_{\text{sign}}(s)/s$  im Bereich von 5 bis 7 Herzschlägen. Das ist auf den Einfluss der Atmung auf den Herzschlag zurückzuführen, der eine periodische Schwankung zur Folge hat (Sinus-Arrhythmie, siehe auch Abb. II.B.8; die Verschiebung der charakteristischen Skala von 3-5 zu 5-7 Herzschlägen liegt an der DFA2, siehe Abschnitt II.A.2.c). Bei der periodischen Schwankung sind die Vorzeichen der Inkremente besonders stark antikorreliert. Man erkennt, dass die Sinus-Arrhythmie in den verschiedenen Schlafstadien fast gleich stark ist, im Gegensatz zu einer unter Kardiologen verbreiteten Ansicht, dass sie im Tiefschlaf besonders stark sein soll. Allerdings fällt die Sinus-Arrhythmie im Tiefschlaf besonders auf, denn es gibt deutlich weniger andere Fluktuationen. Im REM-Schlaf sind hingegen starke niederfrequente Vorzeichen-Fluktuationen zwischen 7 und 20 Herzschlägen vorhanden, so dass sich das Atmungsmaximum nicht deutlich abhebt. Leichtschlaf liegt zwischen Tief- und REM-Schlaf, und im Gegensatz zu den normalen Fluktuationsanalysen treten Unterschiede zwischen Leicht- und Tiefschlaf zutage.

Die Analyse der Amplitudenreihen der Herzschlag-Inkremente bringt kaum relevante Ergebnisse zur Unterscheidung von Schlafstadien; sie ist vielmehr von prinzipiellem Interesse. Der Grund ist,



**Abb. II.B.9:** Für die Herzschlagdaten von zwei gesunden Probanden im Leichtschlaf ( $\circ$ ), Tiefschlaf ( $\blacksquare$ ) und REM-Schlaf ( $\blacktriangledown$ ) sind die Ergebnisse der Vorzeichen-DFA (a,b) und der Amplituden-DFA (c,d), die durch  $s$  dividierten DFA2-Fluktuationen, doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  aufgetragen, zusammen mit einigen Geraden zum Vergleich, deren Steigung angegeben ist (in (d) wie in (c)). Die Vorzeichen-DFA zeigt oberhalb des atmungsbezogenen Maximums (bei 5-7 Herzschlägen) im non-REM Kurzzeit-Antikorrelationen der Inkrement-Vorzeichen. Die Amplituden-DFA zeigt im non-REM unkorreliertes Fluktuieren der Inkrement-Beträge und nur im REM-Schlaf langreichweitige Korrelationen.



**Abb. II.B.10:** Multifraktale Analyse der Herzschlagdaten eines gesunden Probanden in den drei Schlafstadien (a) Leichtschlaf, (b) Tiefschlaf und (c) REM-Schlaf. Die MF-DFA2 Fluktuationfunktionen  $F_q(s)$  sind durch  $s^{1/2}$  dividiert doppelt logarithmisch gegen  $s$  aufgetragen, damit man Korrelationen als Abweichungen vom horizontalen Verlauf sehen kann. Die einzelnen Kurven gelten für verschiedene Momente  $q$ , wie rechts angegeben. Man erkennt, dass die Steigung  $h(q)$  der Kurven für Leicht- und Tiefschlaf auf großen Skalen  $s$  kaum von  $q$  abhängt, während im REM-Schlaf eine Abhängigkeit und damit Multifraktalität vorliegt.

dass Langzeitkorrelationen in den Amplitudenreihen mit nichtlinearem Verhalten der Zeitreihe in Verbindung gebracht werden können [ASHKENAZYetal-01, ASHKENAZYetal-03a]. Lineare Reihen, die man z.B. mit der Fourier-Filter-Methode oder auch mit der Schreiber-Methode als Surrogat-Daten erhält (beide Methoden sind in Abschnitt II.A.1.c beschrieben), haben stets unkorrelierte Amplitudenreihen der Inkremente ( $\alpha_{\text{mag}} = 1.5$  bei Doppel-Summation). Wenn Langzeitkorrelationen in diesen Reihen auftreten, kann das nur durch einen nichtlinearen Prozess erklärt werden, d.h. das die Reihe generierende System muss wesentliche nichtlineare Komponenten enthalten. Außerdem besteht möglicherweise ein Zusammenhang zur Multifraktalität der Zeitreihe in dem Sinne, dass eine lineare Reihe mit unkorrelierter Amplitudenreihe der Inkremente stets monofraktal ist, während Langzeitkorrelationen in der Amplitudenreihe auf Multifraktalität hindeuten. Die repräsentativen Ergebnisse für die Analyse der Amplitudenreihen der Inkremente in Abb. II.B.9(c,d) zeigen, dass nur im REM-Schlaf deutliche Langzeitkorrelationen zu sehen sind. Das bedeutet, dass die Regelung des Herzschlags im REM-Schlaf (und auch in den nicht gezeigten Wachphasen) deutlich stärker von nichtlinearen Komponenten beeinflusst wird als im Leicht- und Tiefschlaf.

Genauere Aussagen über die Art der Nichtlinearität könnte man prinzipiell durch eine multifraktale Analyse erhalten, und das habe ich auch versucht. Dabei zeigte sich aber, dass die Länge der verfügbaren Datenabschnitte nach der Aufteilung in die einzelnen Schlafstadien zu gering ist, um eine zuverlässige multifraktale Auswertung mit der MF-DFA zuzulassen. Tendenziell sieht man zwar eine leichte Multifraktalität in den REM-Stadien und eher monofraktales Verhalten im Tiefschlaf – ein Beispiel ist in Abb. II.B.10 gezeigt –, aber die Unterschiede zwischen einzelnen Probanden und auch zwischen der ersten und zweiten Nacht bei demselben Probanden sind so groß, dass die Ergebnisse nicht mehr signifikant sind. Es gibt eine ganze Reihe von Arbeiten zur Multifraktalität von Herzschlagdaten, bei denen immer zusammenhängende Blöcke von mindestens 6 Stunden Dauer analysiert werden [IVANOVetal-99b, AMARALetal-01, IVANOVetal-01]. Ich bin aber nicht überzeugt, dass die dabei numerisch gefundene Multifraktalität wirklich eine intrinsische Multifraktalität ist und nicht vielmehr eine Nichtstationarität der Korrelationseigenschaften. Schon die einfachen Autokorrelationen (2. Moment) variieren mit der Aktivität, und die multifraktale Analyse liefert bei einer aus zwei monofraktales Abschnitten kombinierten Datenreihe auch ein breites multifraktales Spektrum anstelle von nur zwei Punkten (siehe Abschnitt II.A.4.c).

Abbildung II.B.11 zeigt die Ergebnisse für alle 12 untersuchten Probanden. Ich habe die Fluktuationsexponenten für Vorzeichen- und Amplituden-DFA jeweils in den Skalenbereichen bestimmt, in

denen die deutlichsten Unterschiede zwischen den einzelnen Schlafstadien auftreten. Man erkennt, dass außer in drei Fällen stets die Exponenten im REM-Schlaf größer sind als im Leichtschlaf und diese wiederum größer sind als die Exponenten im Tiefschlaf. Obwohl die Abbildung eine deutliche Schwankung der Skalenexponenten im Vergleich der Probanden zeigt, wie das bei medizinischen Daten häufig ist, können durch den Vergleich der einzelnen Werte bei jedem Probanden die obigen Aussagen bestätigt werden. Zur Unterscheidung der Schlaf- und Wachstadien ist es sinnvoll, trotz der Schwankungen von einem Probanden zum nächsten die Mittelwerte anzugeben. Diese sind  $\alpha_{\text{sign}} = 1.33 \pm 0.15$  und  $\alpha_{\text{mag}} = 1.71 \pm 0.10$  für die nächtlichen Wachstadien,  $\alpha_{\text{sign}} = 1.31 \pm 0.20$  und  $\alpha_{\text{mag}} = 1.66 \pm 0.06$ , für REM-Schlaf,  $\alpha_{\text{sign}} = 1.09 \pm 0.15$  und  $\alpha_{\text{mag}} = 1.57 \pm 0.06$  für Leichtschlaf, und schließlich  $\alpha_{\text{sign}} = 0.96 \pm 0.14$  und  $\alpha_{\text{mag}} = 1.53 \pm 0.10$  für Tiefschlaf.

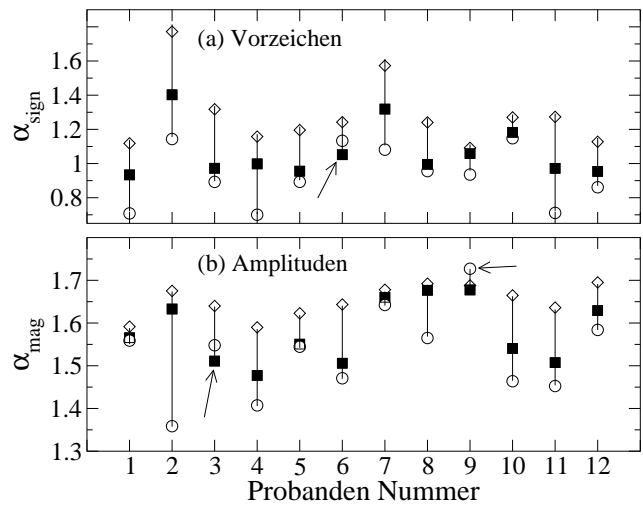
## f) Schlafstadienfinder

Die medizinische Diagnostik im Schlaflabor

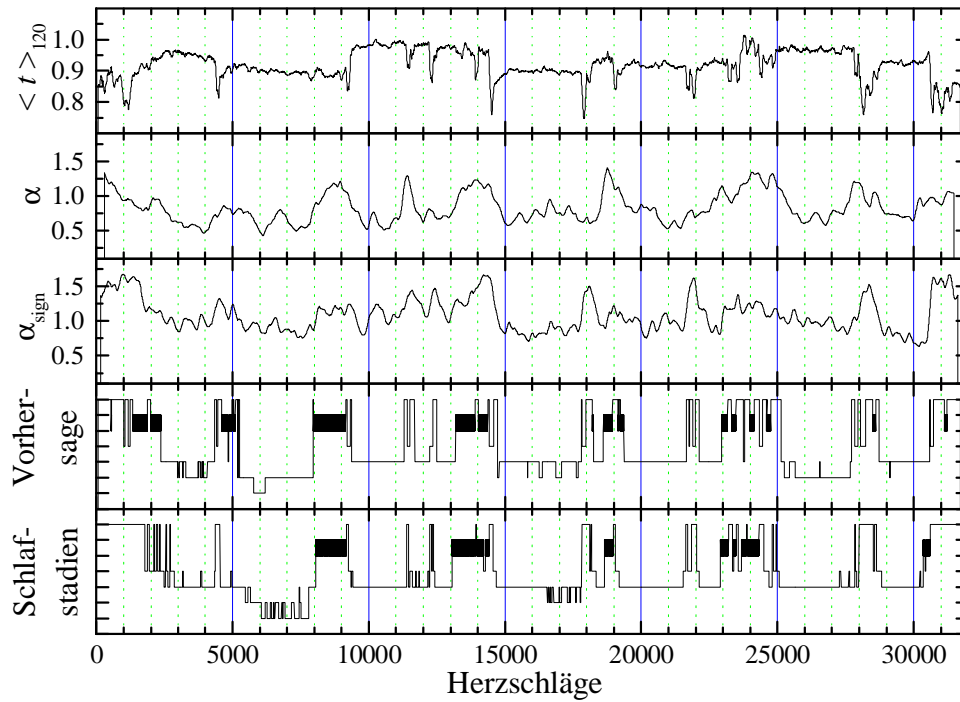
ist sehr zeit- und personalaufwendig. Eine verbesserte Analyse der Herzfrequenz und anderer im Schlaf gemessener Signale kann helfen, die Diagnoseerstellung zu beschleunigen, und die stationären Aufenthalte der Patienten im Krankenhaus zu reduzieren. Als Ziel solcher automatischer Verfahren könnte ein ambulant einsetzbares Gerät gesehen werden, das Schlafphasen erkennt und damit Schlafstörungen diagnostizieren hilft. Da es deutlich schwieriger ist, elektrophysiologische Ableitungen am Kopf aufzunehmen (EEG, EOG usw.), sind EKG und Atmung für ambulante Geräte besser geeignet, auch weil diese Signale stärker und die Messungen weniger störanfällig sind.

Ein ersten Schritt in Richtung auf ein ambulant einsetzbares Diagnosegerät besteht daher darin, Schlafphasen allein aus dem EKG oder ggf. einer weiteren, einfach zu registrierenden Messgröße zu bestimmen. Meine Versuche zur Bestimmung der Schlafphasen allein aus dem EKG können zwar nicht die Genauigkeit der konventionellen Bestimmungen durch visuelle Auswertungen von EEG, EOG und EMG erreichen, aber hier ist zu bedenken, dass es auch bei diesen Auswertungen Unterschiede von 30% bis 90% (typisch 70%) zwischen den Bestimmungen einzelner Experten in 30 Sekunden Segmenten gibt (siehe Abschnitt II.B.2.b), so dass eine Genauigkeit von über 70% bei der automatischen Erkennung von Leicht-, Tief- und REM-Schlaf schon gut ist.

Mein vorläufiger Schlafphasen-Detektor auf Basis der Zeitreihe von Intervallen zwischen aufeinander folgenden Herzschlägen analysiert die Aufzeichnung einer gesamten Nacht in mehreren Durchgängen. Das Ziel ist zunächst eine Unterscheidung von non-REM (Leicht- und Tiefschlaf) und REM-Stadien mit einer Auflösung von etwa einer Minute. Dabei werden verschiedene lokale Parameter berechnet, für die ein Zusammenhang zu den Schlafstadien besteht, siehe Tabelle II.B.1. Dies sind neben dem laufenden Mittelwert und der Standardabweichung über 120 Herzschläge vor allem „lokale“ Versionen der DFA-Fluktuationsexponenten (für normale DFA, Vorzeichen-DFA



**Abb. II.B.11:** Vergleich der Skalenexponenten für (a) Vorzeichen-DFA2 und (b) Amplituden-DFA2 im REM-Schlaf (◇), Leichtschlaf (■) und Tiefschlaf (○) für alle 12 betrachteten Probanden. Die Exponenten wurden in der doppelt logarithmischen Auftragung in den Bereichen  $8 \leq s \leq 13$  Herzschläge für Vorzeichen-DFA und  $11 \leq s \leq 150$  Herzschläge für Amplituden-DFA ermittelt, in denen wesentliche Unterschiede zwischen den Schlafstadien auftreten (vgl. Abb. II.B.9). Man erkennt, dass die Werte im REM-Schlaf meist über denen im Leichtschlaf liegen und diese über denen im Tiefschlaf. Nur in den drei mit Pfeilen markierten Fällen ist die Reihenfolge anders (nach [KANTELHARDTetal-02b]).

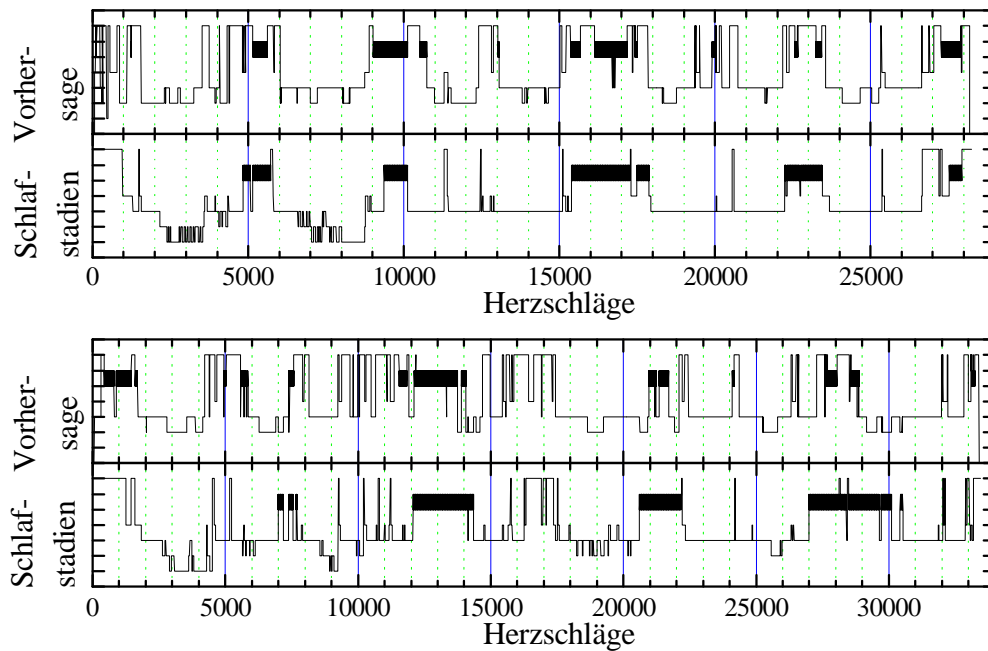


**Abb. II.B.12:** Beispiel für die Funktionsweise des Schlafstadien-Finders bei einem gesunden Probanden. In den oberen drei Teilen sind die wichtigsten kontinuierlich in Fenstern der Breite 120 – 300 Herzschläge berechneten Schlafstadien-Indikator Parameter gezeigt, nämlich der laufende Mittelwert der Herzschlag-Intervalle, der normale DFA-Fluktuationsexponent (Skala 50 bis 100) und der Fluktuationsexponent der Vorzeichen-Reihe. Darunter ist das aus den insgesamt 10 abgeleiteten Parametern vorhergesagte Schlafstadien-Profil gezeigt, wobei – entsprechend den Konventionen in der Schlafmedizin – das oberste Niveau „wach“ bedeutet, der breite Balken REM-Schlaf, und sich darunter die zunehmend tieferen Schlafstadien Leichtschlaf (1 und 2) sowie Tiefschlaf (3 und 4) anschließen. Die unterste Kurve zeigt die durch visuelle Auswertung von EEG, EOG und EMG nach der Standard-Methode bestimmten Schlafstadien. In diesem Beispiel sind die Abweichungen der Vorhersage von diesen Schlafstadien kleiner als die Unterschiede zwischen den Ergebnissen zweier Auswerter, mit Ausnahme eines am Anfang fehlerhaft detektierten REM-Schlafs.

und Amplituden-DFA) sowie je ein absoluter Wert der Fluktuationen der Intervallreihe und der Vorzeichenreihe auf festen Skalen. Schließlich habe ich die drei Parameter der Standard-Herzfrequenz-Variabilität hinzugenommen, die die spektrale Leistung in drei Frequenzbändern angeben (HF, LF und VLF). Diese insgesamt zehn Parameter habe ich in kontinuierlich bewegten Fenstern von 120 bis 300 Herzschlägen Breite berechnet und den zeitlichen Verlauf anschließend leicht geglättet. Abbildung II.B.12 zeigt drei Beispiele solcher kontinuierlichen Parameter.

**Tabelle II.B.1:** Parameter für den Schlafstadienfinder. Die 10 Parameter habe ich in kontinuierlich bewegten Fenstern der angegebenen Größe berechnet und auf den angegebenen Skalen ausgewertet. Die Gewichtskoeffizienten wurden für die 1. Nacht von insgesamt 12 gesunden Probanden numerisch optimiert.

Parameter	Fenstergröße	Betrachtete Skalen	Gewichtskoeffizient
Mittelwert	120 Herzschläge		– 0.23
Standardabweichung	120 Herzschläge		0.05
$F(50)$	300 Herzschläge	50 Herzschläge (HS)	0.13
$F_{\text{sign}}(20)$	160 Herzschläge	20 HS	– 0.07
$\alpha_2$	300 Herzschläge	50 – 100 HS	0.26
$\alpha_{\text{sign}}$	150 Herzschläge	8 – 13 HS	0.34
$\alpha_{\text{mag}}$	300 Herzschläge	11 – 50 HS	0.07
HF	150 Herzschläge	$0.4 - 0.15 \text{ HS}^{-1}$	0.05
LF	150 Herzschläge	$0.15 - 0.04 \text{ HS}^{-1}$	0.01
$\log(\text{VLF})$	150 Herzschläge	$0.04 - 0.0067 \text{ HS}^{-1}$	0.01



**Abb. II.B.13:** Gegenüberstellung der Ergebnisse des Schlafstadien-Finders und der aus EEG, EOG und EMG ermittelten Schlafstadien für zwei weitere gesunde Probanden. Beide Darstellungen entsprechen den unteren beiden Kurven in Abb. II.B.12 (siehe dort für die Erklärung). Beim unteren Probanden erkennt der Algorithmus nicht, dass ungewöhnlich viel REM-Schlaf vorhanden ist.

Die Idee zur Erkennung der Schlafstadien ist nun, eine Linearkombination aus allen zehn Parametern zu bilden, die positiv ist für REM- und Wachstadien, aber negativ für non-REM Stadien. Dazu habe ich als erstes die Verläufe aller 10 Parameter normiert (Mittelwert 0, Standardabweichung 1) und dann numerisch die 10 Koeffizienten in der Linearkombination so optimiert, dass für die jeweils erste Nacht von 12 gesunden Probanden im Schlaflabor diese Linearkombination am besten mit den von Auswertern bestimmten Schlafstadien-Verläufen übereinstimmt. Die aus dieser Anpassung resultierenden (Gewichts-) Koeffizienten sind ebenfalls in Tabelle II.B.1 angegeben. Man erkennt, dass die Parameter der Spektralanalyse ein kleines Gewicht bekommen; das ist eine unabhängige Bestätigung der Ergebnisse von Abschnitt II.B.2.d. Auch die Standardabweichung und der Fluktuationsindex der Amplitudenreihe spielen keine große Rolle. Einen wesentlichen Beitrag zur Schlafstadien-Unterscheidung liefern hingegen der normale Fluktuationsindex und der Fluktuationsindex der Vorzeichenreihe, sowie der gleitende Mittelwert; letzterer mit negativem Vorzeichen, weil der Herzschlag im REM-Schlaf und in den Wachphasen etwas schneller ist.

Der Test der so definierten Schlafstadienfinder-Methode erfolgte dann anhand der jeweils zweiten Nacht im Schlaflabor mit denselben Probanden. In einem zweiten und dritten Schritt habe ich schließlich die gleiche Prozedur noch einmal zur Unterscheidung von Leicht- und Tiefschlaf (innerhalb der non-REM Phasen) sowie von REM- und Wachstadien wiederholt. Ergebnisse in Form eines vorhergesagten Schlafstadien-Verlaufs sind in Abb. II.B.12 und Abb. II.B.13 gezeigt und direkt dem „wahren“, d.h. von einem Auswerter visuell aus EEG, EOG und EMG bestimmten Schlafstadienverlauf gegenübergestellt. Man erkennt eine erstaunlich gute Übereinstimmung.

Insgesamt konnte ich eine Übereinstimmung von 80 bis 85% bei der Unterscheidung von Wachphasen und REM-Schlaf auf der eine Seite gegenüber non-REM-Schlaf (Leicht- und Tiefschlaf) auf der anderen Seite mit denselben Koeffizienten bei allen 12 Probanden erreichen. Für die Unterscheidung von Wachphasen und REM-Schlaf bzw. Leicht- und Tiefschlaf kamen im Vergleich mit der visuellen Auswertung von EEG, EOG und EMG noch einmal ca. 15% Fehler dazu. Allerdings funktioniert dies bisher nur, wenn man die Schwelle für die Linearkombination so wählt, dass die Anteile der Schlafarten ungefähr den durchschnittlichen Anteilen (siehe Abschnitt II.B.2.b) entsprechen.

chen. Dies ist aber nicht erwünscht, wenn es darum geht, Schlafstörungen zu diagnostizieren, denn die bestehen oft gerade in Abweichungen von den durchschnittlichen Anteilen. Daher ist der Schlafstadienfinder noch nicht praxistauglich. Ein weiteres Problem ist, dass am Anfang der Nacht die Unterscheidung zwischen noch-wach und gerade-schon-eingeschlafen (Leichtschlaf 1) sehr unzuverlässig ist und dass das Programm in diesen Teilen oft auch REM-Schlaf anzeigt (siehe Abb. II.B.12 und II.B.13). So könnte der automatische Schlafstadienfinder zur falschen Diagnose einer Schlafstörung verleiten, bei der REM-Schlaf schon kurz nach dem Einschlafen auftritt.

Ich hoffe, dass sich diese Probleme mit der automatischen Schlafstadienerkennung überwinden lassen, wenn zusätzlich zum Herzschlag eine weitere Größe betrachtet wird. Mir erscheint dafür die Atmung am aussichtsreichsten, zumal diese auch einfach zu registrieren ist. Zusätzlich zu den Fluktuations- und Korrelationseigenschaften der Atmung (siehe Abschnitt II.B.4) könnten dann auch die Unterschiede in der Synchronisation von Herzschlag und Atmung [SCHÄFER*etal*-98, SCHÄFER*etal*-99, BRACIC&STEFANOVSKA-00, GLASS-01, ROSENBLUM*etal*-02, PROKHOROV*etal*-03] ausgenutzt werden, um den Schlafstadienfinder zuverlässiger zu machen. Alternative Parameter zur Atmung wären die Sauerstoffsättigung des Blutes (gemessen mit Fingerspitzensensor, aber wohl mehr für die Diagnostik der Schlafapnoe relevant) oder der Blutdruck (aufwendig zu messen).

### II.B.3. Exkurs: Modellierung der Herzfrequenzvariabilität

Bei der Untersuchung der Herzschlag-Zeitreihen haben wir gesehen, dass sie aus begrenzten Teilen mit unterschiedlichem Korrelationsverhalten bestehen, die sich verschiedenen Aktivitäts- oder Schlafphasen zuordnen lassen. Obwohl zur Charakterisierung der Wach- und REM-Phasen das Konzept langreichweitiger, nach einem Potenzgesetz  $C(s) \sim s^{-\gamma}$  abfallender Korrelationen mit divergierender charakteristischer Korrelationslänge  $s_{\times}$  verwendet wird, kann man praktisch nie das Verhalten für beliebig große Skalen  $s$  analysieren, weil alle Phasen begrenzt sind. Tatsächlich kann ein Skalenexponent  $\alpha > 1$ , wie er z.B. während des Trainings beobachtet wird, nicht für beliebig große Zeitskalen gelten, weil sonst der Mittelwert der Herzfrequenz divergieren müsste.

Für eine Modellierung physiologischer Daten kommt es daher nicht darauf an, dass die Modelldaten wirklich eine divergierende charakteristische Korrelationslänge  $s_{\times}$  aufweisen, sondern es ist wichtiger, auch die Übergänge zwischen Bereichen mit unterschiedlichem kurz- und mittelfristigem Korrelationsverhalten zu erfassen. Solche Korrelationen unterschiedlicher Stärke und Dauer in jeweils endlichen Bereichen des Signals sollen hier als *transiente Korrelationen* bezeichnet werden, weil sie sich graduell oder abrupt ändern und dabei Änderungen im physiologischen Regelungsmechanismus widerspiegeln. Die Modellierung solcher physiologischen Signale wie dem Herzschlag hat mehrere Ziele: Erstens möchte man möglichst realistische Surrogatdaten zum Test von neuen Analysemethoden erhalten. Zweitens möchte man verstehen, wie die Übergänge im Korrelationsverhalten die Analyseergebnisse beeinflussen. Vor allem aber geht es bei der Modellierung darum, in fortwährenden Vergleichen der modellierten Daten mit den Messdaten festzustellen, welche Regelungskomponenten und wesentlich zu dem echten Signal beitragen, um so das komplexe System besser zu verstehen, das die Zeitreihe generiert.

Hier möchte ich ein stochastisches Modell mit zwei Parametern vorstellen, das komplexe, fluktuierende Signale mit transienten Korrelationen generiert und die in nichtstationären physiologischen Signalen beobachteten Korrelationseigenschaften reproduziert [KANTELHARDT*etal*-03a]. Als repräsentatives Beispiel für ein komplexes mehrkomponentiges physiologisches System betrachte ich die Regelung des menschlichen Herzschlags in den verschiedenen Schlafstadien während der Nacht. Das Modell besteht aus zwei verbundenen Komponenten, mit denen lineare und nicht-lineare Fluktuationseigenschaften generiert werden. Es basiert nicht auf dem früheren Modell der Bostoner Gruppe [IVANOV*etal*-98a], weil das auf der Simulation der Inkremente aufsetzt und man damit nicht unkorrelierte Intervalle zwischen Herzschlägen erhalten kann.

**Tabelle II.B.2:** Parameter des stochastischen Modells für Zeitreihen von Herzschlag-Intervallen in Schlaf- und Wachstadien. Zwei Parameter sind angepasst, und zwar der Korrelationsparameter  $\delta$  in Gl. (II.B.5) (bzw. (II.B.6)) und der Nichtlinearitäts-Parameter  $b$  in Gl. (II.B.3). Das mittlere Herzschlagintervall  $\mu$  in Gl. (II.B.4) wurde aus den Messdaten bestimmt (gerundet auf 0.05s). Die hinteren Spalten charakterisieren die Schlafstadien-Dynamik und sind der Beschreibung in Abschnitt II.B.2.b entnommen. Die Schlafstadien-Anteile sind auf 5% gerundet;  $P(t)$  bezeichnet die Verteilung der Phasenlängen  $t$  (in Minuten).

Phase	$\delta$	$b$	$\mu$ (s)	Anteile	$P(t)$
Tiefschlaf	5.0	0.3	0.95	15%	$\sim \exp[-t/10]$
Leichtschlaf	2.7	0.45	0.95	55%	$\sim \exp[-t/10]$
REM-Schlaf	2.4	0.55	0.90	20%	$\sim \exp[-t/10]$
Wachstadien (Ruhe)	2.1	0.75	0.85	10%	$\sim t^{-1.1}$
Wachstadien (Training)	1.8	0.75	0.70	Übergänge	

Der erste Teil des stochastischen Modells ähnelt dem so genannten *auto-regressiven bedingten* (conditional) *Heteroscedasticity* (ARCH) Prozess. Für die Einführung dieses stochastischen Prozesses zur Beschreibung der Fluktuationen in wirtschaftswissenschaftlichen Größen erhielt Robert F. Engle 2003 die Hälfte des Nobelpreises für Wirtschaftswissenschaften. Ein ARCH Prozess erzeugt eine unkorrelierte Zeitreihe  $y_i$  mit Kurzzeitkorrelationen in der Amplitudenreihe. Solche Zeitreihen sind in den Wirtschaftswissenschaften sehr häufig; z.B. die Kurse an Wertpapier- und Devisenbörsen sind bis auf schwache Kurzzeitkorrelationen unkorreliert, denn sonst könnte jemand die Korrelationen für Gewinne ausnutzen. Es gibt aber wesentliche Korrelationen in den Handelsvolumina und in den absoluten Kursänderungen: An einem hektischen Börsentag sind die Handelsvolumina hoch und die Preise gehen in relativ großen Sprüngen hoch und runter, während an ruhigen Börsentagen die Kurse bei geringen Handelsvolumina nur schwach schwanken. Das Grundprinzip eines ARCH Prozess basiert auf der Iterationsvorschrift

$$y_i = x_i \sqrt{a + b y_{i-1}^2} \quad (\text{II.B.1})$$

mit den beiden Parametern  $a$  und  $b$  sowie unkorrelierten Zufallszahlen  $x_i$  und dem Startwert  $y_1 = x_1$ . Je nach Wahl von  $a$  und  $b$  (o.B.d.A. kann  $a = 1$  gesetzt werden) weisen die generierten Zahlen ein mehr oder weniger starkes Kurzzeitgedächtnis der Beträge auf, weil ein betragsmäßig großer Wert auch den Betrag der nachfolgenden Werte etwas erhöht. Die Verteilung der Zufallsvariablen  $x_i$  bestimmt wesentlich die Verteilung der Werte der von Gl. (II.B.1) generierten Reihe  $y_i$ . Da die Intervalle zwischen aufeinander folgenden Herzschlägen ungefähr exponentiell verteilt sind [IVANOVetal-96, IVANOVetal-98a, IVANOVetal-98b], wähle ich hier eine (um 0 symmetrische) Exponentialverteilung, die  $x_i$ -Werte (theoretisch) zwischen  $-\infty$  und  $+\infty$  erlaubt, aber endliche Momente hat,

$$P(x_i) = \exp[-|x_i|]. \quad (\text{II.B.2})$$

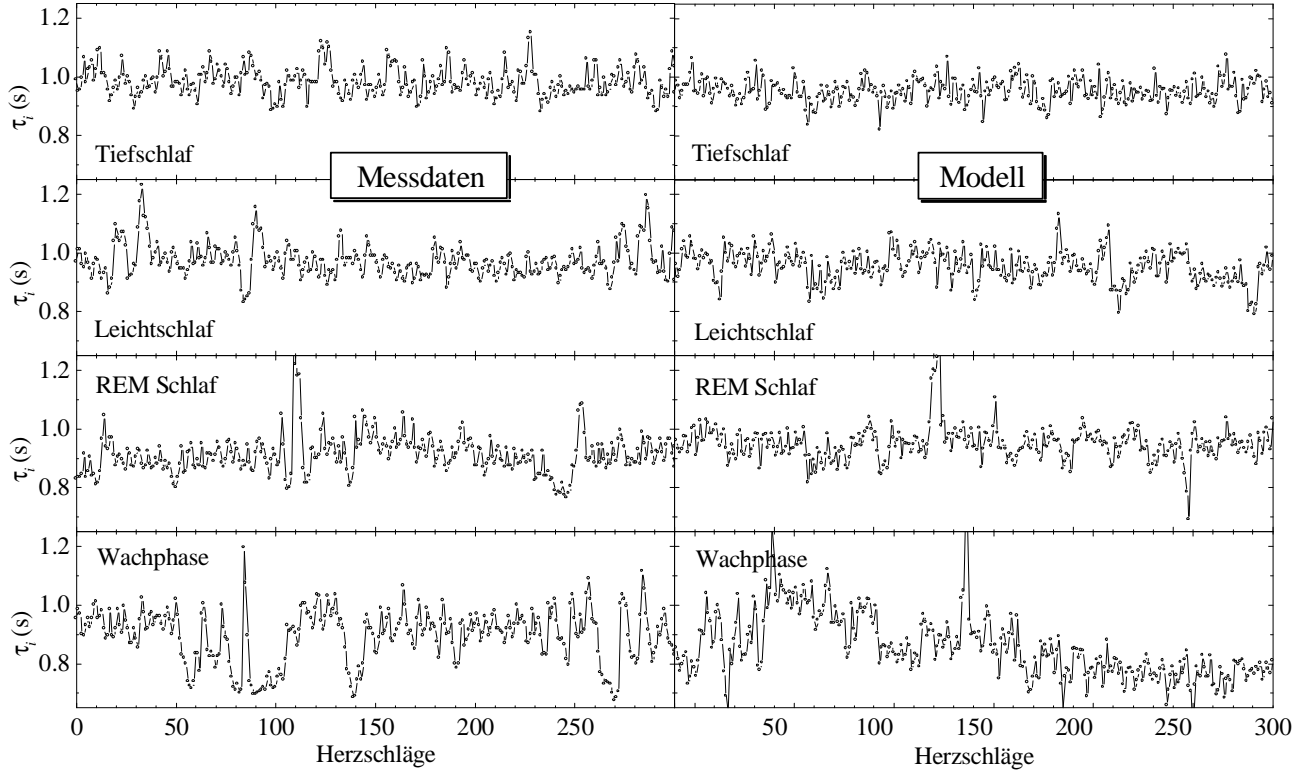
Um die Reichweite des Gedächtnisses des ARCH-artigen Prozesses zu erhöhen, habe ich zur Modellierung der physiologischen Daten den vorhergehenden Wert  $y_{i-1}$  unter der Wurzel in Gl. (II.B.1) durch einen Mittelwert über die  $k_i$  vorhergehenden Werte  $y_{i-1}, y_{i-2}, y_{i-3}, \dots, y_{i-k_i}$  ersetzt,

$$y_i = x_i \sqrt{1 + b \langle y_{i-j}^2 \rangle_{j=1}^{k_i}}, \quad (\text{II.B.3})$$

wobei die  $y_i$  mit  $i \leq 0$  alle 0 sein sollen. So lässt sich eine Datenreihe mit Korrelationen in der Amplitudenreihe erzeugen. Der Parameter  $b$  bestimmt die Stärke dieser Korrelationen und die Verteilung der positiven, ganzzahligen Zufallsvariablen  $k_i$  die Reichweite der Amplitudenkorrelationen. Da die Amplitudenkorrelationen mit der Nichtlinearität der Datenreihe verbunden sind (siehe Abschnitt II.A.2.e), bestimmt  $b$  auch die Stärke der Nichtlinearität.

Der zweite Teil des stochastischen Modells ist für die transienten Korrelationen in der Zeitreihe selbst zuständig, die bei einem normalen ARCH-Prozess vollkommen fehlen, aber in den Herz-





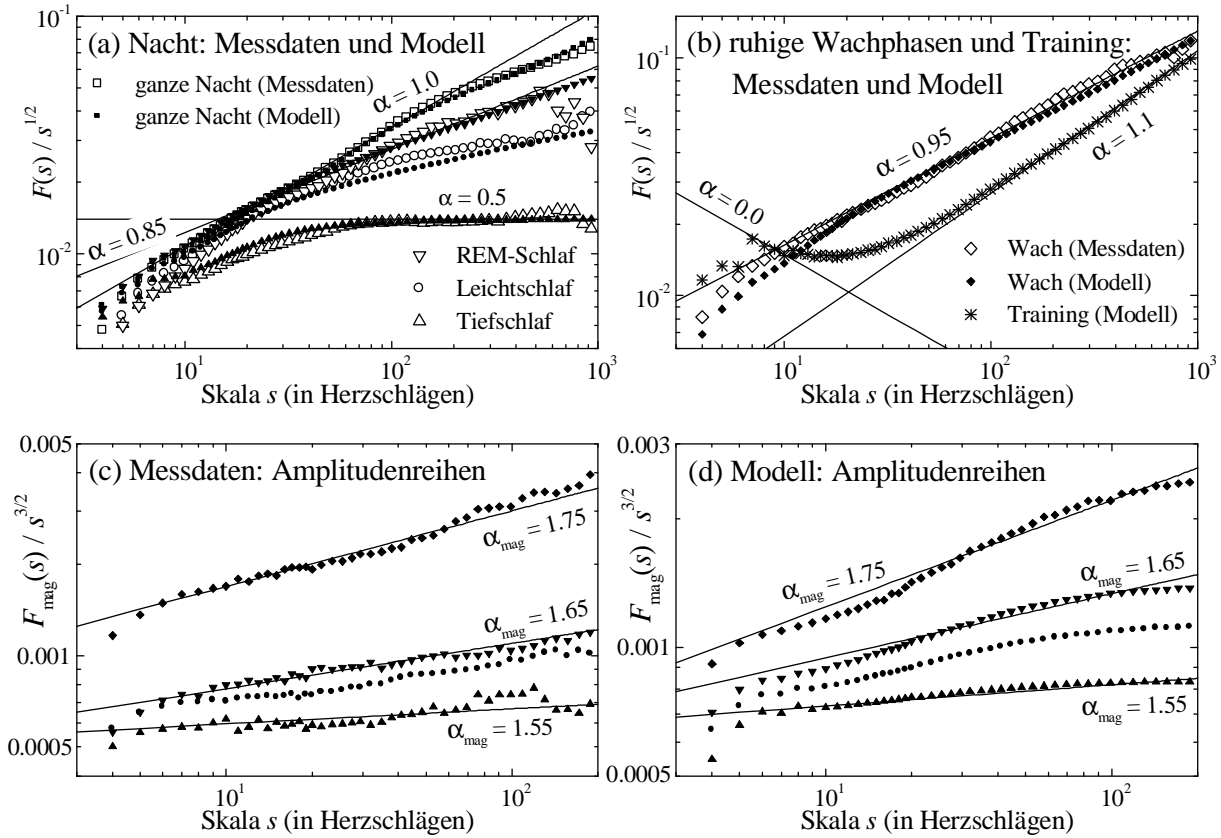
**Abb. II.B.14:** Vergleich von Messdaten der Herzschlag-Intervalle eines gesunden Probanden in den Schlaf- und Wachphasen (links) mit den Datenreihen des Modells (rechts) (nach [KANTELHARDTetal-03a]).

schlagzeitreihen insbesondere im REM-Schlaf und in den Wachphasen auftreten. Außerdem wird noch die Sinus-Arrhythmie berücksichtigt, d.h. die Beeinflussung des Herzschlags durch die Atmung (siehe Abschnitt II.B.2.d), die zu einer ungefähr periodischen Schwankung mit einer Periode von typisch etwa 3.6 Sekunden führt (3-5 Herzschläge) und weitgehend unabhängig vom Schlafstadium ist. Die Formel für die modellierten Zeitintervalle zwischen den aufeinander folgenden Herzschlägen basiert auf der Reihe  $y_i$  aus Gl. (II.B.3) und lautet:

$$\tau_i = \mu + 0.03 \sin(2\pi t_i / 3.6) + 0.025 \sum_{j=1}^{i-1} y_j \Theta(k_j + j - i), \quad (\text{II.B.4})$$

mit der Funktion  $\Theta(m) = 1$  für  $m > 0$  und 0 sonst, wobei  $t_i = \sum_{j=i-(i \bmod 4)-1}^{i-1} \tau_j$  für  $i \leq 5$  mit  $t_i = 0$  am Anfang ( $i < 5$ ) die Zeit innerhalb eines Atmungszyklus angibt. Dadurch, dass die Zeit immer nur ab dem Beginn der einzelnen Atmungszyklen gemessen wird, ist im zweiten Term in Gl. (II.B.4), der die Sinus-Arrhythmie modelliert, zusätzlich eine Phasensynchronisation zwischen Herzschlag und Atmung realisiert. Alle Zeitvariablen und Konstanten in Gl. (II.B.4) sind in der Einheit Sekunden. Der erste Term ist einfach der empirisch bestimmte Mittelwert für die Intervalle zwischen aufeinander folgenden Herzschlägen. Dieser Wert hängt leicht vom Schlafstadium ab (siehe z.B. Abschnitt II.B.2.f); die für das Modell verwendeten Werte sind in Tabelle II.B.2 angegeben.

Der dritte Term in Gl. (II.B.4) modelliert die Korrelationen. Das geschieht so, dass jede der Zahlen  $y_j$  aus dem modifizierten ARCH-Prozess Gl. (II.B.3) (bei denen nur die Beträge korreliert sind) nicht nur in ein  $\tau_i$  eingeht, sondern in die  $k_i$  Werte  $\tau_{i-k_i}, \tau_{i-k_i+1}, \dots, \tau_{i-2}, \tau_{i-1}$ , was wiederum daran liegt, dass die  $\Theta$ -Funktion genau für  $j = i - k_i$  bis  $j = i - 1$  gleich 1 ist und sonst 0. Das Auftreten des gleichen  $y_j$  in vielen aufeinander folgenden  $\tau_i$  verursacht die Korrelationen. Damit ist die Verteilung der positiven, ganzzahligen Zufallsvariablen  $k_i$ , die schon in Gl. (II.B.3) vorkam, entscheidend für die Reichweite der Korrelationen. Je größere Werte von  $k_i$  vorkommen, desto länger reichweitig sind die Korrelationen. Um das empirische Potenzgesetz im Korrelationsverhalten auf den relevanten Zeitskalen zu reproduzieren, wähle ich die Verteilung der  $k_i$  auch nach einem Potenzgesetz,



**Abb. II.B.15:** Vergleich der gemittelten DFA2-Ergebnisse für 18 Herzschlag-Zeitreihen (je ca. 30 000 Herzschläge) von 10 gesunden Probanden (offene Symbole in (a) und (b), sowie (c)) mit den DFA2-Ergebnissen für modellierte Reihen (je 500 000 simulierte Herzschläge, ausgefüllte Symbole in (a) und (b), sowie (d)). Die reskalierten Fluktuationfunktionen für die Datenreihen (a,b) und für die Amplitudenreihen (c,d) sind doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  aufgetragen; langreichweitige Korrelationen zeigen sich durch eine positive Steigung. Die Symbole kennzeichnen die verschiedenen Schlaf- und Wachstadien, Tiefschlaf ( $\triangle$ ,  $\blacktriangle$ ), Leichtschlaf ( $\circ$ ,  $\bullet$ ), REM-Schlaf ( $\nabla$ ,  $\blacktriangledown$ ), Wachstadien ( $\diamond$ ,  $\blacklozenge$ ), Training ( $*$ ) und gesamte Nacht ( $\square$ ,  $\blacksquare$ ; mit Übergängen). Die durchgezogenen Linien folgen den angegebenen Potenzgesetzen (nach [KANTELHARDTetal-03a]).

$$P(k_i) \sim k_i^{-\delta} \quad \text{für } k_i \geq 6. \quad (\text{II.B.5})$$

Über ein Potenzgesetz für typische Segmentlängen in Herzschlag-Zeitreihen berichten auch [BERNAOLA-GALVANetal-01, FUKUDAetal-03]. Der Exponent  $\delta$  bestimmt hier die Stärke der Korrelationen und ermöglicht ein Einstellen des Korrelationsexponenten  $\gamma$  bzw. des Fluktuationsexponenten  $\alpha$  der generierten Datenreihe. Damit ist  $\delta$  neben  $b$  aus Gl. (II.B.3) der zweite anzupassende Parameter des Modells. Die von mir verwendeten Werte sind in Tabelle II.B.2 angegeben.

Es ist anzumerken, dass  $P(k_i)$  eine diskrete Form annehmen muss, weil  $k_i$  eine diskrete Variable ist; außerdem muss die Verteilung für kleine Werte von  $k_i$  etwas vom Potenzgesetz (II.B.5) abweichen, um die größere Determiniertheit der Herzschlag-Intervalle während der einzelnen Atemzyklen zu berücksichtigen. Daher lautet die exakte Form der Verteilung  $P(k_i)$  in den Modellsimulationen

$$P(k_i) = P_d(k_i) \equiv k_i^{\delta-1} - (k_i + 1)^{1-\delta} \quad \text{für } k_i \geq 6, \quad P(k_i) = 0.8P_d(k_i) \quad \text{für } 1 \leq k_i \leq 4$$

$$\text{und } P(5) = 0.2[P_d(1) + P_d(2) + P_d(3) + P_d(4)] + P_d(5). \quad (\text{II.B.6})$$

Weiterhin ist anzumerken, dass für die Modellierung der Herzschlag-Intervalle während des Trainings die beiden Vorfaktoren in Gl. (II.B.4) modifiziert werden müssen, um die verstärkte Atmung (und deren stärkeren Einfluss auf den Herzschlag) zu berücksichtigen; ich verwende 0.1 (statt 0.03) als Vorfaktor beim 2. Term (Sinus-Arrhythmie) und 0.0125 (statt 0.025) beim 3. Term (Korrelationen).

Damit ist das zweiteilige stochastische Modell für Herzschlag-Intervalle mit transienten Korrelationen vollständig beschrieben. In Abb. II.B.14 sind für die verschiedenen Schlafstadien beispielhafte Verläufe der Herzschlag-Intervalle bei einem gesunden Probanden und simulierte Daten von dem Modell gegenübergestellt. Abbildung II.B.15 zeigt einen Vergleich der DFA-Ergebnisse für die Messdaten von zehn gesunden Probanden und entsprechende Modelldaten. Man erkennt eine gute Übereinstimmung bei den Fluktuationseigenschaften der einzelnen Schlafstadien (Abb. II.B.15(a)) und auch bei den Wachphasen (Abb. II.B.15(b)), obwohl das Modell nur zwei an die einzelnen Phasen angepasste Parameter aufweist. Sowohl die Steigungen (Fluktuationsexponenten  $\alpha$ ) als auch die absolute Stärke der Fluktuationen und die Positionen der Übergänge im Skalenverhalten stimmen überein. Bei den Analysen der Amplitudenreihen (Abb. II.B.15(c,d)) ist die Übereinstimmung zumindest qualitativ und in Bezug auf die Werte der Skalenexponenten  $\alpha_{\text{mag}}$  ebenfalls gut. Damit ist das Modell zur Erzeugung von Surrogatdaten zum Methodentest geeignet.

Bisher habe ich zwar die Modellierung der Herzschlag-Zeitreihen in den einzelnen Schlaf- und Wachphasen beschrieben, aber noch nicht ganz das eigentliche Ziel erreicht, die Modellierung transients Korrelationen, d.h. die Simulation einer Datenreihe für die ganze Nacht einschließlich der Übergänge zwischen den Schlafstadien. Die Frage ist, wie genau die Schlafstadien-Abfolgen reproduziert werden müssen, damit auch die Datenreihe der ganzen Nacht realistisch erscheint. Ausgangspunkt für diese Simulation ist die in Abschnitt II.B.2.b beschriebene Statistik der Schlafstadien [Loetal-01, Loetal-03]. Es zeigt sich, dass schon die (parameterfreie) Berücksichtigung der Schlafstadien-Anteile und der Verteilung der Schlafstadien-Längen (siehe Tabelle II.B.2) zu guter Übereinstimmung zwischen den DFA-Ergebnissen der Messdaten und der Modelldaten führt (siehe Abb. II.B.15(a)), wenn nur zusätzlich an 50% der Schlafstadien-Übergänge eine kurze Phase „Training“ eingeschoben wird. Ohne diese Einschübe ist keine gute Übereinstimmung zu bekommen.

Die Notwendigkeit für diese Einschübe sehr kurzer „Trainingsphasen“ wird vielleicht verständlich, wenn man bedenkt, dass manche Übergänge zwischen Schlafstadien (insbesondere von tiefen Stadien zu leichteren Stadien, zum REM-Schlaf oder gar zu Wachphasen) mit Körperbewegungen einhergehen und eine (relativ) starke Belastung für das in der Nacht mit verringerter Leistung arbeitende Herz-Kreislauf-System darstellen. Bei der Analyse der einzelnen Schlafstadien wurden diese Übergangsphasen herausgeschnitten, und auch sonst werden sie manchmal ignoriert, weil die Körperbewegungen zu Störungen in der Datenaufzeichnung führen, die dann bei der Analyse herausgeschnitten werden. Die Modellierung zeigt, dass diese Übergangsphasen das Fluktuationsverhalten der Nacht als Ganzes beeinflussen, dass aber andererseits die genaue Reihenfolge der Schlafstadien keine Rolle spielt. Es ist interessant, dass eine Innsbrucker Gruppe [STAUDACHERetal-03, TELSERetal-04] den Ansatz verfolgt, besonders starke Fluktuationen im Herzrhythmus als Indikator für Übergänge zwischen Schlafstadien zu verwenden. Vielleicht ist eine Kombination mit meinem im vorhergehenden Abschnitt behandelten Schlafstadienfinder aussichtsreich.

### II.B.4. Analyse des Atemrhythmus gesunder Probanden

Nachdem die letzten drei Kapitel den Herzrhythmus als einfachstes Signal des autonomen Systems des Menschen zum Thema hatten, soll es nun um den Atemrhythmus gehen. Auch die Atmung gehört zum autonomen System, obwohl sie vom Bewusstsein beeinflusst werden kann, aber natürlich nicht im Schlaf. Der Herzschlag zeigt ein ganz bestimmtes Korrelationsmuster in den verschiedenen Wach- und Schlafstadien und die Frage ist nun, ob das auch für die Atmung gilt. Das Ziel der Untersuchung ist es, unsere am Herzschlag gewonnene Arbeitshypothese zu überprüfen, dass die Langzeit-Korrelationen im REM-Schlaf durch eine verstärkte kortikale Beeinflussung des autonomen Nervensystems verursacht werden. Wenn das der Fall ist, sollte die Atmung ein ähnliches Korrelationsverhalten zeigen, denn sie wird im Schlaf von demselben autonomen Nervensystem kontrolliert.

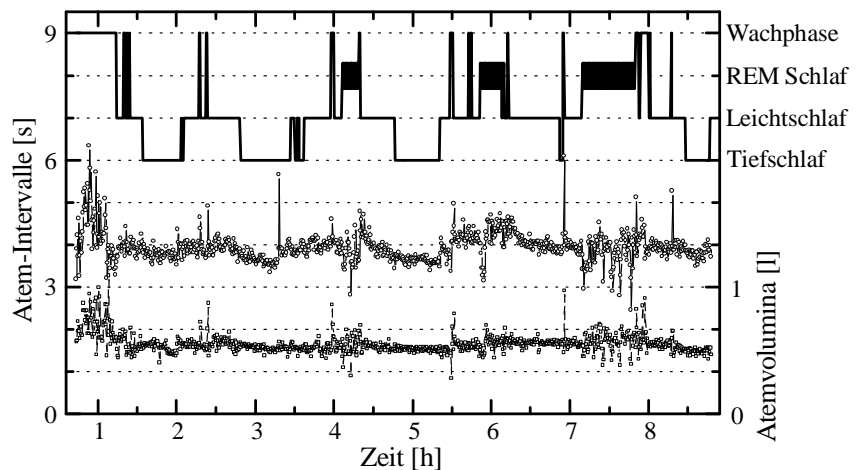
### a) Ergebnisse für die Atemintervalle in den verschiedenen Schlafstadien

Bei der Analyse von Atmungsdaten [KANTELHARDTetal-03b, PENZEL-etal-04, ROSTIGetal-04] wurde ähnlich vorgegangen wie bei den Herzschlag-Daten. In der Studie wurden 29 gesunde Probanden (22 Männer, 7 Frauen, Alter  $26 \pm 3$  Jahre) je zwei Nächte im Schlaflabor einer polysomnografischen Untersuchung unterzogen, wobei sie zusätzlich zur normalen Prozedur eine

Atemmaske trugen und die Zeitpunkte des Ein- und Ausatmens sowie die entsprechenden Atemvolumina registriert wurden. Nur die Daten der zweiten Nacht wurden verwendet, damit nicht Probleme bei der Gewöhnung an die Atemmaske die Ergebnisse verfälschen. Die Schlafstadien wurden wieder nach der Standard-Methode aus EEG, EOG und EMG ermittelt (siehe Abschnitt II.B.2.b), und die Atemdaten wurden aufgeteilt nach Leicht-, Tief- und REM-Schlaf sowie nächtlichen Wachphasen. Bei der Daten-Vorverarbeitung wurden wieder die ersten und letzten 45 Sekunden in jeder Phase weggelassen, um keine Störungen durch Übergänge zu bekommen. Weiterhin wurden alle Phasen weggelassen, in denen Maskenlecks auftraten, die als eine Differenz von mehr als 0.1 Liter zwischen Ein- und Ausatemvolumen in mehr als 30% der Atemzüge definiert sind. Schließlich wurden alle unrealistisch langen ( $> 15$  Sekunden) oder kurzen ( $< 1.5$  Sekunden) Atemzüge als Artefakte herausgeschnitten und die ganze Phase weggelassen, wenn das mehr als 1% der Atemzüge betraf. Da die Anzahl der Atemzüge pro Nacht generell um einen Faktor 3 bis 5 geringer ist als die Anzahl der Herzschläge blieben so nur für 28 (von 29) Probanden hinreichend lange Leichtschlaf-Daten, für 24 genügend Tiefschlaf, für 21 genügend REM-Schlaf und für 14 genügend Wachphasen für die DFA Untersuchung übrig. Abbildung II.B.16 zeigt einen typischen Datensatz mit Schlafstadien, Atem-Intervallen und Atmungsvolumina.

Abbildung II.B.17 zeigt die Ergebnisse der DFA-Untersuchung der Ordnungen 1 bis 4 für einen Probanden; die Analysen wurden wie für die Herzschlag-Daten in Abschnitt II.B.2.c durchgeführt. Man erkennt unkorreliertes Verhalten im Tiefschlaf (Abb. II.B.17(a)) und nur schwache Korrelationen im Leichtschlaf (Abb. II.B.17(b)). Im Vergleich mit dem Herzschlag (siehe Abschnitt II.B.2.c) fehlen hier die Kurzzeitkorrelationen. Das ist verständlich, denn diese waren beim Herzschlag hauptsächlich auf eine Beeinflussung durch die Atmung (Sinus-Arrhythmie) zurückgeführt worden. Im REM-Schlaf und in den Wachphasen finden wir hingegen wieder Langzeit-Korrelationen.

Abbildung II.B.18 zeigt die Ergebnisse für sechs andere gesunde Probanden; man erkennt dass sie ungefähr gleiches Skalenverhalten der Atemzüge in den einzelnen Schlaf- und Wachstadien aufweisen. Allerdings gibt es auch deutliche Schwankungen zwischen den einzelnen Probanden, was unter anderem auch auf die Kürze der Atmungs-Datensätze im Vergleich mit den 3- bis 5-mal längeren Herzschlag-Datensätzen erklärt werden kann. Abbildung II.B.19 zeigt in der oberen Reihe die

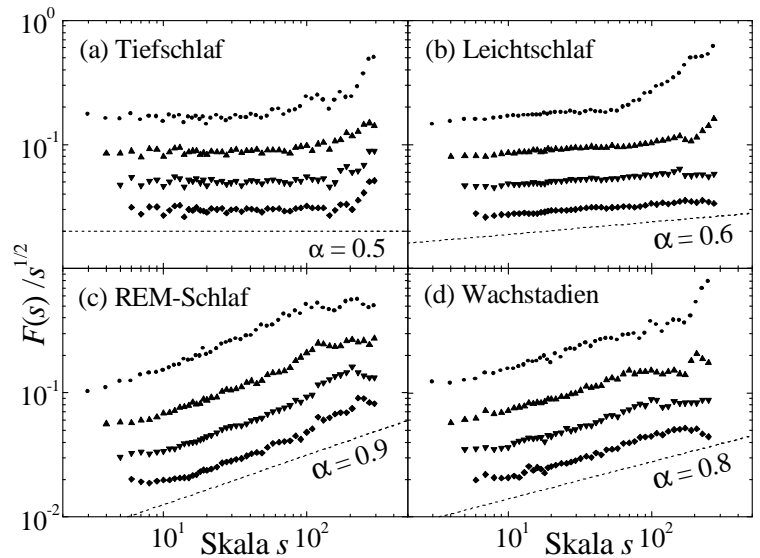


**Abb. II.B.16:** Ein typischer Datensatz der Atmungsstudie für einen gesunden Probanden. Die obere Kurve ist das aus EEG, EOG und EMG bestimmte Somnogramm (Schlafstadien-Profil), wobei – entsprechend den Konventionen der Schlafmedizin – das oberste Niveau „wach“ bedeutet, der breite Balken REM-Schlaf, und sich Leicht- und Tiefschlaf nach unten anschließen. Darunter sind die Reihen der Zeitintervalle zwischen aufeinander folgenden Atemzügen und Atemvolumina gezeigt (nach [KANTELHARDTetal-03b]).

Histogramme der Fluktuations-exponenten  $\alpha$ , die ich für die Atmungsintervalle erhalten habe durch Anpassung von Geraden an die DFA2-Fluktuationsfunktionen in doppelt logarithmischer Auftragung im Bereich von  $s = 8$  Atemzügen bis zu einem Viertel der Länge des jeweiligen längsten Schlafstadiums ( $s \leq N/4$ ). Man erkennt deutlich, dass die Histogramme für Tief- und Leichtschlaf um  $\alpha = 0.5$  bis  $0.6$  zentriert sind (annähernd unkorreliertes Verhalten innerhalb der Unsicherheit), während für REM-Schlaf und die Wachstadien die Verteilung ihren Schwerpunkt eher um  $\alpha = 0.8$  bis  $0.9$  hat (eindeutlich langreichweitige Korrelationen bis zur Länge der einzelnen Phasen). Die numerischen Mittelwerte und Standardabweichungen sind in Tabelle II.B.3 angegeben.

Um die Signifikanz der Ergebnisse zu testen habe ich wieder mit der Fourier-Filter-Methode (Abschnitt

II.A.1.c) Surrogat-Daten generiert und auch dafür dieselbe Untersuchung durchgeführt. Die entsprechenden Histogramme sind in der zweiten Reihe von Abb. II.B.19 gezeigt.



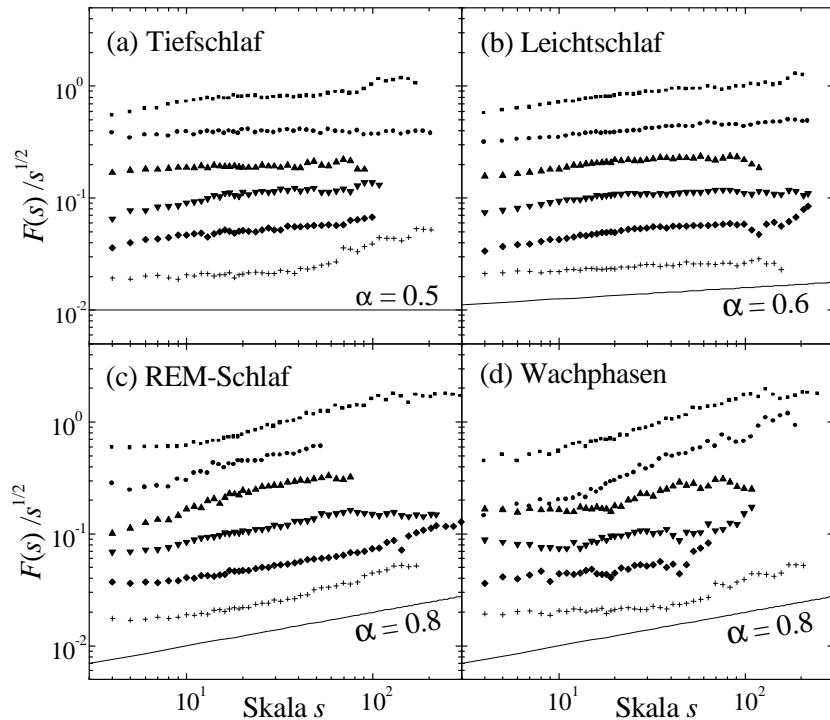
**Abb. II.B.17:** DFA der Atmungsintervalle eines gesunden Probanden in den verschiedenen Schlaf- und Wachstadien. Die reskalierten Fluktuationsfunktionen  $F(s)/s^{1/2}$  sind doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  (in Atemzügen) aufgetragen, so dass ein horizontaler Verlauf unkorreliertem Verhalten entspricht. Die Symbole entsprechen den Ordnungen der Trendbereinigung, DFA1 ( $\bullet$ ), DFA2 ( $\blacktriangle$ ), DFA3 ( $\blacktriangledown$ ) und DFA4 ( $\blacklozenge$ ). Insbesondere im Leichtschlaf (b) erkennt man, wie Trends, die die DFA1-Ergebnisse auf großen Skalen verfälschen, bei höheren Ordnungen beseitigt werden. Langreichweitige Korrelationen treten im REM-Schlaf und in den Wachstadien auf. Die gestrichelten Geraden haben die angegebenen Steigungen und sind zum Vergleich gezeigt (nach [KANTELHARDTetal-03b]).

**Tabelle II.B.3:** Vergleich der Ergebnisse für die Analyse von Herzrhythmus und Atmung bei 29 gesunden Probanden in den verschiedenen Schlaf- und Wachstadien. Neben den Mittelwerten der Herzfrequenz, der Atemintervalle und der Atemvolumina sind die DFA2-Fluktuationsexponenten  $\alpha$  für die untersuchten Größen angegeben. Man erkennt, dass die Atmung im REM-Schlaf stärker langreichweitig korreliert ist als der Herzschlag, während das Verhältnis in den Wachphasen umgekehrt ist. In den non-REM Stadien sind die Signale nahezu unkorreliert.

	Tiefschlaf	Leichtschlaf	REM-Schlaf	Wachphasen
Herzrate [1/min]	58.0	56.9	60.8	66.1
Mittleres Atemintervall $T_{\text{tot}}$ [s]	3.81	3.86	3.55	3.88
Mittleres Atemvolumen $V_m$ [ml]	480	484	459	575
Exponent $\alpha$ Herzschlag	$0.58 \pm 0.12$	$0.67 \pm 0.14$	$0.86 \pm 0.12$	$0.94 \pm 0.10$
Exponent $\alpha$ Atemrhythmus ( $T_{\text{tot}}$ )	$0.58 \pm 0.10$	$0.63 \pm 0.05$	$0.91 \pm 0.09$	$0.84 \pm 0.12$
Exponent $\alpha$ Atemvolumina ( $V_m$ )	$0.59 \pm 0.13$	$0.62 \pm 0.08$	$0.93 \pm 0.14$	$0.69 \pm 0.11$
Exponent $\alpha$ für $T_I$	$0.55 \pm 0.09$	$0.59 \pm 0.05$	$0.76 \pm 0.08$	$0.81 \pm 0.12$
Exponent $\alpha$ für $T_E$	$0.59 \pm 0.09$	$0.61 \pm 0.04$	$0.90 \pm 0.11$	$0.78 \pm 0.13$
Exponent $\alpha$ für $V_I$	$0.59 \pm 0.12$	$0.63 \pm 0.08$	$0.89 \pm 0.13$	$0.78 \pm 0.12$
$\alpha$ für $T_I/T_{\text{tot}}$ (Atemzeiteinteilung)	$0.55 \pm 0.12$	$0.58 \pm 0.07$	$0.71 \pm 0.10$	$0.59 \pm 0.10$
$\alpha$ für $V_I/T_I$ (Atemantrieb)	$0.63 \pm 0.12$	$0.66 \pm 0.08$	$0.93 \pm 0.13$	$0.81 \pm 0.10$

### b) Vergleich von Atem- und Herzrhythmus

In Tabelle II.B.3 sind die Ergebnisse der DFA der Herzschlag-Intervall-Reihen in den verschiedenen Schlaf- und Wachphasen (siehe Abschnitt II.B.2.c) mit denen für Atmungs-Intervall-Reihen verglichen, und zwar anhand der Daten von denselben 29 gesunden Probanden. Man erkennt, dass es im Tief- und Leichtschlaf keine signifikanten Unterschiede gibt. Hier sind die Fluktuationen in beiden Fällen auf größeren Zeitskalen  $s$  nahezu unkorreliert. Im REM-Schlaf sind Atmung und Herzschlag leicht beschleunigt und beide Signale weisen Langzeitkorrelationen auf, die beim



**Abb. II.B.18:** DFA2 der Atmungsintervalle von sechs gesunden Probanden in den verschiedenen Schlaf- und Wachstadien. Die Abbildung entspricht II.B.17, außer dass hier die Symbole verschiedene Probanden und nicht verschiedene DFA-Ordnungen kennzeichnen (nach [KANTELHARDTetal-03b]).

Atemrhythmus sogar noch ein wenig stärker ausgeprägt sind als beim Herzschlag. Die Ähnlichkeit der Ergebnisse bezüglich des Korrelationsverhaltens lässt sich entweder mit einer starken Kopplung zwischen Herzschlag und Atmung erklären oder dadurch, dass die Langzeitkorrelationen im REM-Schlaf in beiden Fällen von derselben Quelle, nämlich von einer kortikalen Beeinflussung des autonomen Nervensystems, ausgehen. Gegen die erste Interpretation spricht, dass die Phasen-Synchronisation zwischen Atmung und Herzschlag relativ schwach ist [SCHÄFERetal-98, SCHÄFERetal-99] und darum keine starke Kopplung existiert. Die Sinus-Arrhythmie scheidet als Indiz für eine starke Kopplung auch aus, weil sich ihr Einfluss nur im hochfrequenten Schwanken des Herzschlags nachweisen lässt; für Langzeitkorrelationen kann sie keine Rolle spielen.

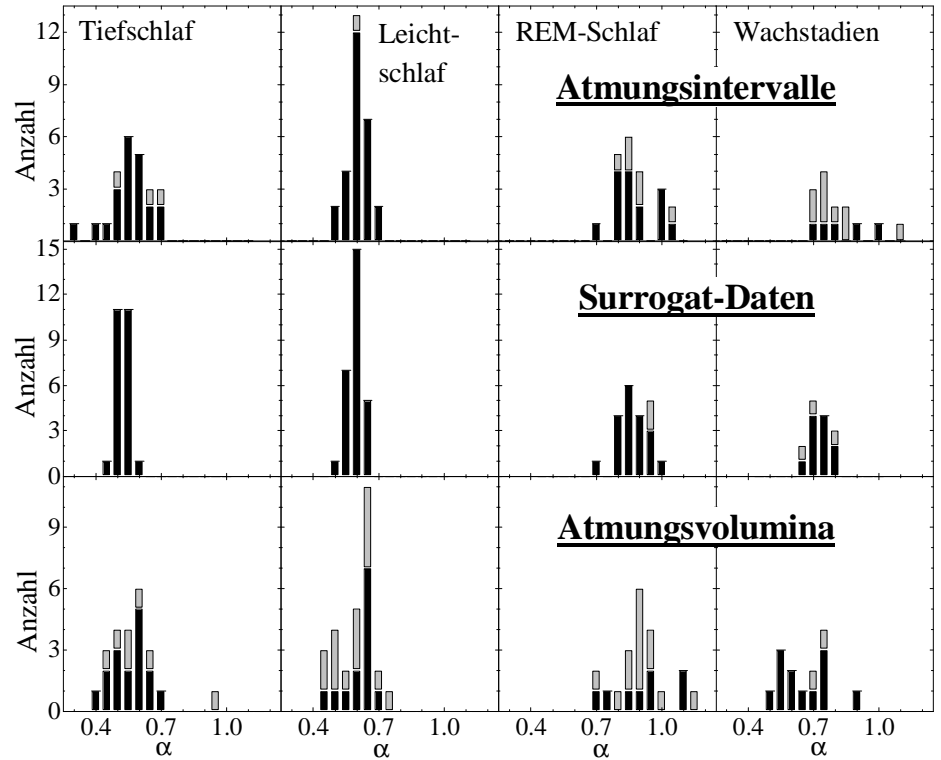
Die zweite Interpretation – eine gleichartige kortikale Beeinflussung von Atmung und Herzschlag im REM-Schlaf, der oft mit dem Traumschlaf identifiziert wird – ist hingegen vom Korrelationsverhalten in den Wachphasen gestützt. Überraschend finden wir, dass die Langzeitkorrelationen in den Wachphasen beim Atemrhythmus deutlich schwächer sind als beim Herzrhythmus, während es im REM-Schlaf einen geringen umgekehrten Unterschied gab (siehe Tabelle II.B.3). Man kann dies mit der Annahme eines zufälligen Einflusses des Bewusstseins auf die Atmung einfach erklären. Weil man in den Wachphasen die Atmung bewusst stoppen oder beschleunigen kann – und das z.B. beim Sprechen und körperlichen Aktivitäten auch regelmäßig tut – wird das Korrelationsverhalten eher unkorreliert. Weder bei der Atmung im Schlaf noch beim Herzschlag ist eine solche Beeinflussung möglich. Daher unterstützen die Ergebnisse der Atmungsanalyse die Interpretation der Herzschlag-Korrelationen in den verschiedenen Schlafstadien.

### c) Ergebnisse für die Atemvolumina

Aufgrund der Untersuchung der Probanden mit Atemmasken liegen neben den Zeitintervallen zwischen aufeinander folgenden Atemzügen zusätzlich Informationen über die Atemvolumina und über

die Details der einzelnen Atemzüge (Ein- und Ausatemzeiten, Ein- und Ausatemvolumina) vor. Die Volumina sind im Prinzip unabhängig von den Zeitintervallen. Daher ist es sinnvoll, auch ihr Korrelationsverhalten in den einzelnen Schlaf- und Wachstadien zu untersuchen.

Abbildung II.B.20 zeigt die repräsentativen DFA-Ergebnisse für einen gesunden Probanden. Man erkennt, dass wieder nahezu unkorreliertes Verhalten im Tief- und Leichtschlaf vorliegt, während im REM-Schlaf langreichweitige Korrelationen vorhanden sind. Diesmal sind vor allem im REM-Schlaf trendbedingte Abweichungen bei der DFA1 zu sehen, was unterstreicht, dass



**Abb. II.B.19:** Histogramme der Fluktuationsexponenten  $\alpha$  für gesunde Probanden im Tiefschlaf (links), Leichtschlaf (Mitte links), REM-Schlaf (Mitte rechts) und in Wachstadien (rechts) bezüglich ihrer Atemintervalle (oben), für Surrogatdaten (Mitte) und Atemvolumina (unten), jeweils soweit die Daten hinreichend lang für die Auswertung waren. Die Exponenten wurden bestimmt durch Anpassung von Geraden an die doppelt logarithmisch aufgetragenen DFA2-Fluktuationsfunktionen  $F(s)$  im Bereich  $8 \leq s \leq N/4$ , wobei  $N$  die Anzahl der Atemzüge im jeweils längsten Schlafstadium jeder Art für jeden Datensatz bezeichnet. Die schwarzen Balken zeigen gut passende Potenzgesetze an (Fehlerquadrat  $\chi^2 < 0.004$  pro Datenpunkt) und die grauen Balken Anpassungen mit größeren Abweichungen. Die Surrogatdaten wurden mit der Fourier-Filter-Methode erzeugt mit  $\alpha = 0.55$  (Tiefschlaf),  $0.6$  (Leichtschlaf),  $0.9$  (REM-Schlaf) und  $0.8$  (Wachstadien) bei exakt den gleichen Schlafstadienlängen wie in den Messdaten für Atemintervalle und Atemvolumina (nach [KANTELHARDTetal-03b]).

eine lineare Trendbereinigung für physiologische Daten in vielen Fällen nicht ausreicht. Die Ergebnisse für alle 29 Probanden sind in den Histogrammen in der letzten Reihe von Abb. II.B.19 zusammengefasst; die Mittelwerte der Fluktuationsexponenten  $\alpha$  der Atemvolumina in den einzelnen Schlaf- und Wachphasen stehen in Tabelle II.B.3. In den einzelnen Schlafstadien gibt es praktisch keine Unterschiede zum Korrelationsverhalten des Atemrhythmus. In den Wachstadien hingegen sind die Korrelationen der Atemvolumina nochmals deutlich schwächer als für den Atemrhythmus. Im Sinne der im vorhergehenden Abschnitt vorgestellten Interpretation bedeutet das, dass das Bewusstsein und wohl auch bewusstseinsgesteuerte Aktivitäten einen größeren steuernden Einfluss auf die Atemvolumina ausüben als auf den Atemrhythmus.

Anders sieht das Bild aus, wenn man nicht die Gesamtatemzeit ( $T_{\text{tot}}$ ) mit dem Atemvolumen vergleicht, sondern Quotienten betrachtet, denen eine besondere physiologische Bedeutung zugeordnet wurde [MILIC-EMILI&GRUNSTEIN-76, TOBINetal-88]. Abbildung II.B.21 zeigt die DFA-Ergebnisse für Zeitreihen der Verhältnisse aus Einatemzeit ( $T_1$ ) und Gesamtatemzeit ( $T_{\text{tot}}$ ), die so genannte *Atemzeiteinteilung* („respiratory timing“), und Zeitreihen der Verhältnisse aus Einatemvolumen ( $V_1$ ) und Einatemzeit ( $T_1$ ), den so genannten *Atemantrieb* („respiratory drive“). Die Mittelwerte der nu-

merisch bestimmten effektiven Fluktuationsexponenten sind wieder in Tabelle II.B.3 angegeben. Man erkennt, dass die Atemzeiteinteilungs-Reihen ein prinzipiell ähnliches Korrelationsverhalten aufweisen wie die Atemzeitintervalle selbst, obwohl die Langzeitkorrelationen im REM-Schlaf deutlich schwächer ausgeprägt sind. Der Atemantrieb zeigt hingegen starke Kurzzeitkorrelationen (siehe Abb. II.B.21(c,d)), denen sich auf größeren Zeitskalen ein eher unkorrelierter – im non-REM Schlaf sogar scheinbar antikorrelierter – Bereich anschließt. Für diese Daten kann der Exponent  $\alpha$  daher höchstens als effektiver Exponent aufgefasst werden.

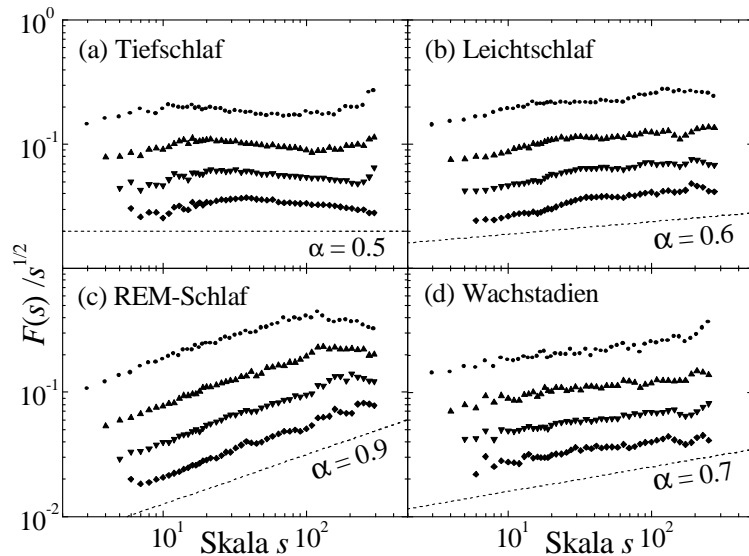
Die charakteristischen Unterschiede bedeuten, dass die Regelung des Atemantriebs nach einem anderen

Mechanismus erfolgt als die Regelung der Atemzeiten. Wenn man für die Langzeitkorrelationen im REM-Schlaf eine verstärkte kortikale Beeinflussung des autonomen Nervensystems als Ursache annimmt, passt das vorliegende Ergebnis sehr gut zu einem Resultat bei wachen Probanden in Ruhe, dass sich die Atemzeiteinteilung weitgehend durch äußere Vorgaben über das Bewusstsein beeinflussen lässt, während der Atemantrieb sehr starr geregelt und praktisch auch im Wachen kaum beeinflussbar ist [RAFFERTY&GARDNER-96]. Die starre Regelung des Atemantriebs äußert sich hier in den Kurzzeitkorrelationen und die fehlende kortikale Beeinflussung im Fehlen von Langzeitkorrelationen auch im REM-Schlaf. Nur bei der Atemzeiteinteilung kann der kortikale Einfluss Langzeitkorrelationen auslösen. Wie Tabelle II.B.3 weiter zeigt, führt dieser Einfluss in den Wachstadien sogar zu fast unkorreliertem Verhalten der Atemzeiteinteilung.

Es ist erstaunlich, dass sich die Regelung des Atemantriebs so deutlich von der Regelung der Atemzeiteinteilung und des Herzschlags unterscheidet, insbesondere weil die Atemzeiteinteilung sehr stark vom Bewusstsein beeinflusst wird aber der Herzschlag überhaupt nicht. Im Bezug auf die Beeinflussung durch das Bewusstsein liegt der Atemantrieb dazwischen, wie meine Ergebnisse in den Wachstadien in Übereinstimmung mit der Interpretation von [RAFFERTY&GARDNER-96] zeigen. Trotzdem gibt es beim Atemantrieb keine Langzeitkorrelationen im REM-Schlaf – im Gegensatz zur Atimeinteilung und zum Herzschlag. Daher deuten die Ergebnisse darauf hin, dass die Langzeitkorrelationen im REM-Schlaf (und beim Herzen auch in den Wachphasen) nicht durch bewusstseinsgesteuerte Aktivitäten ausgelöst werden, sondern durch eine kortikale Beeinflussung, die vom autonomen Zentrum im Hirn ausgeht.

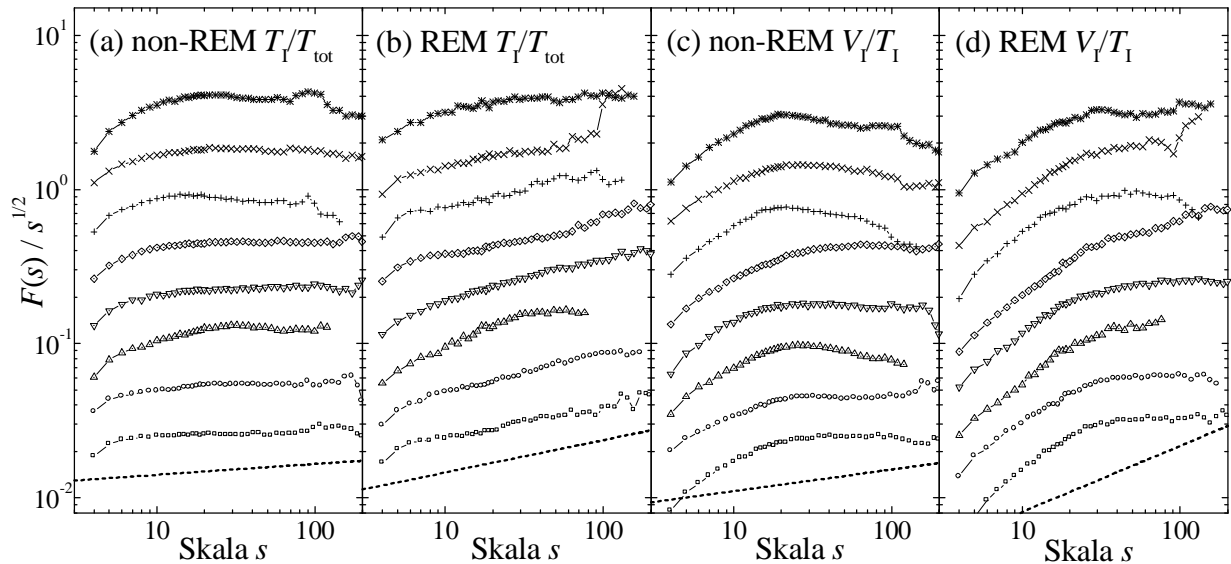
## II.B.5. Herztod-Risiko Erkennung nach Herzinfarkt

In den vorhergehenden Kapiteln habe ich zur Charakterisierung von nichtstationären medizinischen Zeitreihen hauptsächlich die DFA-Methode verwendet, die zwar Trends in den Daten beseitigen kann, aber eine vorherige Aufteilung der Reihen in homogene Bereiche (z.B. Schlafstadien) erforder-



**Abb. II.B.20:** DFA der Atmungsvolumina eines gesunden Probanden in den verschiedenen Schlaf- und Wachstadien. Die reskalierten Fluktuationfunktionen  $F(s)/s^{1/2}$  sind doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  (in Atemzügen) aufgetragen, so dass ein horizontaler Verlauf unkorreliertem Verhalten entspricht. Die Symbole entsprechen den Ordnungen der Trendbereinigung, DFA1 (●), DFA2 (▲), DFA3 (▼) und DFA4 (◆). Die gestrichelten Geraden haben die angegebenen Steigungen und sind zum Vergleich gezeigt (nach [KANTELHARDTetal-03b]).





**Abb. II.B.21:** DFA2 der Verhältnisse  $T_I/T_{\text{tot}}$  (Atmungszeiteinteilung, „respiratory timing“, (a,b)) und  $V_I/T_I$  (Atmungsantrieb, „respiratory drive“, (c,d)), deren Vergleich Aussagen über die Unterschiede in der Regelung der Atmung im non-REM Schlaf (Leicht- und Tiefschlaf, (a,c)) und im REM-Schlaf (b,d) erlaubt. Die reskalierten Fluktuationen  $F(s)/s^{1/2}$  sind doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  (in Atemzügen) aufgetragen, so dass ein horizontaler Verlauf unkorreliertem Verhalten entspricht. Die Symbole gehören zu acht verschiedenen Probanden (vertikal verschoben). Die gestrichelten Geraden sind zum Vergleich gezeigt und zeigen Potenzgesetze an mit  $\alpha = 0.57$  (a),  $0.71$  (b),  $0.64$  (c) und  $0.93$  (d), die den mittleren Verlauf im Bereich von 7 bis 35 Atemzügen bei allen Probanden entsprechen (siehe auch Tabelle II.B.3). Man erkennt, dass der Atmungsantrieb sehr stark durch zusätzliche Kurzzeitkorrelationen beeinflusst wird und nur dadurch höhere Werte des effektiven Exponenten  $\alpha$  aufweist (nach [ROSTIGetal-04]).

dert, weil sonst Langzeitkorrelationen in einem Bereich unkorreliertes Verhalten in einem anderen Bereich überdecken. Die Unterscheidung der Aktivitätsphasen ist aufwendig und bei den meisten medizinischen Studien bisher nicht möglich. Langzeitaufzeichnungen vor allem des EKGs über 24 Stunden sind hingegen zur Untersuchung der Herzfunktion sehr häufig; es gibt dazu große Studien, und auch mit solchen Daten müssen Diagnosen gestellt werden. Dabei kommt es oft nicht entscheidend auf das Langzeit-Korrelationsverhalten an, sondern auf Quasiperiodizitäten in den Zeitreihen, die die biologischen Regelkreise charakterisieren sollen. Um nichtstationäre 24-Stunden Datensätze in großen Studien auszuwerten, wird eine Methode benötigt, die ohne manuelle Eingriffe und Stationaritäts-Überprüfungen arbeitet. Als solche Methode habe ich die Phasen-ausgerichtete Signal-Mittelung (PRSA) gemeinsam mit A. Bauer und G. Schmidt entwickelt, siehe Kapitel II.A.5. Hier beschreibe ich – ausgehend von der medizinischen Motivation – die Optimierung der Methode und ihren Test an zwei Blindstudien [BAUERetal-04].

### a) Medizinische Motivation, konventionelle Verfahren zur Risikoabschätzung und Beschreibung der Studien mit Infarktpatienten

Der plötzliche Herztod ist eine der wichtigsten Todesursachen für die erwachsene Bevölkerung in der industrialisierten Welt [MYERBURGetal-93, MYERBURGetal-97]. Bei Patienten, die einen Herzinfarkt erlitten haben, beträgt trotz Behandlung die Wahrscheinlichkeit für plötzlichen Herztod bis zu 10% in zwei Jahren [MOSSetal-02]. Ein wesentlicher Teil dieser Todesfälle könnte durch die Implantation eines Defibrillators verhindert werden. Die Operation kann aber wegen der Nebeneffekte und der hohen Kosten nicht bei jedem Herzinfarkt-Patienten durchgeführt werden. Daher ist es wichtig, das individuelle Risiko für einen tödlichen Herzanfall möglichst genau zu bestimmen, um dann den Herzinfarkt-Patienten mit dem höchsten Risiko einen Defibrillator zu implantieren.

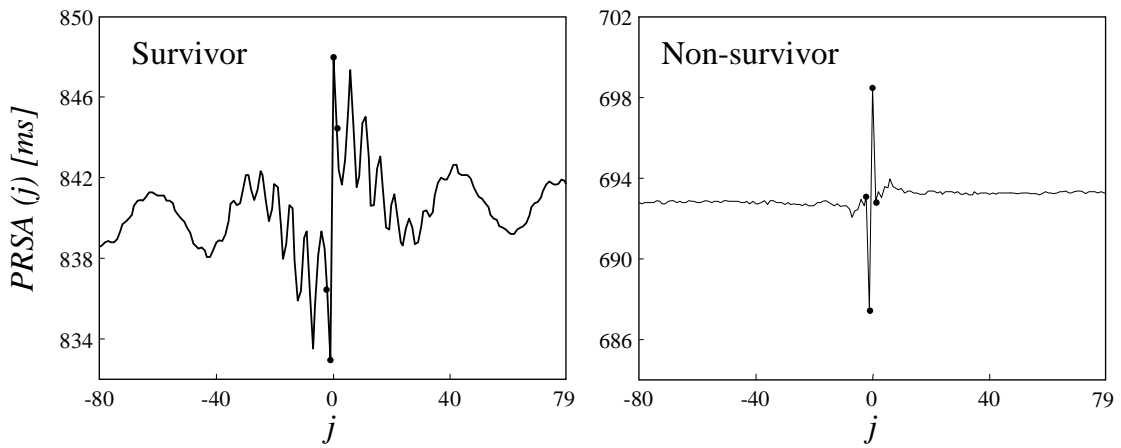
Gegenwärtig wird insbesondere von der amerikanischen kardiologischen Gesellschaft die „linke ventrikuläre Auswurffraktion“ (left ventricular ejection fraction, LVEF) als „Goldstandard“ zur Risikoabschätzung bei Herzinfarkt-Patienten empfohlen [GREGORATOS*etal*-02]. LVEF bezeichnet das Verhältnis zwischen dem pro Herzschlag von der linken Herzkammer gepumpten Blutvolumen und dem bei jedem Schlag in der Herzkammer verbleibenden Blutvolumen; d.h. es ist eine Art Volumen-Wirkungsgrad der linken Herzkammer. Der Normalwert für Gesunde liegt bei über 65% [ROCHE-99]. Die Volumina lassen sich in zeitaufgelösten Röntgenaufnahmen bestimmen, wenn ein Kontrastmittel ins Blut gespritzt wird. Die Untersuchung hat den Nachteil, dass der Patient das Kontrastmittel und eine nicht unerhebliche Dosis an Röntgenstrahlung ertragen muss. Eine ebenfalls mögliche aber weniger genaue Messung mit Ultraschall wird in München nur bei knapp 13% der Patienten bevorzugt.

Demgegenüber hätte ein nicht-invasives und ohne Strahlenbelastung auskommendes Verfahren, wie die ambulante 24-Stunden Aufzeichnung und Auswertung des EKGs, für die nur wenige Messelektroden aufgeklebt werden müssen, wesentliche Vorteile. Üblicherweise [BIGGER*etal*-92, TASKFORCE-96] berechnet man die Standardabweichung der Herzschlagintervalle vom Mittelwert (SDNN) sowie die gesamte spektrale Leistung in den drei Frequenzbändern HF (high frequency,  $0.15 \text{ Hz} < f \leq 0.4 \text{ Hz}$ ), LF (low frequency,  $0.04 \text{ Hz} < f \leq 0.15 \text{ Hz}$ ) und VLF (very low frequency,  $0.0033 \text{ Hz} < f \leq 0.04 \text{ Hz}$ ), siehe Abschnitt II.B.2.d für eine genaue Beschreibung des Verfahrens. Es ist bekannt, dass darauf basierende Analysen der Herzfrequenzvariabilität einen statistisch signifikanten zusätzlichen Beitrag zur Risikoabschätzung liefern können [KLEIGER*etal*-87, BIGGER*etal*-92, ZUANETTI*etal*-96, LAROVERE*etal*-98], aber weil der LVEF-Parameter für sich genommen als zuverlässiger gilt, konnten sich diese Analysen bisher in der Praxis nicht durchsetzen. Ein Grund für die Probleme mit den Herzfrequenz-Parameter dürfte in den Nichtstationaritäten der Aufzeichnungen liegen, die eine einfache Spektralanalyse zu sehr stören.

Die Münchner Herz-Infarkt-Patienten-Studie (ISAR) [BARTHE*etal*-03] umfasst 1455 Patienten unter 76 Jahren (Durchschnittsalter  $56 \pm 10$  Jahre, 21% Frauen, 17% mit Diabetes), die in den Jahren 1996 bis 2000 einen nicht tödlichen Herzinfarkt erlitten haben und im Deutschen Herzzentrum München oder in der 1. Medizinischen Klinik rechts der Isar der Technischen Universität München behandelt wurden. Von allen Patienten wurden ungefähr zwei Wochen nach dem Infarkt 24-Stunden EKGs aufgezeichnet und der LVEF-Index bestimmt (Durchschnitt  $54 \pm 13\%$ ). Die Patienten wurden alle 6 Monate erneut untersucht; innerhalb von zwei Jahren verstarben 70 von ihnen. Anhand der Daten dieser Studie haben wir die PRSA-Methode optimiert und einen Risiko-Indikator-Parameter definiert. Ziel war es, aus den ursprünglichen, wenige Tage nach dem Infarkt aufgezeichneten 24-Stunden EKGs eine Vorhersage zu machen, ob der Patient in den zwei Folgejahren gestorben ist. Ein unabhängiger Test erfolgte anschließend mit zwei ähnlichen Studien aus London [COPIE*etal*-96, REDWOOD*etal*-97] und Oulu (Finnland) [HUIKURI*etal*-03], an denen 656 bzw. 600 Patienten teilnahmen, von denen 66 bzw. 77 innerhalb von zwei Jahren gestorben sind.

### b) Optimierung der PRSA und Definition eines Risiko-Parameters

Jetzt wende ich die PRSA-Methode auf die 24-Stunden Reihen der Zeitintervalle zwischen aufeinander folgenden Herzschlägen aus der ISAR-Studie an, um einen geeigneten Parameter zur Charakterisierung der PRSA-Kurven zu finden. Bei der Anwendung haben wir zusätzlich zu der in Kapitel II.A.5 detailliert beschriebenen Prozedur noch Triggerpunkte ausgeschlossen, die mit hoher Wahrscheinlichkeit auf Artefakte in den (ungeprüften) Zeitreihen zurückgingen. Abweichend von dem Triggerkriterium (II.A.66) ( $x_i > x_{i-1}$ ) haben wir dazu nur Anstiege der Herzschlag-Zeitintervalle um maximal 5% zugelassen ( $1.05 x_{i-1} > x_i > x_{i-1}$ ), denn stärkere Anstiege sind mit hoher Wahrscheinlichkeit Artefakte einer nicht zuverlässigen Erkennung der einzelnen Herzschläge. Dennoch lag die Anzahl der Triggerpunkte noch bei über 40% der Gesamtzahl der Herzschlag-Intervalle.



**Abb. II.B.22:** Ergebnisse der PRSA-Methode mit  $T = 1$  und  $L = 80$  für einen typischen überlebenden Patienten (links) und einen Nicht-Überlebenden (rechts) aus der ISAR-Studie. Der Phasen-ausgerichtete Signal-Mittelwert ist in Millisekunden gegen den Abstand  $j \equiv \delta$  von den Triggerpunkten (Anzahl der Herzschläge) aufgetragen. Man erkennt, dass zwei Quasiperiodizitäten bei dem Überlebenden stark ausgeprägt sind. Die ausgefüllten Punkte werden für die Berechnung des Parameters CWA in Gl. (II.B.7) verwendet; beide Quasiperiodizitäten tragen dazu bei (nach [BAUERetal-04]).

Abbildung II.B.22 zeigt typische Ergebnisse für einen Patienten, der mehr als zwei Jahre nach dem Herzinfarkt überlebt hat, und für einen Patienten, der schon nach kurzer Zeit gestorben ist. Die stärksten Oszillationen in  $PRSA(\delta)$  mit  $T = 1$ , d.h. ohne eine Unterdrückung der hohen Frequenzen, treten in der Mitte um die Triggerpunkte auf, die bei  $\delta = 0$  ausgerichtet sind. Beim Überlebenden erkennt man hochfrequente Oszillationen mit einer Periode von ungefähr fünf Herzschlägen, die wohl von der Atmung verursacht werden (Sinus-Arrhythmie). In Abständen über ca. 30 Herzschlägen von der Mitte klingen diese Oszillationen ab, weil die Phasen aufgrund von Nichtstationaritäten nicht mehr synchron sind; d.h. die Kohärenzzeit der hochfrequenten Quasiperiodizität liegt etwa bei 30 Herzschlägen. Man erkennt auch eine langsamere quasiperiodische Schwingung mit einer Periode von ungefähr 35 Herzschlägen, deren Abklingen erst für größere Fensterbreiten  $L$  zu sehen wäre. Die PRSA-Kurve des Nicht-Überlebenden offenbart hingegen kaum quasiperiodische Oszillationen. Alle Frequenzkomponenten sind schwächer, was auf die Abwesenheit von funktionierenden biologischen Regelkreisen hindeutet. Die Schwingung in der Mitte ähnelt der negativen Ableitung einer  $\delta$ -Funktion – der erwarteten PRSA-Kurve für weißes Rauschen.

Die in Abb. II.B.22 gezeigten PRSA-Kurven lassen sich auf viele unterschiedliche Weisen quantifizieren. Eine Möglichkeit, die am meisten der Standardanalyse der Herzfrequenzvariabilität ähnelt, besteht darin, das Frequenzspektrum zu berechnen und dann die gesamte spektrale Leistung in den drei Bändern HF, LF und VLF zu ermitteln. Dazu sind die beiden Parameter  $T$  und  $L$  jeweils so anzupassen, dass die berechnete PRSA-Kurve für das betreffende Frequenzband optimal ist. Auf diese Weise lassen sich für jeden Patienten drei Zahlen ermitteln, deren Korrelation mit dem Überleben analysiert werden kann. Die Durchführung der Analyse zeigt, dass die aus dem PRSA bestimmten HF-, LF- und VLF-Werte deutlich besser mit dem Überleben der Patienten korrelieren als das für die entsprechenden HF-, LF- und VLF-Werte aus der Standard-Spektralanalyse ohne vorherige Berechnung des PRSA der Fall ist. Insbesondere der LF-Wert der PRSA-Kurve eignet sich in der ISAR-Studie gut zur Risikoabschätzung. Die Korrelation ist jedoch für keinen dieser Parameter statistisch signifikant besser als für den Goldstandard LVEF, den wir übertreffen wollen.

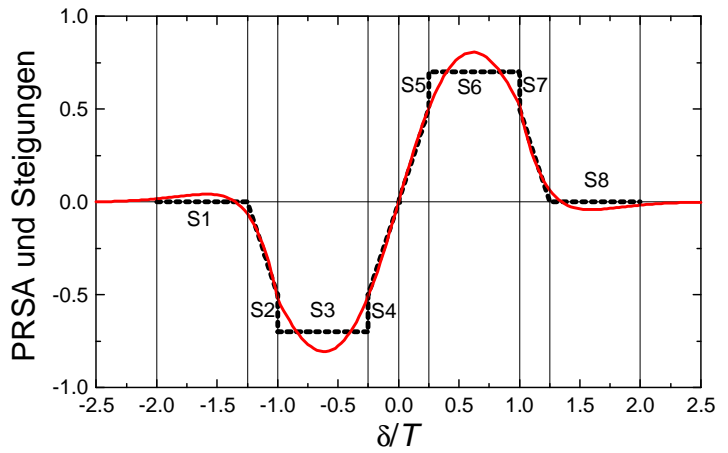
Eine andere Möglichkeit zur Quantifizierung der PRSA-Kurven besteht darin, die Kurven durch einzelne Werte oder Steigungen zu beschreiben. Eine solche Charakterisierung durch acht Steigungswerte ist in Abb. II.B.23 skizziert. Diese Parameterisierung kann nur die zentrale Oszillation der PRSA-Kurve beschreiben. Darum ist sie für verschiedene Werte von  $T$  zu wiederholen, wobei jeweils Quasiperiodizitäten mit unterschiedlicher Frequenz selektiert und charakterisiert werden.

Auf diese Art kommt man bei der Betrachtung von sechs Frequenzen – z.B. jeweils zwei in jedem der drei üblichen Bänder – schnell zu fast 50 Parametern. Unsere Rechnungen für die ISAR-Studie ergaben, dass vor allem der Steigungsparameter S5 für  $T = 16$  bis 20 Herzschläge stark mit dem Überleben der Patienten in den folgenden zwei Jahren korreliert ist und damit gut zur Risikoabschätzung taugt. Einen geringen zusätzlichen, aber statistisch unabhängigen Beitrag liefert überraschenderweise der Parameter S1, ebenfalls für  $T = 16$  bis 20 Herzschläge. Allerdings ist diese Art der Quantifizierung der PRSA-Kurve recht kompliziert und daher störanfällig. Für ungeprüfte Datenreihen hat sie sich in unseren Versuchen als nicht hinreichend robust gegenüber Artefakten erwiesen. Sie hebt außerdem hauptsächlich auf die *eine* Frequenz ab, die durch  $T \approx 18$  Herzschläge selektiert wird und etwa zwischen dem LF- und dem VLF-Band liegt.

Damit konnten weder die ganz in der Frequenzdomäne angesiedelten Spektralanalyse-Parameter noch die ganz in der Zeit-Domäne angesiedelten Steigungen aus der PRSA-Kurve als Parameter voll überzeugen. Während die Spektralanalyse der PRSA-Kurve die ungleichmäßige Bedeutung der verschiedenen Abstände  $\delta$  vom Zentrum (von den Triggerpunkten) ignoriert, können die Parameter der Zeitdomäne nicht verschiedene Quasiperiodizitäten gleichzeitig erfassen und sind zu empfindlich gegenüber Artefakten. Einen guten Kompromiss ermöglicht die Verwendung eines Wavelet-Koeffizienten (siehe Abschnitt II.A.3.a), denn Wavelets sind weder in der Zeit- noch in der Frequenz-Domäne scharf festgelegt. Man kann einerseits die Mitte der PRSA-Kurven als Zentrum des zum Vergleich verwendeten Wavelets verwenden und andererseits durch die Frequenzunschärfe des Wavelets ein ganzes Band gleichzeitig abdecken. Konkret haben wir den Haar-Wavelet-Koeffizienten an der Position  $\delta = -2$  und mit der Skala  $s = 4$  Herzschläge zur Charakterisierung der PRSA-Kurven ausgewählt, die zentrale (central) Wavelet Amplitude (CWA),

$$\text{CWA} = -L_h[\text{PRSA}](-2, 4) = \frac{1}{4} \left[ \int_0^2 \text{PRSA}(x) dx - \int_{-2}^0 \text{PRSA}(x) dx \right]; \quad (\text{II.B.7})$$

zur Notation siehe Definitionen (II.A.28) und (II.A.30). Um aus der diskreten Kurve  $\text{PRSA}(\delta)$  für Gl. (II.B.7) eine kontinuierliche zu machen, wird  $\text{PRSA}(x) = \text{PRSA}(\delta)$  gesetzt für  $\delta \leq x < \delta+1$ . Damit lautet der CWA-Parameter des diskreten Signals  $\text{CWA} = [\text{PRSA}(0) + \text{PRSA}(1) - \text{PRSA}(-1) - \text{PRSA}(-2)]/4$ . Die vier hier verwendeten Werte von  $\text{PRSA}(\delta)$  sind in den beiden Beispielen in Abb. II.B.22 durch dicke Punkte gekennzeichnet. Der Wert von CWA wird bestimmt durch die Höhe des zentralen Anstiegs in der PRSA-Kurve,  $\text{PRSA}(0) - \text{PRSA}(-1)$ , der alle Frequenzkomponenten charakterisiert, und durch die benachbarten Werte  $\text{PRSA}(1)$  und  $\text{PRSA}(-2)$ . Man könnte auch größere Werte von  $s$  betrachten, um niedrigere Frequenzen zu studieren, und Positionen  $\delta \neq -s/2$  wählen, um das Abklingen der Phasensynchronisation zu untersuchen. Die größte Vorhersagekraft hat in der Münchener Herzinfarkt-Patienten-Studie aber der Parameter CWA.



**Abb. II.B.23:** Skizze zur Charakterisierung der PRSA-Kurve (repräsentativ; durchgezogene Linie) durch acht Steigungsparameter S1 bis S8 (gestrichelte Linien), die in den Bereichen  $-2 < \delta/T < -1.25$  (S1),  $-1.25 < \delta/T < -1$  (S2),  $-1 < \delta/T < -0.25$  (S3),  $-0.25 < \delta/T < 0$  (S4),  $0 < \delta/T < 0.25$  (S5),  $0.25 < \delta/T < 1$  (S6),  $1 < \delta/T < 1.25$  (S7) und  $1.25 < \delta/T < 2$  (S8) angepasst werden.

**Tabelle II.B.4:** Ergebnisse der Risiko-Indikator-Vergleiche für das Überleben zwei Jahre nach einem Herzinfarkt. Für die drei im Text beschriebenen Parameter CWA, LVEF und SDNN sowie für zwei Kombinationen daraus ist die Fläche unter der Sensitivitäts-Spezifitäts-Kurve angegeben in den drei betrachteten Studien sowie für die Kombination der drei Studien. Man erkennt, dass CWA statistisch signifikant besser als LVEF und SDNN und auch besser als die Kombination aus diesen beiden ist. Nur durch Kombination von CWA und LVEF lässt sich nochmals eine Verbesserung um 2 bis 3% in der Risiko-Vorhersage erzielen. Die Fehlerangaben wurden mit der Bootstrap-Methode ermittelt (nach [BAUERetal-04]).

	Studie München (1455 Patienten)	Studie London (656 Patienten)	Studie Oulu (600 Patienten)	Alle zusammen (2711 Patienten)
CWA	$77.9 \pm 0.03$	$80.2 \pm 0.03$	$73.6 \pm 0.03$	$77.6 \pm 0.02$
LVEF	$70.1 \pm 0.03$	$67.4 \pm 0.04$	$59.5 \pm 0.04$	$68.9 \pm 0.02$
SDNN	$69.6 \pm 0.03$	$68.5 \pm 0.04$	$64.2 \pm 0.03$	$67.1 \pm 0.02$
CWA + LVEF	$80.7 \pm 0.03$	$82.9 \pm 0.02$	$76.7 \pm 0.03$	$79.8 \pm 0.01$
SDNN + LVEF	$75.1 \pm 0.03$	$72.2 \pm 0.03$	$69.9 \pm 0.03$	$72.0 \pm 0.02$

### c) Vergleich der Ergebnisse der PRSA mit anderen Methoden

Wir haben für alle drei Studien und auch für die zusammengefasste Auswertung die Vorhersagekraft des neuen Parameter CWA für die Prognose des Todes innerhalb von zwei Jahren mit der Vorhersagekraft der Parameter LVEF und SDNN verglichen. LVEF gilt bisher als „Goldstandard“ und SDNN, die Standardabweichung der Herzfrequenz, ist der beste Parameter aus der Standard-Analyse der Herzfrequenzvariabilität [TASKFORCE-96] (siehe Abschnitt II.B.5.a). Der Parameter CWA aus dem Zentrum der PRSA-Kurve ist bei den Patienten, die innerhalb von zwei Jahren nach ihrem Herzinfarkt starben, signifikant niedriger als bei den Patienten, die zwei Jahre überlebten.

Da alle betrachteten Parameter kontinuierlich sind, erfolgt ein Test ihrer Vorhersagekraft am besten durch einen Vergleich der Flächen unter den Sensitivitäts-Spezifitäts-Kurven [HANLEY&MCNEIL-82]. Dabei wird für jeden Parameter die Schwelle, die zwischen Überlebenden und Nicht-Überlebenden trennen soll, kontinuierlich variiert. Der Anteil der korrekt als Überlebende erkannten Patienten (*Spezifität*) wird gegen den Anteil der korrekt als Nicht-Überlebende erkannten Patienten (*Sensitivität*) aufgetragen. Das ergibt für jeden denkbaren Schwellenwert einen Punkt; die Verbindung der Punkte führt dann zur Sensitivitäts-Spezifitäts-Kurve. Bei idealen Daten würden für niedrige Schwellen alle Überlebenden korrekt zugeordnet (*Spezifität* = 1), aber einige Nicht-Überlebende würden falsch zugeordnet ( $0 \leq \text{Sensitivität} < 1$ ). Beim Erreichen der optimalen Schwelle wären beide Werte 1, und dann würde für eine weiter angehobene Schwelle die *Spezifität* fallen bei konstanter *Sensitivität* = 1. Es entstünde also eine Kurve durch die Punkte (0,1), (1,1) und (1,0); die Fläche unter dieser idealen Kurve ist 1 = 100%. In der Praxis können die Gruppen der Überlebenden und der Nicht-Überlebenden nicht vollständig getrennt werden. Darum geht die Kurve nicht durch den Punkt (1,1) und die Fläche unter der Kurve ist geringer.

Die Flächen unter den Sensitivitäts-Spezifitäts-Kurven für die Parameter CWA, LVEF und SDNN sind in Tabelle II.B.4 angegeben. Man erkennt, dass CWA eindeutig bei allen drei Studien und auch bei ihrer Kombination die größte Fläche bringt. Die Fehlerangaben in der Tabelle wurden durch ein so genanntes Bootstrap-Verfahren ermittelt [EFRON&TIBSHIRANI-93], bei dem viele Ensemble aus (teilweise gleichen) Patienten zusammengestellt werden, um so die Schwankung der Fläche unter der Sensitivitäts-Spezifitäts-Kurve zu ermitteln. Weiterhin zeigt die Tabelle, dass eine Kombination der Parameter CWA und LVEF noch eine leichte Verbesserung gegenüber CWA allein bringt, während eine Kombination von LVEF und SDNN den Wert für CWA allein nicht zu übertreffen vermag. Damit wurde gezeigt, dass der allein aus dem EKG bestimmte Risikoindikator CWA dem als Goldstandard geltenden und meist durch aufwendige Röntgenuntersuchung mit Kontrastmittel bestimmten Parameter LVEF klar überlegen ist.

## II.C. Weitere physiologische Anwendungen

### II.C.1. Korrelationen der Anordnung der Basenpaare in der Erbinformation

Die Anwendung, für die die DFA-Methode (siehe Abschnitt II.A.2) ursprünglich entwickelt wurde [PENGetal-94], ist die Untersuchung von langreichweitigen Korrelationen in der Anordnung der Basenpaare der Erbinformation. Nachdem Anfang der 90er Jahre die Sequenzierung längerer Abschnitte gelungen war, stellte sich die Frage, ob diese Sequenzen vom statistischen Standpunkt her rein zufällig und unkorreliert sind, oder ob die Anordnung Korrelationen aufweist, die vielleicht bei der Interpretation der einzelnen Abschnitte helfen können.

Die Erbinformation ist im Zellkern auf den Chromosomen gespeichert, die aus einer Doppelhelix von Phosphat-Zuckern (Desoxyribonukleinsäure, DNS) bestehen, an denen innen je eine Base hängt: Adenin (A), Guanin (G), Cytosin (C) oder Thymin (T), siehe auch Abb. II.C.1. Die Basen Adenin und Guanin werden auch als Purine bezeichnet, Cytosin und Thymin als Pyrimidine. Gegenüberliegende Basen sind durch Wasserstoff-Brücken gebunden, wobei jede Base nur zu *einer* anderen als Gegenstück passt. Daher ist in jedem Basenpaar die Information von 2 Bit gespeichert (4 Möglichkeiten: AT, GC, CG, TA; siehe Abb. II.C.1). Die Erbinformationen sind beim Menschen in nur etwa fünf Prozent der Basenpaare gespeichert, die die so genannten kodierenden Bereiche der DNS, die Gene, ausmachen. In diesen Bereichen entsprechen jeweils drei aufeinander folgende Basen (also 6 Bit, 64 Kombinationen) einer Aminosäure, so dass also eigentlich Aminosäuren-Sequenzen für die Proteine kodiert sind. Die restlichen 95 Prozent der DNS werden nicht zur Aminosäuren-Kodierung benutzt. Bei primitiveren Lebewesen ist der Anteil der kodierenden Bereiche höher, so dass sie trotz deutlich weniger DNS nicht viel weniger Gene haben.

Um die Anordnung der Basenpaare mit den Methoden der Zeitreihenanalyse studieren zu können, muss die Sequenz aus 2-Bit-Werten zuerst in eine Zahlenreihe umgewandelt werden. Dazu gibt es mehrere Möglichkeiten; am weitesten verbreitet ist es, für AT und GC den Wert  $x_i = +1$  zu setzen und für CG und TA  $x_i = -1$  (Purin-Pyrimidin-Regel). Es zeigt sich, dass solche Reihen oft stückweise konstante Trends aufweisen, weil es viele Bereiche gibt, in denen über längere Strecken ein bestimmtes Basenpaar überwiegt. Darum war die DFA-Methode nötig, um zwischen solchen Nichtstationaritäten und echten langreichweitigen Korrelationen zu unterscheiden.

In den ersten Arbeiten ohne DFA [PENGetal-92, LI&KANEKO-92, VOSS-92] war noch von langreichweitigen Korrelationen in allen Abschnitten der DNS die Rede. In der ersten Arbeit mit DFA [PENGetal-94] wurde dann gefunden, dass *keine* langreichweitigen Korrelationen ( $\alpha = 0.5$ ) in den kodierenden DNS-Abschnitten (den Genen) auftreten, während die nicht kodierenden Bereiche, durchaus langreichweitige Korrelationen aufweisen, siehe Abb. II.C.2. Allerdings ist der Fluktuationsindex dafür nicht besonders hoch; ein typischer Wert ist  $\alpha \approx 0.6$ . Neben den möglichen langreichweitigen Korrelationen sind stets kurzreichweitige Korrelationen vorhanden, und zwar insbesondere auf Skalenlängen von drei und neun Basenpaaren, weil immer drei Basenpaare eine Aminosäure kodieren. Diese kurzreichweitigen Korrelationen sind in den kodierenden Bereichen etwas stärker ausgeprägt, im Gegensatz zu den dort fehlenden langreichweitigen Korrelationen. Ein systematischer Vergleich im Hinblick auf die langreichweitigen Korrelationen [BULDYREVetal-95]

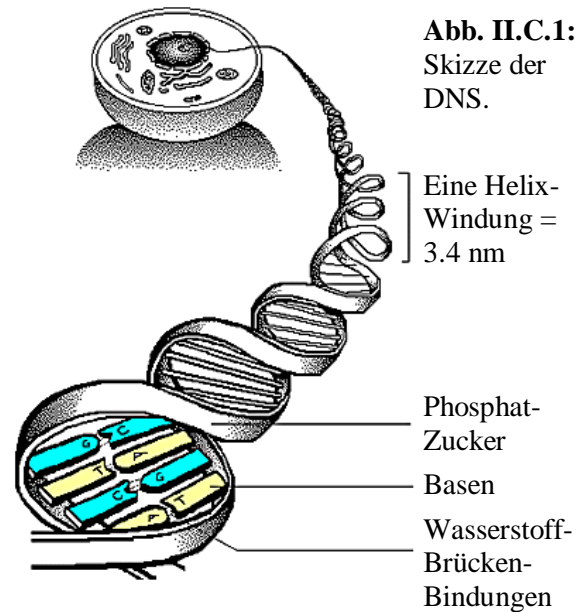


Abb. II.C.1:  
Skizze der  
DNS.

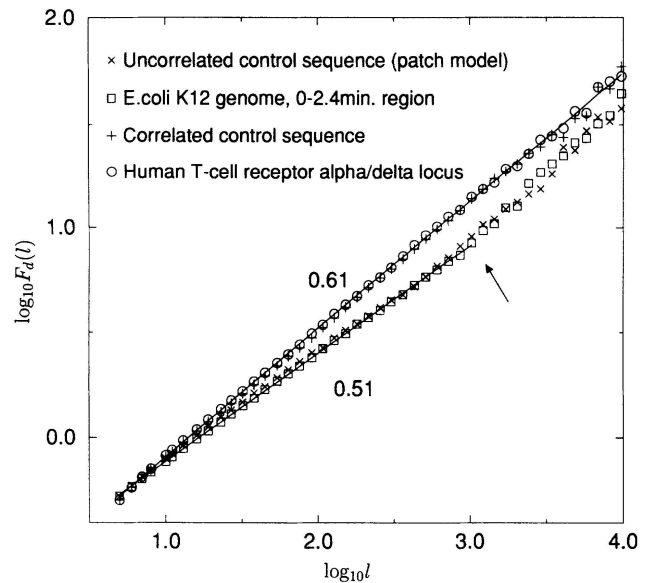
ergab die signifikant verschiedenen Mittelwerte  $\alpha = 0.50 \pm 0.02$  für die kodierenden Bereiche und  $\alpha = 0.58 \pm 0.03$  für die nicht kodierenden Bereiche. Man versuchte, diese Unterschiede zur automatischen Erkennung von kodierenden Bereichen zu nutzen [BULDYREVetal-94]. Dazu gibt es in jüngerer Zeit Ansätze die auf Entropie-Vergleichen beruhen [AZADetal-02a, AZADetal-02b].

Zu ähnlichen Ergebnissen wie [BULDYREVetal-95] kamen [ARNEODOetal-98b, ARNEODOetal-02] mit der WTMM-Methode (siehe Abschnitt II.A.3.f). Es zeigte sich, dass die langreichweitigen Korrelationen in den nicht-kodierenden Bereichen der DNS auf Längenskalen von 20 bis 200 Basenpaaren deutlich schwächer sind ( $\alpha = 0.59 \pm 0.02$ ) als auf Längenskalen von 200 bis 5000 Basenpaaren ( $\alpha = 0.82 \pm 0.01$ ) [ARNEODOetal-02], siehe auch [VISWANATHANetal-98]. Zusätzlich fanden Arneodo *et al.*, dass die Stärke der langreichweitigen Korrelationen in den nicht-kodierenden Bereichen vom Guanin- und Cytosin-Anteil abhängt, und dass sich schwache langreichweitige Korrelationen auch in den kodierenden Bereichen entdecken lassen, wenn man nur jede dritte Base in der Sequenz für die Analyse benutzt. Dadurch verschwinden die starken Dreierkorrelationen, die sonst die Erkennung erschweren. Weiterhin wurden multifraktale Analysen der DNS-Sequenzen durchgeführt, die in den meisten Fällen monofraktales Verhalten sowohl von den kodierenden als auch von den nicht-kodierenden Bereichen ergaben. Diese Analysen wurden mit WTMM [ARNEODOetal-02] bzw. mit MF-DFA durchgeführt [ROSASetal-02], wobei letzteres die erste Anwendung der MF-DFA außerhalb der Gießener bzw. Bostoner Gruppe ist. Allerdings existiert auch die Behauptung, dass die nicht-kodierenden Bereiche multifraktales Verhalten zeigen [YUetal-01].

Kürzlich wurde darüber hinaus nachgewiesen, dass die Korrelationen in der DNS völlig verschiedener Zellen (Eukaryoten und Eubakterien) in gleicher, universeller Weise auftreten, während sie bei Archaeobakterien fehlen [AUDITetal-01, ARNEODOetal-02]. Dies deutet in Kombination mit weiteren Ergebnissen darauf hin, dass die langreichweitigen Korrelationen die dreidimensionale „Verpackung“ der DNS mit den so genannten Nukleosomen, die bei den Archaeobakterien fehlt, unterstützen oder erst ermöglichen.

## II.C.2. Langzeit-Korrelationsverhalten sensorischer Nervenimpulse

Neben den Signalen, die vom Hirn ausgehen, um im Rahmen des autonomen oder des somatischen Nervensystems Körperfunktionen oder Bewegungen zu steuern, wofür ich im Kapitel II.B die Langzeitkorrelationen studiert habe, gibt es auch Signale, die in umgekehrter Richtung laufen und Sinneswahrnehmungen an das Hirn vermitteln. Das Fluktuations- und Korrelationsverhalten dieser Signale bei Abwesenheit von äußeren Reizen soll jetzt das Thema sein, weil man aus möglichen Langzeitkorrelationen Rückschlüsse über die Komplexität des biologischen Sensor-Systems ziehen kann. Da die Messung der entsprechenden Nerven-Signale nur invasiv erfolgen kann, ist eine Beschränkung auf die Untersuchung von einfacheren Tieren geboten. Zudem hat das den Vorteil, dass deren Sinnesorgane nicht ganz so komplex und darum eher verstehbar sind. In der Zusammenarbeit mit der biophysikalischen Gruppe von Prof. F. Moss (St. Louis, USA) ergab sich die Gelegenheit,



**Abb. II.C.2:** Vergleich der DFA1-Fluktuationsfunktionen für kodierende (○) und nicht-kodierende (◻) Basensequenzen der Erbinformation, sowie für künstliche Vergleichssequenzen (×, +) (aus [PENGetal-94]).

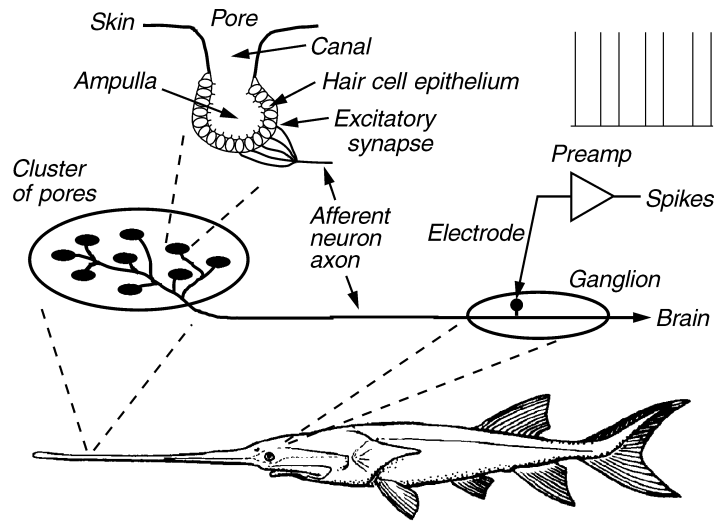


die Signale von Sinnesorganen von Fischen und Krebsen zu untersuchen und zwar von Elektro- und Mechanosensoren, die elektrische Felder bzw. Erschütterungen im Wasser detektieren [BAHARetal-01]. In beiden Fällen werden Nervenimpulse registriert, und zwar jeweils am ersten vom biologischen Sensor-System wegführenden Neuron, d.h. auf der gleichen peripheren Ebene. Die betrachteten Zeitreihen bestehen (ähnlich wie beim Herzschlag in Abschnitt II.B.1) aus den Zeitintervallen  $t_i$  zwischen aufeinander folgenden Impulsen.

### a) Antikorrelationen bei Elektrosensoren des Löffelstörs

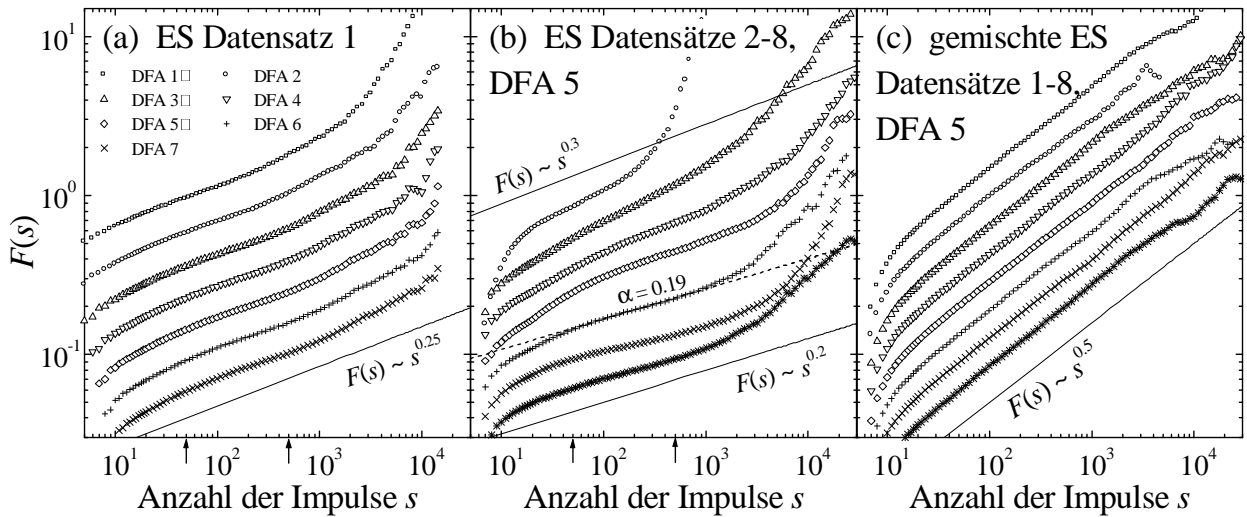
Der Löffelstör (*Polyodon spathula*) ist einer der größten Süßwasser-Fische in Nordamerika. Er ernährt sich ausschließlich von Plankton (*Daphnia*,  $\approx 2\text{mm}$  groß), das er anhand der bei Schwimm- und Fressbewegungen erzeugten schwachen elektrischen Felder im Wasser erkennt und verfolgt. Dazu [NEIMANetal-00] und zur Erkennung von Hindernissen im Wasser [GURGENSetal-00] besitzt er einen passiven Elektrosensor [BULLOCKetal-83, WILKENSetal-97] in seiner ungewöhnlich langen und breiten Nase (darum „Löffel“-Stör). Die Elektrozeporen sind in Clustern angeordnet, die aus etwa 25 Poren bestehen, wobei jede Pore etwa 400 empfindliche Haarzellen aufweist, siehe Abb. II.C.3. Die Empfindlichkeit für elektrische Felder wurde in Verhaltensexperimenten bestimmt zu 0.5 bis  $1\mu\text{V/cm}$  [RUSSELetal-99]. Von jedem Cluster führt eine Nervenfasern weg, und an diesen Nervenfasern werden die Impulse für die Analyse mit Standardverfahren [DOUGLASSetal-93, WILKENS&DOUGLASS-94, WILKENSetal-97] registriert. Die Untersuchung erfolgt ohne stimulierendes äußeres Feld und bei drei Experimenten sogar mit einer zusätzlichen Abschirmung des „Löffels“ durch  $\mu$ -Metall, um jegliche äußere Beeinflussung des Elektrosensors auszuschließen. Zusätzlich wurde die Wasserzufuhr im Becken für einige Messungen abgeschaltet, aber das hatte auch keinen Einfluss auf die Ergebnisse.

Abbildung II.C.4(a) zeigt die DFA1- bis DFA7-Fluktuationsfunktionen für einen typischen Datensatz von einem Elektrosensor des Löffelstörs (Länge  $\approx 30\,000$  Nervenimpulse). Man erkennt, dass die Steigung der Kurven für alle DFA-Ordnungen deutlich kleiner als  $\alpha = 1/2$  (für unkorreliertes Verhalten) ist und in diesem Beispiel etwa 0.25 beträgt. Das bedeutet, dass die Zeitintervalle zwischen den Nervenimpulsen des Elektrosensors stark antikorreliert sind. Auf längere Intervalle folgen kürzere und umgekehrt, und das gilt über viele Zeitskalen hinweg. Die Ergebnisse zeigen Antikorrelationen bis zu Zeitskalen von 10 bis 200 Sekunden je nach Versuch und Nervenimpulsrate des untersuchten Tieres. Demnach ist das Elektrosensor-System überraschend komplex; es hat ein Langzeit-„Gedächtnis“ von bis zu 200 Sekunden, und das schon auf der ersten peripheren Ebene. Erst auf großen Zeitskalen sieht man einen Übergang, der wahrscheinlich durch Trends oder andere Nichtstationaritäten verursacht wird. Dass Nichtstationaritäten auftreten, ist zu erwarten, denn bei den meisten Experimenten wird das Ende der Messung dadurch verursacht, dass der Fisch stirbt. Da die Daten antikorreliert sind, haben Trends und Nichtstationaritäten sehr starke Auswirkungen und lassen sich selbst mit Polynomen hohen Grades nicht vollständig beseitigen.



**Abb. II.C.3:** Skizze zu den Elektrosensoren des Löffelstörs (unten). In dem „Löffel“ (unten links) befinden sich Cluster (Mitte links) aus Poren (oben links), die wiederum Haarzellen als eigentliche Sensoren enthalten. Die Messung erfolgt an einem vom Cluster wegführenden Neuron, und man registriert die Nervenimpulse (oben rechts) (aus [BAHARetal-01]).





**Abb. II.C.4:** DFA-Untersuchung der Nervenimpulse auf der ersten peripheren Ebene bei Elektrosensoren (ES) des Löffelstörs. Die Fluktuationfunktionen sind doppelt logarithmisch gegen die Anzahl der Impulse aufgetragen. (a) Vergleich der Ergebnisse für DFA1 bis DFA7 für einen typischen Datensatz; man erkennt klar die Antikorrelationen und erst auf großen Zeitskalen den Einfluss von Nichtstationaritäten. (b) Vergleich der DFA5-Ergebnisse für sieben weitere Datensätze; der dritte und der vierte Datensatz von oben wurden mit  $\mu$ -Metall Abschirmung des „Löffels“ aufgenommen. (c) DFA der gemischten Datensätze aus den Teilen (a) und (b); man erkennt unkorreliertes Verhalten,  $\alpha = 1/2$ . Die zum Vergleich eingezeichneten Geraden haben das angegebene Skalenverhalten und die Pfeile an der horizontalen Achse markieren Anfang und Ende der zur Bestimmung der Skalenexponenten  $\alpha$  benutzten Bereiche; die gestrichelte Linie in (b) ist eine in diesem Bereich angepasste Gerade (nach [BAHARetal-01]).

Abbildung II.C.4(b) zeigt einen Vergleich der DFA5-Ergebnisse für sieben weitere Datensätze. Ich habe die hohe Ordnung zur Trendbeseitigung verwendet, weil damit der antikorrelierte Bereich etwas besser zu erkennen ist. Bei der obersten Kurve sieht man trotzdem nur einen sehr begrenzten Bereich mit Antikorrelationen. Solche Datensätze wurden als „problematisch“ klassifiziert. Bei den meisten Datensätzen ergab sich ein antikorreliertes Skalenverhalten über mehr als anderthalb Dekaden, und der Fluktuationsexponent  $\alpha$  konnte im Skalenbereich zwischen 50 und 500 Nervenimpulsen bestimmt werden („gute“ Fits, siehe z.B. die gestrichelte Gerade mit Steigung 0.19 in Abb. II.C.4(b)). Abbildung II.C.4(c) zeigt, dass die gemischten Datenreihen derselben acht Experimente wie in Abb. II.C.4(a) und (b) alle unkorreliertes Verhalten aufweisen. Daher sind die Antikorrelationen nicht auf die Verteilung der Zeitintervalle zwischen den Nervenimpulsen zurückzuführen, sondern auf die Anordnung dieser Zeitintervalle.

Die Ergebnisse für alle 25 Datensätze von Elektrosensoren verschiedener Löffelstöre habe ich im Histogramm Abb. II.C.6(b) zusammengefasst, das die Verteilung der Fluktuationsexponenten  $\alpha$  zeigt. Dabei sind die Werte problematischer Datensätze nicht einfach weggelassen, sondern als hellgraue Kästchen eingezeichnet, um zu zeigen, dass die Datenqualität ausreichend ist und dass die Ausreißer im Histogramm durch solche problematischen Datensätze verursacht werden. Von den 25 Datensätzen zeigen 15 gutes Skalenverhalten auf Zeitskalen von mehr als 1000 Nervenimpuls-Intervallen, 5 auf Skalen bis zu 300 Nervenimpuls-Intervallen und 5 zeigen kein Skalenverhalten wie die oberste Kurve in Abb. II.C.4(b). Der Mittelwert der Fluktuationsexponenten beträgt  $\alpha = 0.24 \pm 0.05$  für die gut skalierenden Datensätze und  $\alpha = 0.29 \pm 0.10$  für alle Datensätze. Damit sind langreichweitige Antikorrelationen in den Nervenimpulsen der Elektrosensoren der Löffelstöre eindeutig nachgewiesen und es ist klar, dass die Sensoren schon vor der ersten peripheren Ebene ein Langzeitgedächtnis von bis zu 200 Sekunden enthalten müssen.

Diese Analyse ist das erste Mal, dass langreichweitige, ein Skalenverhalten zeigende Antikorrelationen in einem biologischen System nachgewiesen wurden. Vorher waren nur kurzreichweitige

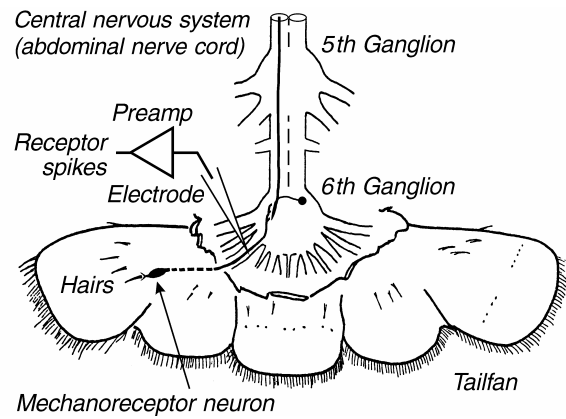
## II.C. Weitere physiologische Anwendungen

Antikorrelationen auf Zeitskalen unter einer Sekunde bei anderen Fischen [SCHÄFER*etal*-95, RATNAM&NELSON*etal*-00] bekannt, die man auf einen Oszillator zurückführte, der ein Signal knapp unter der Auslöseschwelle für Nervenimpulse erzeugt. Dieses Signal kann nur Impulse auslösen, wenn ein externes (zu detektierendes) Signal oder ein zufälliges Rauschsignal hinzukommen. Aber dann treten die Impulse immer in der Nähe der (periodischen) Maxima des Oszillatorsignals auf, so dass sich typischerweise einige dicht aufeinander folgende Impulse mit Ruhezeiten abwechseln. Die Reichweite der dadurch verursachten Kurzzeit-Antikorrelationen entspricht etwa der Periode des Oszillators. Nur wenn das externe Signal sehr stark ist, werden ständig Impulse ausgelöst und die Antikorrelationen verschwinden. Daher stellt dieser Erklärungsansatz eine verhältnismäßig einfache Möglichkeit dar, Intensitäten mittels Impulsen zu kodieren und den Dynamikbereich des Sensors zu erhöhen. Zur Erklärung der langreichweitigen Antikorrelationen bei den Elektrosensoren der Löffelstör ist er allerdings nicht ausreichend. Man bräuchte mindestens eine Vielzahl solcher Oszillatoren mit über mehr als eine Größenordnung variierenden Eigenfrequenzen in jedem Cluster des Sensors, beispielsweise in jeder Pore eine andere. Das ist erstens ohne weitere Experimente rein spekulativ und würde zweitens die Auswertung des Nervenimpuls-Signals im Gehirn erschweren. Es wäre aber als Mechanismus zu einer weiteren Erhöhung des Dynamikbereichs durchaus brauchbar, wenn die Empfindlichkeiten der einzelnen Poren entsprechend ihrer Oszillatorfrequenzen höher oder niedriger wären. Dann müsste man eine charakteristische Veränderung der Antikorrelationen in Abhängigkeit von der Stärke eines externen Signals beobachten können, und nur ohne externes Signal würde sich das Antikorrelations-Skalenverhalten ergeben.

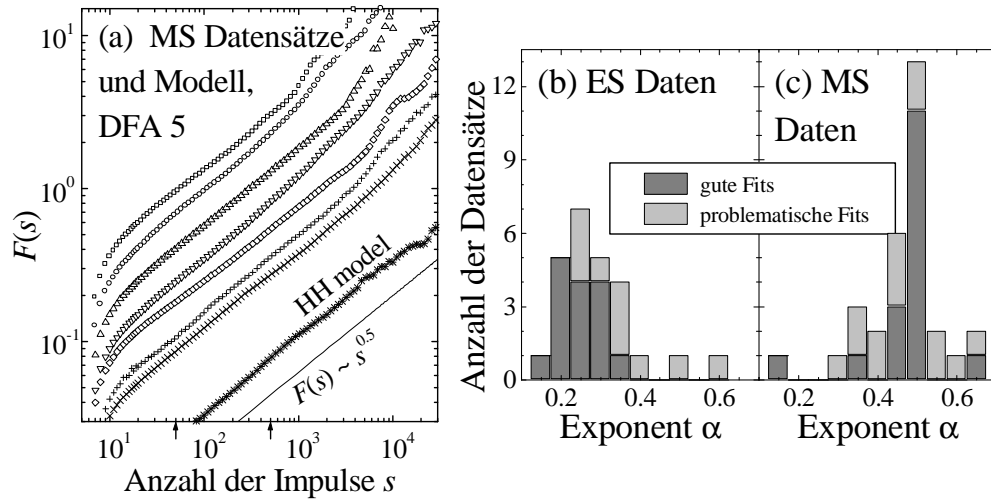
Wie die Langzeit-Antikorrelationen in den Elektrosensoren genau verursacht werden und welchen Zwecken sie dienen, erfordert wie gesagt weitere Arbeiten. Auf jeden Fall ist es interessant, dass man bei einem komplexen Sinnesorgan Antikorrelationen findet, wohingegen die vom autonomen Nervensystem ausgehende Regelung von Herz oder Atmung (beim Menschen) eher positive Korrelationen aufweist.

### b) Unkorrelierte Fluktuationen bei Mechanosensoren des Flusskrebses

Um die Frage nach der Allgemeingültigkeit der Ergebnisse zu den Antikorrelationen in den Nervenimpulsen der Elektrosensoren des Löffelstör zu prüfen, haben wir Nervenimpulse von Mechanosensoren des Flusskrebses [HUXLEY-1880] auf ihr Korrelationsverhalten untersucht. Diese Experimente sind einfacher, weil die Flusskrebse nicht gezüchtet werden müssen, sondern über den Restaurantfachhandel lebend bezogen werden können. Außerdem muss die Messung nicht am lebenden Tier erfolgen, sondern man kann nach der Abtrennung der Schwanzflosse über eine Stunde lang Messungen an den daran frei präparierten Nervenfasern durchführen, die von den Mechanorezeptoren kommen (siehe Abb. II.C.5). Die Mechanosensoren selbst bestehen hier aus nur einem Haar, das mit typischerweise zwei Neuronen gekoppelt ist. Diese geben Impulse ab, sobald das Haar gebogen wird [WINE-84, WILKENS-88]. Sie reagieren auf hydromechanische Bewegungen in der Größenordnung von mindestens 10 bis 100 nm [DOUGLASS*etal*-93] und können auch Bewegungen von mehreren Mikrometern noch zuverlässig erkennen. Die Messelektroden werden wieder an die



**Abb. II.C.5:** Skizze zu Mechanosensoren in der Schwanzflosse des Flusskrebses. Von jedem Sensor-Haar führt eine Nervenfaser, an der direkt die Impulse gemessen werden, weg in Richtung zentrales Nervensystem; die Ganglien sind so etwas wie Schaltzentralen im Rückenmark (aus [BAHAR*etal*-01]).



**Abb. II.C.6:** (a) DFA5-Untersuchung der Nervenimpulse auf der ersten peripheren Ebene bei sieben Mechanosensoren (MS) verschiedener Flusskrebse. Die Fluktuationfunktionen sind doppelt logarithmisch gegen die Anzahl der Impulse aufgetragen. Zusätzlich ist unten das Ergebnis für die von einem Hodgkin-Huxley- (HH-) artigen Modell [BRAUNetal-98] erzeugte künstliche Datenreihe gezeigt, die ebenfalls keine langreichweitigen Korrelationen aufweist. (b,c) Histogramme für die DFA5-Fluktuationsexponenten  $\alpha$ , die im Bereich von 50 bis 500 Nervenimpulsen für (b) alle 25 Datensätze von Elektrosensoren von Löffelstörern und (c) für alle 31 Datensätze von Mechanorezeptoren von Flusskrebsen bestimmt wurden. Die Kästchen für Datensätze, die kein gutes Skalenverhalten in diesem Bereich zeigen, sind hellgrau eingefärbt (nach [BAHAREtal-01]).

erste vom Sensor wegführende Nervenfasern angeschlossen, die hier direkt von den Neuronen am Sensor-Haar kommt, ohne eine Zusammenschaltung der Sensorzellen mehrerer Haarzellen in ganzen Poren oder Clustern. Durch eine Vibrations-Isolation wurde eine externe Stimulation der Sensoren verhindert.

Abbildung II.C.6(a) zeigt die Ergebnisse der DFA5 für sieben Datensätze von Mechanosensoren des Flusskrebses. Man erkennt, dass hier die Intervalle zwischen aufeinander folgenden Nervenimpulsen völlig unkorreliert sind ( $\alpha = 1/2$ ). Auch das Histogramm für alle 31 Datensätze von Mechanorezeptoren verschiedener Flusskrebse (Abb. II.C.6(c)) zeigt, dass in fast allen Fällen unkorreliertes Verhalten auftritt. Ein Vergleich mit dem Histogramm für die Elektrosensor-Daten (Abb. II.C.6(b)) macht den drastischen Unterschied klar. Wie bei biologischen Messdaten an Präparaten nicht anders zu erwarten, gibt es auch Ausreißer im Histogramm, die meist zudem ein problematisches Skalenverhalten zeigen, also keine Gerade im doppelt logarithmischen Bild. Zum Vergleich wurde auch eine künstliche Datenreihe analysiert, die generiert wurde von einem Standard-Modell für Temperatur- und Mechanorezeptoren [BRAUNetal-98], das im Wesentlichen aus Differenzialgleichungen für Ionenkonzentrationen besteht (Hodgkin-Huxley-artiges Modell). Auch diese Reihe zeigt unkorreliertes Verhalten. Damit ist gezeigt, dass einfach aufgebaute Sensoren keine antikorrelierten Nervenimpulse erzeugen, so dass das Ergebnis bei den Elektrosensoren Rückschlüsse auf die Komplexität dieses Sensors erlaubt.

## II.D. Korrelationsverhalten geophysikalischer Zeitreihen

Der Wasserbau-Ingenieur H. E. Hurst hat als erster eine systematische Fluktuationsanalyse von langen geophysikalischen Zeitreihen durchgeführt [HURST-51]. Sein Ausgangspunkt war die Frage, wie sich die Fluktuationen der Wasserstände in einem (natürlichen oder künstlichen) Reservoir beschreiben und vielleicht vorhersagen lassen, um einen Anhaltspunkt für Wasserbaumaßnahmen zu bekommen. Bei seinen Arbeiten in Ägypten konnte er auf einen langen historischen Datensatz von jährlichen Wasserstandsminima des Nils am Pegel Roda bei Kairo zurückgreifen, der schon 1925 veröffentlicht wurde [TOUSSON-25, POPPER-51, BERAN-94] und 663 aufeinander folgende Messwerte aus den Jahren 622 bis 1284 enthält. Die Daten wurden ursprünglich zur Festlegung von Steuerabgaben erfasst. Seine Analyse-Methode, die *R/S*-Analyse (siehe Abschnitt II.A.1.d), wandte Hurst auch auf andere geophysikalische Datenreihen an, darunter Regen-, Temperatur- und Luftdruckreihen, sowie Baumringbreiten und Sonnenflecken-Zahlen [HURSTetal-65], siehe auch [MANDELBROT&WALLIS-69, FEDER-88]. Hurst fand bei diesen Reihen Langzeitkorrelationen mit Fluktuationsexponenten  $H \gtrsim \alpha$  im Bereich zwischen ungefähr 0.7 und 0.8; als Mittelwert gab er  $\alpha \approx 0.726$  an. Diese Langzeitkorrelationen sind als „Hurst-Effekt“ bekannt.

Später griff B. B. Mandelbrot die Arbeiten auf [MANDELBROT&WALLIS-69, MANDELBROT-02], und legte einen Schwerpunkt auf die „fraktale“ Beschreibung der natürlichen Datenreihen mit einem nicht ganzzahligen Exponenten. Hurst wurde kritisiert, vor allem weil er zur Erklärung der von ihm gefundenen langreichweitigen Korrelationen ein Modell vorschlug, das nur Kurzzeitkorrelationen und einen Trend aufweist, was er aber mit seiner Methode nicht erkannte [FEDER-88]. Viele weitere Erklärungsversuche wurden inzwischen veröffentlicht, die fast alle mit Verletzungen der Voraussetzungen des zentralen Grenzwertsatzes in Zusammenhang stehen und teilweise von einem nur transienten Korrelationsverhalten oder von nichtstationären Mittelwerten ausgehen [KLEMES-74, POTTER-76, SALASetal-79, BHATTACHARYAetal-83, MESA&POVEDA-93]. In den letzten zehn Jahren wurde bei Abfluss- und Niederschlagszeitreihen erkannt [TESSIERetal-93, LOVEJOY&SCHERTZER-95, HARRISetal-96, TESSIERetal-96, DAVISetal-96, PANDEYetal-98, DEIDDAetal-99, DEIDDA-00, DOUGLAS&BARROS-03], dass ein einziger Exponent *nicht* zur Charakterisierung der Daten ausreicht, weil multifraktales Skalenverhalten (siehe Abschnitt II.A.3.c+d) vorliegt, d.h. große und kleine Fluktuationen mit unterschiedlichen Skalenexponenten charakterisiert werden müssen. Eine Einführung in die hydrologischen Anwendungen geben [RODRIGUEZ-ITURBE&RINALDO-97].

In diesem Kapitel werde ich – entgegen der historischen Reihenfolge aber entsprechend zunehmender Komplexität der Daten – zuerst Temperatur-Zeitreihen behandeln, dann Niederschlags-Zeitreihen und schließlich Abflusszeitreihen (Pegelstände von Flüssen). Dabei haben wir im Unterschied zu den meisten vorhergehenden Arbeiten systematisch trendbereinigende Methoden (DFA und MF-DFA) verwendet, und bei den multifraktalen Analysen zusätzlich einen Vergleich mit der WTMM-Methode durchgeführt. Als Anwendungen betrachte ich Tests von aktuellen Klimamodellen sowie Tests von rekonstruierten historischen Datenreihen und Paläodaten. Der Ausgangspunkt ist dabei, dass das Korrelationsverhalten solcher Daten mit dem bei Messdaten beobachteten Skalenverhalten übereinstimmen sollte.

### II.D.1. Temperatur-Zeitreihen

Dass die Fluktuationen der Tagestemperaturen um ihre langjährigen, von der Jahreszeit abhängenden Mittelwerte nicht ganz zufällig sind, weiß man schon seit langem. Einem zu warmen Tag folgt eher wieder ein zu warmer Tag als ein zu kalter und umgekehrt. Die triviale Wettervorhersage, dass das Wetter von morgen genauso ist wie das Wetter von heute, wurde früher oft als Vergleich zur Überprüfung der Nützlichkeit kurzfristiger Wettervorhersagen verwendet. Die Erhaltungseigenschaft

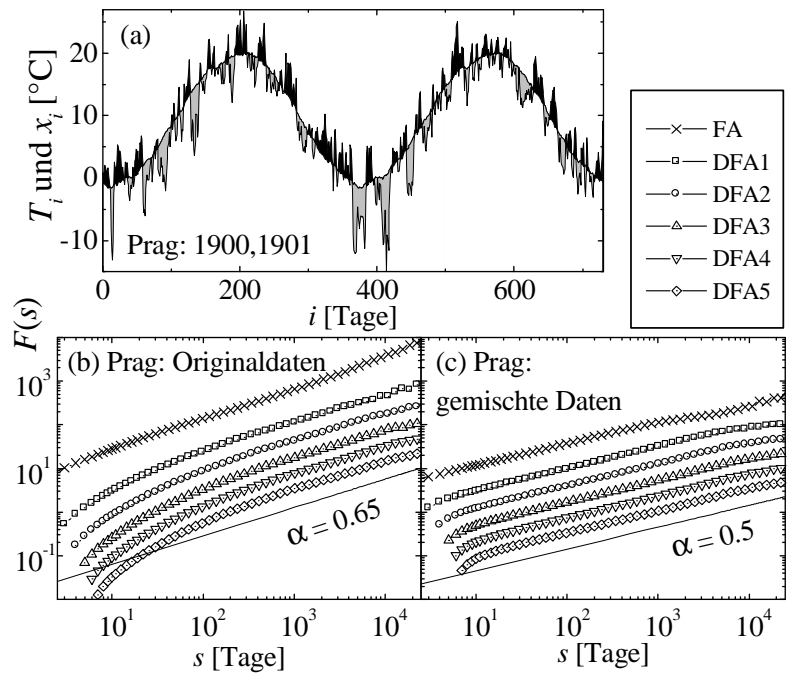
(„Persistenz“) des Wetters auf Zeitskalen von ungefähr einer Woche wird durch die Existenz von Großwetterlagen bedingt, in denen das Wetter einigermaßen stabil ist [PALMER-00, BUNDEetal-02]. Auf längeren Zeitskalen treten andere Arten der Persistenz auf, wovon eine durch Zirkulations-Muster in Verbindung mit einem über mehrere Wochen ortsfesten, stabilen Hochdrucksystem (Blockierung) verursacht wird [CHARNEY&DEVORE-79]. Kürzlich wurde eine mögliche Verbindung zwischen der Kurzzeit-Persistenz des Wetters und den Sonnenfleckenfuktuationen aufgezeigt [SCAFETTA&WEST-03]. Auf der Zeitskala mehrerer Monate wird ein großer Teil der Persistenz auf der südlichen Hemisphäre durch die El Niño Oszillation hervorgerufen, die sogar das Wetter über Nordamerika beeinflusst [MONETTIetal-03].

Die Frage ist nun, wie die von möglicherweise verschiedenen Mechanismen erzeugten Persistenzen auf verschiedenen Zeitskalen zusammenwirken, d.h. wie der Grad der Erhaltungsneigung von der Zeitskala abhängt. Da langreichweitige Korrelationen durch Trends und andere Nichtstationaritäten vorgetäuscht werden können, sollten trendbereinigende Methoden eingesetzt werden.

### a) Universelle Langzeitkorrelationen für Wetterstationen auf den Kontinenten

Wir betrachten tägliche Temperaturreihen  $T_i$ , die an einem festen Ort gemessen wurden [KOSCIELNY-BUNDEetal-96, KOSCIELNY-BUNDEetal-98a, KOSCIELNY-BUNDEetal-98b, BUNDE&KANTELHARDT-01, EICHNER-02, EICHNERetal-03]; der Index  $i$  läuft über den gesamten Beobachtungszeitraum, Schalttage werden weggelassen. Die schwarzen und grauen Flächen in Abb. II.D.1(a), die die positiven und negativen Abweichungen vom langjährigen Mittelwert kennzeichnen, zeigen die Erhaltungsneigung an. Um saisonal bedingte Einflüsse auszuschalten, bestimmen wir zunächst den Jahresgang, indem wir für jeden Kalendertag den über alle Jahre gemittelten Durchschnittswert  $\bar{T}_i$  berechnen, und ziehen ihn dann von den  $T_i$  ab. Die analysierte Reihe ist  $x_i = T_i - \bar{T}_i$ .

Abbildung II.D.1(b) zeigt die Ergebnisse von FA und DFA1 bis DFA5 für die Prager Reihe der Tagesmittelwerte. Den Einfluss eines Trends, der auf die Stadterwärmung von Prag zurückzuführen ist, sieht man in Abb. II.D.1(b) in der obersten Kurve (FA), die sich in dem doppelt logarithmischen Plot leicht nach oben krümmt, was einem Übergang zur Sättigungssteigung 1.0 für die FA entspricht. Abgesehen von sehr großen Zeitskalen  $s > 1500$  Tagen (auf denen der Trend zur erhöhten Steigung von  $\alpha \approx 0.8$  führt) und abgesehen von Zeitskalen innerhalb einer Großwetterlage (unter 10 Tagen) hat die FA-Kurve näherungsweise die Steigung  $\alpha = 0.65$ . Die gleiche Steigung



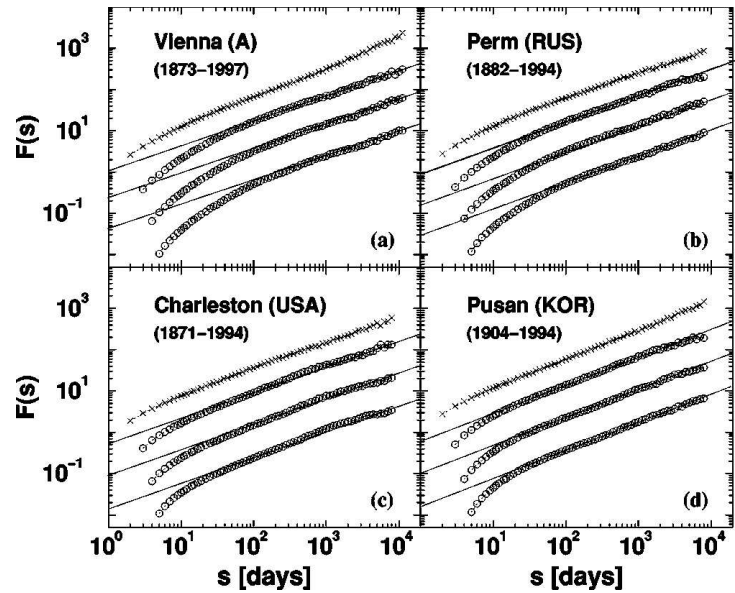
**Abb. II.D.1:** Analyse der Prager Temperaturdatenreihe, die aus den gemessenen Tagesmittelwerten von 1775 bis 1992 besteht. Teil (a) zeigt für die Jahre 1900 und 1901 die mittlere Tagestemperatur  $T_i$ , wobei die Abweichungen vom Jahresgang nach oben und unten schwarz bzw. grau schraffiert sind. Die Teile (b) und (c) zeigen die Fluktuationfunktionen  $F(s)$  für FA und DFA1 bis DFA5 für die Originaldaten bzw. für Daten, die nach der Subtraktion des Jahresganges zufällig gemischt wurden, um die langreichweitigen Korrelationen zu zerstören (in Anlehnung an [KOSCIELNY-BUNDEetal-98a] nach [BUNDE&KANTELHARDT-01]).

finden wir für die DFA1- bis DFA5-Kurven. Da die Steigungen systematisch konstant bleiben, schließen wir aus Abb. II.C.1(b) und unter Verwendung von Gl. (II.A.18), dass die trendbereinigte Temperatur-Korrelationsfunktion auf langen Zeitskalen wie  $C(s) \sim s^{-\gamma}$  mit  $\gamma \approx 0.7$  abnimmt. Zum Vergleich wurden die Daten zufällig durcheinander gemischt. Das DFA-Ergebnis in Abb. II.D.1(c) zeigt die erwartete Steigung 0.5, d.h. die Verteilung der Messwerte ist nicht breit. Die Abweichungen von der Steigung 0.5 bei großen Zeitskalen sind auf unzureichende Statistik zurückzuführen und zeigen an, bis zu welchen Skalen die Analyse verlässlich ist.

Abbildung II.D.2 zeigt die Analyseergebnisse für vier weitere Wetterstationen aus dem Inneren und vom Rand verschiedener Kontinente [EICHNERetal-03]. Man erkennt, dass bis auf Kurzzeitkorrelationen unterhalb von ca. 10 Tagen, die durch Großwetterlagen verursacht werden, auch hier gleichmäßiges Skalenverhalten über viele Größenordnungen der Zeit vorliegt (zur Abschätzung der Übergangszeitskala, siehe Abschnitt II.A.2.c). Die Persistenz erzeugenden Mechanismen im Wetter- und Klimasystem verursachen also ein weitgehend einheitliches Skalenverhalten. Ähnliche Ergebnisse wurden für alle bisher untersuchten langen Temperaturzeitreihen von Wetterstationen auf den Kontinenten erhalten [KOSCIELNY-BUNDEetal-98a, EICHNER-02, EICHNERetal-03]. Auch eine Wavelet-Analyse erbrachte dieselben Werte für die Fluktuationsexponenten [KOSCIELNY-BUNDEetal-98a]. Die universelle Steigung  $\alpha \approx 0.65$  der Geraden ist außerdem unabhängig vom Abstand der Wetterstation von der Küste [EICHNERetal-03, BUNDEetal-03a].

Abbildung II.D.3 zeigt ein Histogramm der Fluktuationsexponenten  $\alpha$ , die aus den DFA2-Fluktuationfunktionen für die täglichen Temperaturreihen von 95 Wetterstationen bestimmt wurden [EICHNERetal-03]. Man erkennt, dass bis auf die Inselstationen praktisch alle Datensätze den universellen Skalenexponenten  $\alpha \approx 0.65$  aufweisen. Schon Hurst hatte für das Skalenverhalten von Temperaturreihen den Exponenten  $H = 0.68 \pm 0.09 \gtrsim \alpha$  angegeben [HURSTetal-65, FEDER-88].

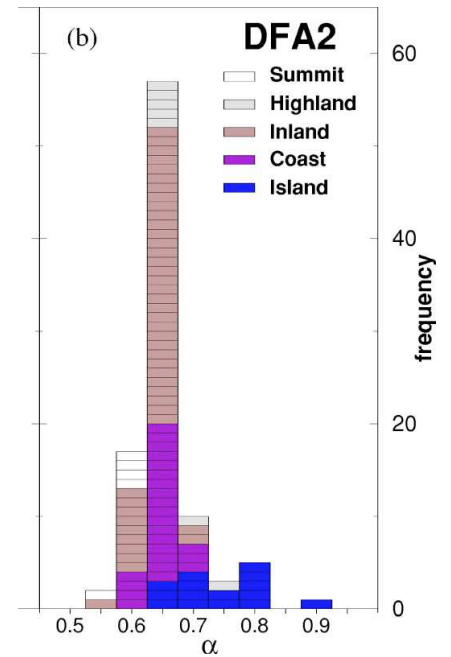
Dieses Ergebnis ist konsistent mit den Resultaten verschiedener Gruppen, die mit verschiedenen Methoden arbeiten. Basierend auf der Spektralanalyse berichten [PELLETIER&TURCOTTE-97, PELLETIER-97, PELLETIER-98] zum Teil von etwas stärkeren Korrelationen ( $\alpha \approx 0.75$  entsprechend  $\beta = \gamma = 0.5$ ) sowie von einem veränderten Skalenverhalten oberhalb von 2000 Jahren bei aus Eisbohrkernen rekonstruierten Temperaturdaten. In [TALKNER&WEBER-00, WEBER&TALKNER-01] wurden die Ergebnisse der klassischen Autokorrelationsanalyse, der Spektralanalyse, der Hurst-Analyse, der FA und der DFA verglichen, mit dem Ergebnis, dass sowohl Hurst-Analyse als auch DFA klar die Langzeitkorrelationen zeigen, während bei der klassischen Autokorrelationsanalyse und der Spektralanalyse Probleme auftraten. [TALKNER&WEBER-00] fanden für sieben Reihen von middle-



**Abb. II.D.2:** Analyse von vier typischen täglichen Temperatur-Datensätzen aus dem Inneren und vom Rand verschiedener Kontinente. Die Fluktuationfunktionen von DFA0 ( $\times$ , äquivalent zu FA) und DFA1 bis DFA3 ( $\circ$ , von oben nach unten) sind doppelt logarithmisch gegen die Skala in Tagen aufgetragen. Die Steigungen der eingezeichneten Geraden sind  $\alpha = 0.64 \pm 0.02$  (Wien, kontinental),  $0.62 \pm 0.02$  (Perm, kontinental),  $0.63 \pm 0.02$  (Charleston, nahe einer Küste) und  $0.67 \pm 0.02$  (Pusan, nahe einer Küste). Die höheren Steigungen auf kleinen Skalen sind auf Großwetterlagen zurückzuführen (aus [EICHNERetal-03]).

ren Tagestemperaturen mit Spektralanalyse (mit DFA)  $\alpha \approx 0.62$  (0.66), während bei den minimalen bzw. maximalen Tagestemperaturen  $\alpha \approx 0.62$  (0.65) bzw.  $\alpha \approx 0.62$  (0.67) herauskam. Nur die Kurzzeitkorrelationen, die von den Großwetterlagen abhängen, weisen nach diesen Arbeiten ein nicht-universelles Verhalten auf. Nach Untersuchungen von [TALKNER&WEBER-00] lassen sich für das Leistungsspektrum  $P(f)$  ein gestreckt exponentieller Verlauf,  $P(f) \sim \exp[-(f/f_0)^\gamma]$ , oder eine Weibull-Verteilung,  $P(f) \sim (f/f_0)^{\gamma-1} \exp[-(f/f_0)^\gamma]$ , nicht ausschließen. Weiterhin vertreten [FRAEDRICH&BLENDER-03, BLENDER&FRAEDRICH-03] basierend auf Spektralanalysen und DFA2-Ergebnissen die Ansicht, dass die Temperaturreihen im Inneren der Kontinente unkorreliert sind ( $\alpha \approx 0.5$ ) und nur in der Nähe einer Küste langreichweitige Korrelationen auftreten ( $\alpha \approx 0.65$ ); diese wird von [BUNDEetal-03a] widerlegt.

Ergebnisse zur multifraktalen Analyse von Temperaturdaten wurden bislang nicht veröffentlicht. Der Grund ist, dass die Daten praktisch monofraktales Verhalten aufweisen, siehe Fußnote [8] in [KOSCIELNY-BUNDEetal-98a]. Kürzlich wurden mit der Amplituden-DFA (siehe Abschnitt II.A.2.e) universelle, aber schwache Korrelationen ( $\alpha_{\text{ampl}} = 1.60 \pm 0.03 > 1.5$ ) in zehn Reihen von Beträgen von Temperatur-Inkrementen  $|\delta T_i| = |T_{i+1} - T_i|$  nachgewiesen [GOVINDANetal-03], was nichtlineare Komponenten in den Reihen anzeigt. Dabei wurde der Jahresgang erst *nach* der Bildung der  $|\delta T_i|$  abgezogen. Da ein Wert  $\alpha_{\text{ampl}} > 1.5$  auch bei multifraktalen Modelldaten beobachtet wird [ASHKENAZYetal-03a], könnte dies bedeuten, dass die Temperatur-Reihen doch leicht multifraktal sind. Auf jeden Fall sind die Temperatur-Zeitreihen aber weniger komplex als z.B. Niederschlags- oder Abflussreihen, bei denen eine multifraktale Beschreibung unumgänglich ist. Die Universalität der Langzeitkorrelationen bei Temperaturreihen deutet darauf hin, dass es sich dabei um ein globales Phänomen handelt, das unabhängig von den lokalen Gegebenheiten der jeweiligen Messstationen ist. Ursache könnte die Kopplung der Atmosphäre an die Ozeane sein, was auch die stärkeren Korrelationen bei Inselstationen erklären könnte, um die es jetzt gehen soll.



**Abb. II.D.3:** Histogramme der DFA2-Fluktuationsexponenten  $\alpha$  für 95 tägliche Temperaturzeitreihen. Jedes Kästchen entspricht einer Wetterstation, und die Graustufe gibt die Lage der Station an, Gipfelflage (weiß), Hochland, Tiefland, Küste (immer dunklere Graustufen) und Insel (schwarz). Mit Ausnahme der Inselstationen zeigen praktisch alle Datensätze den universellen Skalenexponenten  $\alpha \approx 0.65$  (aus [EICHNERetal-03]).

### b) Unterschiedliche Kurz- und Langzeitkorrelationen der Meerestemperaturen

Die Fluktuationen der Meerwasser-Oberflächen-Temperaturen und der Lufttemperaturen auf kleineren Inseln lassen sich weniger einfach charakterisieren als bei kontinentalen Wetterstationen [MONETTIetal-03, EICHNERetal-03, VJUSHINetal-04]. Das Histogramm in Abb. II.D.3 zeigt, dass die Skalenexponenten für die Inselstationen merklich größer sind und stärker streuen zwischen  $\alpha = 0.65$  und 0.9. Für Daten auf See sind vier Probleme wesentlich: (i) Die Aufzeichnungen reichen nicht so weit in der Vergangenheit zurück, so dass die Statistik schlechter ist, (ii) man muss auf (räumlich und zeitlich) interpolierte Daten zurückgreifen, weil die Schiffe keine festen Standorte haben, (iii) Kurzzeitkorrelationen spielen eine größere Rolle, und (iv) spezifische Oszillationsprozesse auf Zeitskalen von bis zu mehreren Jahren haben teilweise einen großen Einfluss und verhindern ein einheitliches Skalenverhalten. Dementsprechend ist das Skalenverhalten recht uneinheitlich [MONETTIetal-03]. Für die Analyse standen monatliche und wöchentliche Meeres-Oberflächen-Temperatur-Daten zur Verfügung, die durch Interpolation von Aufzeichnungen britischer Schiffe [PARKER-

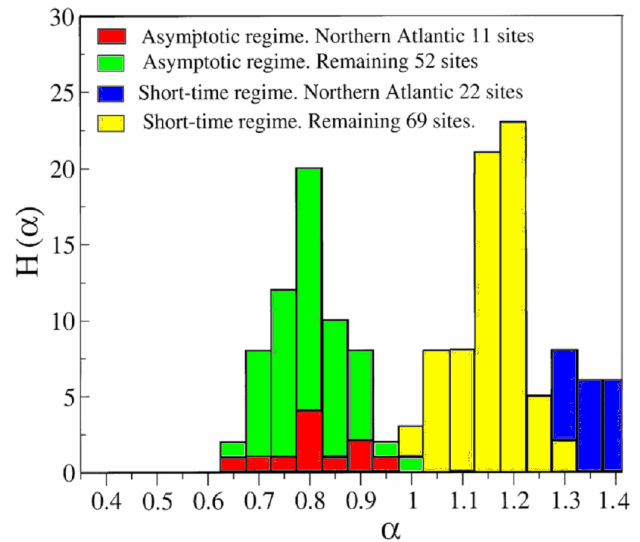


tal-94] gewonnen wurden [REYNOLDS&MARSCO-93, REYNOLDS&SMITH-94, KAPLANetal-98, RAYNERetal-03]. Wie das zugehörige Histogramm in Abb. II.D.4 zeigt, können sowohl die Temperaturdaten im Atlantik als auch die im Pazifik im asymptotischen Bereich mit einem Fluktuationsexponenten  $\alpha = 0.80 \pm 0.08$  charakterisiert werden, wobei die Verteilungen deutlich breiter sind als für die kontinentalen Wetterstationen. Für Gebiete, die stark von der südlichen El Niño-Oszillation beeinflusst werden, war keine Bestimmung der Langzeitkorrelationen möglich, weil sich dort nur Auswirkungen der periodischen Schwankungen auf Zeitskalen von 2 bis zu 20 Jahren zeigen. Abweichend von diesen DFA-Ergebnissen vertreten [FRAEDRICH&BLENDER-03, BLENDER&FRAEDRICH-03] basierend auf DFA und auf Spektralanalysen die Meinung, dass die Temperaturen über den Ozeanen  $1/f$ -Rauschen zeigen, d.h.  $\alpha = \beta = 1$ , was genau an der Grenze zur Nichtstationarität liegt und einer konstanten Autokorrelationsfunktion entspricht.

Das Kurzzeit-Verhalten, das sich bei den Temperaturdaten auf See bis zu Zeitskalen von ungefähr 10 Monaten hinzieht, ist von noch deutlich stärkeren Korrelationen bestimmt. Für die Gebiete im Pazifik finden [MONETTIetal-03] nichtstationäres Verhalten mit  $\alpha = 1.17 \pm 0.08$ , während die Gebiete im Atlantik sogar noch stärker nichtstationär sind ( $\alpha = 1.38 \pm 0.04$ ), siehe auch Abb. II.D.4. Der höhere Wert für den Atlantik wird auf die nordatlantische Oszillation zurückgeführt. Mir erscheint es fraglich, ob diese Werte hohen  $\alpha$ -Werte im nichtstationären Bereich auf wirkliche Temperaturfluktuationen zurückgehen oder eher auf die zur Datenrekonstruktion verwendeten Interpolationsmethoden und die höhere Schiff-Dichte im Atlantik (zur Problematik bei der Rekonstruktion von Zeitreihen aus Paläodaten siehe Abschnitt II.D.4).

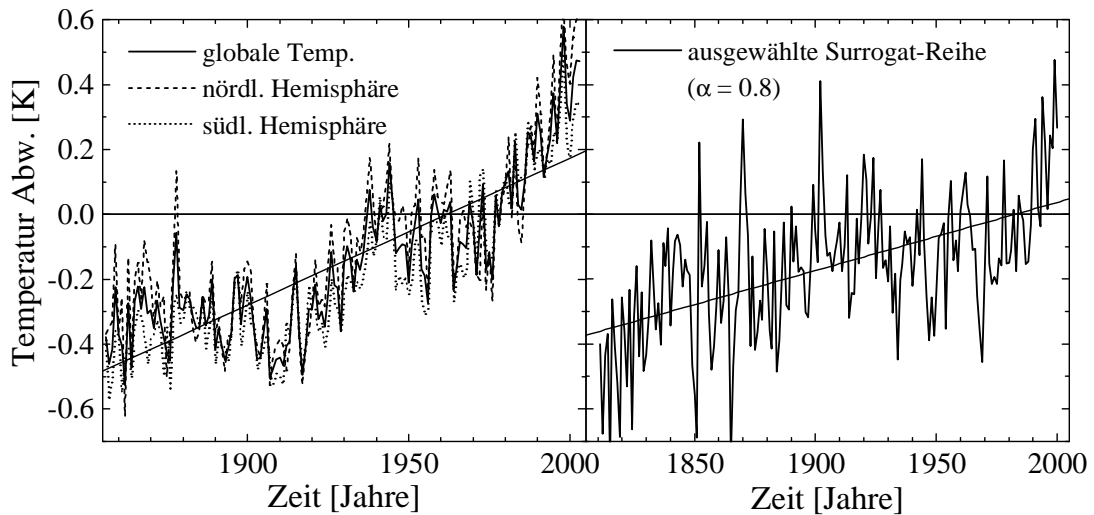
### c) Trends in den Temperaturreihen und Vergleich mit Klimamodellen

Im jüngerer Zeit ist die Diskussion über eine anthropogen verursachte Klimaerwärmung in den Mittelpunkt des öffentlichen Interesses gerückt, was zu einer mehr und mehr politisierten Diskussion auch bei den wissenschaftlichen Beiträgen zu diesem Thema geführt hat [HASSELMANN-97, SOONetal-01, RAHMSTORF-03]. Inzwischen gilt es als extrem unwahrscheinlich, dass der beobachtete Temperaturanstieg von ungefähr einem halben Grad pro Jahrhundert ausschließlich natürliche Ursachen hat. Abbildung II.D.5(a) zeigt den Verlauf der rekonstruierten mittleren Jahrestemperaturen in der nördlichen und der südlichen Hemisphäre sowie den weltweiten Verlauf [JONESetal-99, RAYNERetal-03, JONES&MOBERG-03], wobei jeweils die Mittelwerte der Jahre 1960 bis 1990 subtrahiert werden. Die Genauigkeit der Jahrestemperatur-Abweichungen wird mit  $\pm 0.05$  K angegeben [FOLLANDetal-01]. Die Rekonstruktion basiert auf ungefähr 3000 monatlichen Temperaturreihen von Landstationen und den Oberflächen-Wassertemperatur-Daten der Seeschiffe (siehe oben). Die räumliche und zeitliche Verteilung der Messpunkte ist sehr ungleichmäßig; insbesondere in den südlichen Ozeanen gibt es große Lücken [RAYNERetal-03, JONES&MOBERG-03].



**Abb. II.D.4:** Histogramm der Fluktuationsexponenten  $\alpha$  für 63 monatliche Temperaturzeitreihen für Interpolations-Gitterpunkte im Atlantik und im Pazifik, aus denen man das Langzeit-Korrelationsverhalten ablesen kann, sowie für 91 wöchentliche Temperaturzeitreihen vom Atlantik und vom Pazifik, aus denen man das Kurzzeit-Korrelationsverhalten ablesen kann. Für das Langzeit-Regime wurden die Gitterpunkte weggelassen, bei denen die südliche El Niño-Oszillation eine große Rolle spielt (nach [MONETTIetal-03]).



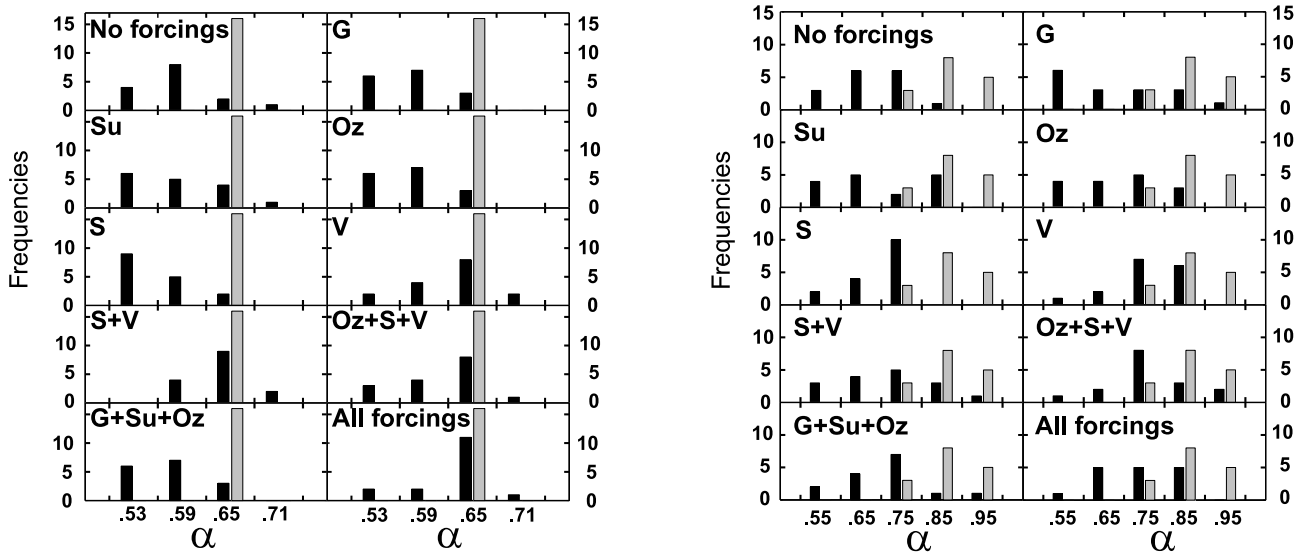


**Abb. II.D.5:** (a) Rekonstruktion der Abweichungen der mittleren Jahrestemperaturen von der Durchschnittstemperatur (1960 bis 1990) für die nördliche und südliche Hemisphäre sowie für die ganze Welt (Daten aus [JONES&MOBERG-03]). Die Gerade ist eine lineare Regression an die globalen Daten mit der Steigung 0.45 K pro Jahrhundert. (b) Ausschnitt aus einer langen Reihe langzeitkorrelierter Zufallszahlen ( $\alpha = 0.8$ ,  $\gamma = 0.4$ ; erzeugt mit der Fourier-Filter-Methode), der so ausgewählt wurde, dass ein scheinbarer Trend mit der Steigung 0.22 K pro Jahrhundert (lineare Regression) erkennbar ist, obwohl die Daten keinen Trend, sondern nur Langzeitkorrelationen enthalten (Teil (b) nach [BUNDE&KANTELHARDT-01]).

Man erkennt, dass es im Zeitraum von ca. 1920 bis 1940 und von 1980 bis in die Gegenwart signifikante Erwärmungstendenzen gegeben hat. Ein linearer Fit durch die globalen Daten (siehe Abb. II.D.5(a)) ergibt eine mittlere Erwärmung von 0.45 K pro Jahrhundert, wobei der Wert allerdings etwas größer ausfällt, wenn man den Zeitraum bis 1920 weglassen würde (0.67 K pro Jahrhundert). Die fünf wärmsten Jahre sind, in absteigender Reihenfolge, 1998, 2002, 2001, 1997 und 1995.

Das Vorliegen von Langzeitkorrelationen in den Temperatur-Datenreihen hat Konsequenzen, sowohl für die Abschätzung der Eintrittswahrscheinlichkeit von Extremereignissen (siehe Abschnitt II.E), als auch für die Trendbestimmung, um die es jetzt geht. Konventionell wird die Trendanalyse durch gleitende Mittelwerte („moving averages“) durchgeführt, bei denen die Daten über hinreichend große Zeitfenster gemittelt werden. Unter der Annahme, dass sich die zufälligen Fluktuationen herausmitteln, kann man Aufschluss über die Trends bekommen. Dass dieses Verfahren im Falle von Langzeitkorrelationen nicht funktioniert, zeigt Abb. II.D.5(b), in der ein Ausschnitt aus einer langen Reihe langzeitkorrelierter künstlicher Daten (mit  $\alpha = 0.8$ ,  $\gamma = 0.4$ ) zu sehen ist (erzeugt mit der Fourier-Filter-Methode, siehe Abschnitt II.A.1.c). Die Daten schwanken um Null und Trends gibt es keine. Gleichwohl zeigt die lineare Regression scheinbare Trends an; allerdings ist der Anstieg mit 0.22 K pro Jahrhundert nicht so stark wie bei den echten Daten in Abb. II.D.5(a).

Die Schwierigkeiten bei der Unterscheidung von solchen scheinbaren Trends aufgrund von Langzeit-Korrelationen in den Daten einerseits und echten Trends andererseits verlangt also nach einem besseren Verfahren als einfacher Glättung und Regression. Die Analyse in [EICHNERetal-03], die auf einem Vergleich von DFA0- und DFA2-Exponenten beruht, zeigt, dass wesentliche Trends vor allem bei Wetterstationen in Großstädten auftreten. Ein typisches Beispiel dafür ist die Station in Wien (Abb. II.D.2(a)), bei der sich die DFA0-Fluktuationsfunktion oberhalb einer Übergangszeit von ca. 1000 Tagen (3 Jahren) nach oben krümmt. Starke Trends zeigen sich in einer kurzen Übergangszeit und in starken Unterschieden zwischen den DFA0- und DFA2-Kurven (siehe Abschnitt II.A.2.c). Sie kommen hauptsächlich bei Wetterstationen in großen Städten vor, was sich aber auch ohne globale Klimaerwärmung durch das Städtewachstum und die damit verbundene urbane Erwärmung erklären lässt. Trends, die nicht auf das Städtewachstum zurückgeführt werden können, zeigen sich nur bei etwa der Hälfte der Inselstationen und bei den Gipfelstationen in den Alpen.



**Abb. II.D.6:** Histogramme für die DFA2-Fluktuationsexponenten  $\alpha$  für 16 Wetterstationen auf dem Festland (links) und 16 Gitterpunkte im Atlantik (rechts). Die grauen Balken zeigen die Verteilung der  $\alpha$ -Werte für Messdaten an, während die schwarzen Balken sich auf die vom parallelen Klimamodell des NCAR generierten Datenreihen beziehen. Während die Messdaten jeweils gleich sind, stammen die Modelldaten von zehn Simulationsszenarien, die sich in den berücksichtigten externen Beeinflussungen der Atmosphäre unterscheiden; im jeweils ersten Bild sind keine externen Beeinflussungen berücksichtigt, dann nacheinander bzw. gleichzeitig Treibhausgas (G), Sulfate (Su), Ozon (Oz), Sonneneinstrahlung (S) und vulkanische Einflüsse (V), sowie im jeweils letzten Teilbild alle Einflüsse (aus [VJUSHINetal-04]).

Heute werden Klimamodelle eingesetzt, um die Geschwindigkeit der Erwärmung zu bestimmen. Die globalen Klimamodelle (gekoppelte Atmosphären-Ozean Modelle für allgemeine Zirkulation, “coupled atmosphere-ocean general circulation models“, AOGCM) ziehen vielfältige Beeinflussungen der Atmosphäre z.B. durch die Ozeane, den wachsenden Gehalt der Luft an Treibhausgasen (vor allem  $\text{CO}_2$ ) und an Aerosolen mit in Betracht, wie auch Schwankungen der Sonneneinstrahlungs-Intensität, die zum Teil durch Vulkanasche in hohen Atmosphärenschichten verursacht werden [GRASSL-00, GANOPOLSKI&RAHMSTORF-01, YE&LU-03]. Ein typisches Klimamodell basiert auf einem weltumspannenden räumlichen Gitter mit 300 bis 500 km Gitterweite und 10 bis 20 vertikalen Schichten, während für die (kurzfristigen) Wettervorhersagen Modelle mit weniger als 100 km Gitterweite und mindestens 30 vertikalen Schichten verwendet werden. Wichtige Prozesse, wie z.B. Wolkenbildung werden durch effektive Modellierung mit Parametern beschrieben, weil die Ortsauflösung für eine explizite Beschreibung nicht ausreicht. Die Klimamodelle liefern für jeden Gitterpunkt Temperaturdaten mit meist monatlicher Zeitauflösung.

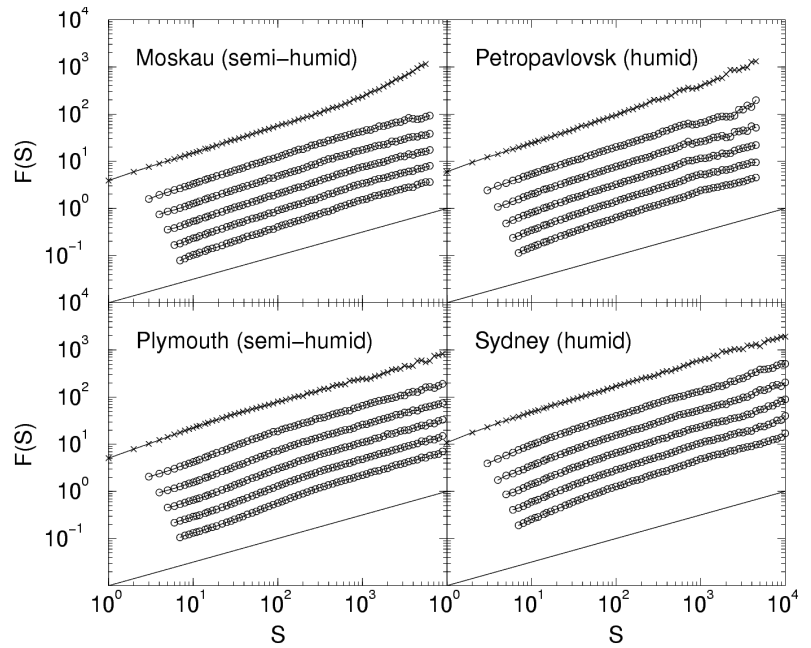
Da das Persistenzgesetz für die Temperaturen auf den Kontinenten universell ist, können durch einen Vergleich die Ergebnisse der Modelle kritisch geprüft werden. Solche Untersuchungen wurden vor kurzem durchgeführt [GOVINDANetal-01, GOVINDANetal-02, VJUSHINetal-02, GOVINDANetal-03, VJUSHINetal-04]. Abbildung II.D.6 zeigt Histogramme der Fluktuationsexponenten  $\alpha$  für Wetterstations-Daten [KOSCIELNY-BUNDEetal-98a, EICHNERetal-03] und Atlantik-Oberflächentemperaturen [PARKERetal-94, KAPLANetal-98, RAYNERetal-03] (grau) im direkten Vergleich mit Histogrammen für Klimamodell-Daten des parallelen Klimamodells (PCM) des National Center for Atmospheric Research (NCAR) in Boulder, Colorado [WASHINGTONetal-00, DAIetal-01, MEEHLeetal-03] (schwarz) für zehn verschiedene Simulationsszenarien, die sich in den berücksichtigten externen Beeinflussungen der Atmosphäre unterscheiden. Dabei schneiden nur die Modellsimulationen im Hinblick auf korrekte Langzeitkorrelationen gut ab, bei denen auch die Schwankungen der Sonneneinstrahlungs-Intensität (S) und insbesondere der Einfluss von Vulkanasche (V) in hohen Atmosphärenschichten berücksichtigt sind. Den wesentlichen Einfluss der Vulkanaktivitäten haben wohl

auch die Modell-Entwickler erkannt, denn kürzlich wurde ein verbesserter, orts aufgelöster Datensatz mit vulkanischen Einflüssen publiziert [AMMANN*etal*-03]. Am besten schneidet das Szenario ab, bei dem alle Einflüsse betrachtet werden (“all forcings“, siehe Abb. II.D.6 unten). Das gilt allerdings nur für die Landstationen (linker Teil). Mit den rekonstruierten Messungen auf See (rechter Teil) ist im Hinblick auf das Korrelationsverhalten bei keinem Szenario eine befriedigende Übereinstimmung zu erkennen, wobei nicht eindeutig zu klären ist, ob das ein Problem der Datenrekonstruktion oder ein Problem des betrachteten Klimamodells ist. In letzterem Fall wäre in dem Modell die Koppelung zwischen Atmosphäre und Ozeanen verbesserungswürdig.

Weiterhin wurde kürzlich gezeigt [GOVINDAN*etal*-03], dass vier Klimamodelle die universellen Langzeitkorrelationen in den Absolutwerten der Temperatur-Inkrementen nicht korrekt reproduzieren können. Das gilt für verschiedene Szenarien und bedeutet, dass die Modelldaten weniger nicht-linear sind als die Messdaten. Zusammenfassend ist allerdings zu sagen, dass die Klimamodelle in Bezug auf die Simulation der kontinentalen Temperaturen schon recht gut sind.

## II.D.2. Niederschlags-Zeitreihen

Nach den Temperaturreihen mit ihrem weitgehend universellen monofraktalen Skalenverhalten will ich jetzt Niederschlagsreihen betrachten, die standardmäßig ebenfalls in Wetterstationen aufgezeichnet werden. Die Messgröße ist dabei die tägliche Niederschlagsmenge  $R_i$ . Da es an vielen Tagen überhaupt nicht regnet, hat die Verteilung der Niederschlagsmengen im Gegensatz zu den Temperaturen ein „Atom“ bei 0, d.h. dieser Wert kommt mit einer von der Auflösung weitgehend unabhängigen Wahrscheinlichkeit in den Reihen vor. Dadurch wird die Beseitigung des Jahresgangs schwieriger, denn der Jahresgang  $\bar{R}_i$  selbst ist weniger glatt und kann in die korrigierten Daten  $x_i = R_i - \bar{R}_i$  in sehr regenarmen Perioden dominieren. Auf jeden Fall muss bei der Interpretation der Ergebnisse mehr als bei den Temperaturreihen darauf geachtet werden, ob noch Reste des Jahresgangs in den  $x_i$  vorhanden waren. Weitergehende Möglichkeiten zur Beseitigung des Jahresgangs, wie eine Division durch den Jahresgang der Standardabweichung oder eine Eliminierung der spektralen Maxima bei 365 Tagen und Vielfachen davon in den Frequenzspektren der Originaldaten oder ihrer Inkremente (siehe z.B. [LIVINA*etal*-03b]), können keine vollständige Beseitigung aller Einflüsse des Jahresgangs garantieren, sondern die Effekte nur verringern. Für Niederschlagsdaten ist der Unterschied minimal, und daher möchte ich hier keine komplizierte Prozedur verwenden, deren Nebeneffekte schlecht überschaubar sind.



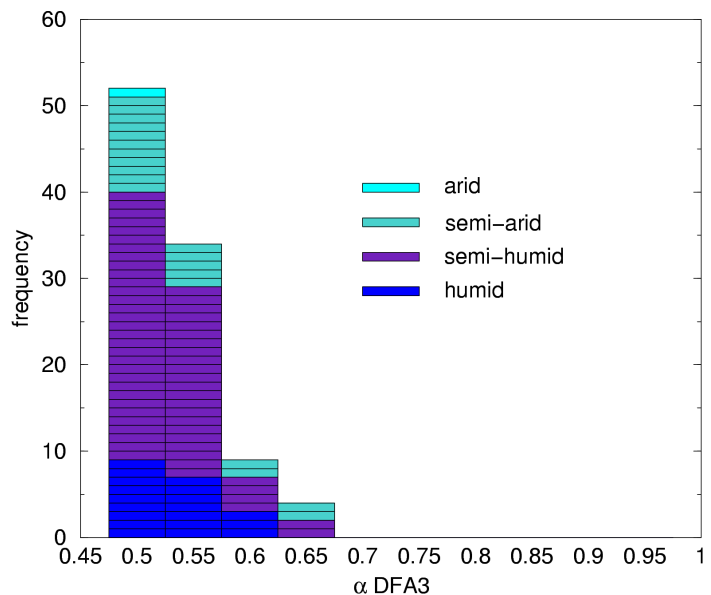
**Abb. II.D.7:** Analyse von vier typischen täglichen Niederschlags-Datensätzen aus dem Inneren und vom Rand verschiedener Kontinente. Die Fluktuationsfunktionen  $F(s)$  von FA (×) und DFA1 bis DFA4 (•, von oben nach unten) sind doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  in Tagen aufgetragen. Die Steigung der unten eingezeichneten Geraden beträgt  $\alpha = 0.5$ . Die Krümmung der FA-Kurve für Moskau auf Zeitskalen oberhalb von ca. 1000 Tagen ist wohl auf urbane Erwärmung zurückzuführen (aus [RYBSKI-02]).

### a) Universelles Korrelationsverhalten: Keine Langzeitkorrelationen

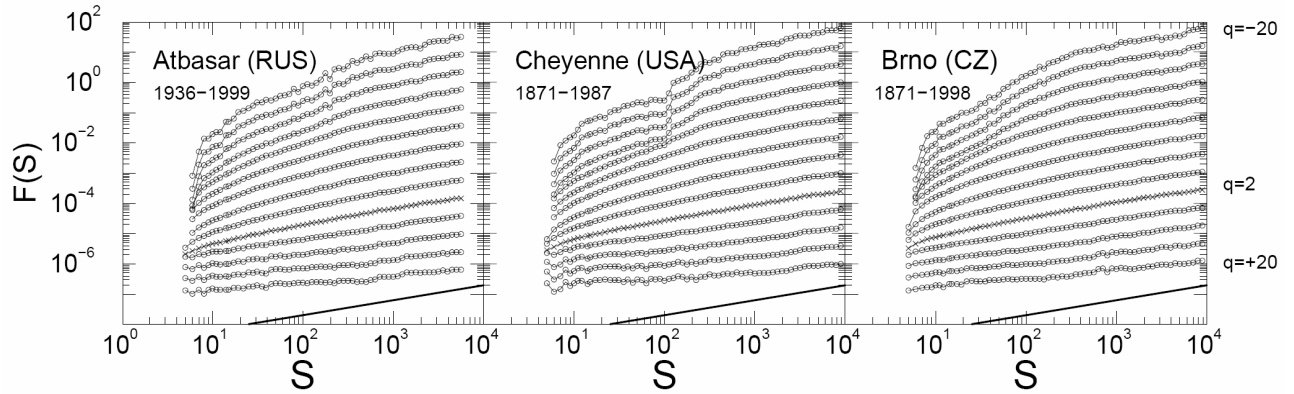
Im Gegensatz zum Jahresgang können Trends und andere längerfristige Nicht-stationaritäten in den Daten durch den Vergleich der Ergebnisse bei verschiedenen Ordnungen der DFA erkannt und beseitigt werden. Die Untersuchung von Niederschlagsreihen kann daher helfen, die Skaleneigenschaften der wirklichen Fluktuationen zu charakterisieren, worüber es in der Literatur unterschiedliche Ansichten gibt. Basierend auf Ergebnissen der Spektralanalyse finden [FRAEDRICH&LARNER-93] weißes Rauschen auf mittleren Zeitskalen sowie rosa Rauschen (langreichweitige Korrelationen) auf Zeitskalen oberhalb von drei Jahren. Andererseits berichten mehrere Gruppen von fraktalem Skalenverhalten und langreichweitigen Korrelationen auf Zeitskalen unter drei Jahren [LOVEJOY&MANDELROT-85, MATSOUKAS*et al.*-00, PETERS*et al.*-02, PETERS&CHRISTENSEN-02]; für neuere Arbeiten zu Übergängen im Skalenverhalten siehe [MARANI-03, DOUGLAS&BARROS-03].

Wir haben lange, tägliche Niederschlagszeitreihen aus 99 Wetterstationen analysiert [RYBSKI-02, KANTELHARDT*et al.*-03c, KANTELHARDT*et al.*-04], von denen sich 40 in Europa befinden, 34 in Asien, 20 in Nord- und Südamerika und 5 in Australien. Die Stationen liegen zwischen 0 und 3650m Höhe über dem Meer (Durchschnitt 400m) in maritimen (33), kontinentalem (56) und tropischem (10) Klima, wobei 19 Orte humid sind, 59 semi-humid, 20 semi-arid und ein Ort arid. Die Länge der Datensätze beträgt zwischen 34 und 189 Jahre (Durchschnitt 86 Jahre), so dass sie ungefähr 12 000 bis 69 000 Datenpunkte umfassen.

Abbildung II.D.7 zeigt die DFA-Ergebnisse für die Niederschlagsreihen von vier typischen Wetterstationen auf verschiedenen Kontinenten und sowohl an der Küste wie auch im Landesinneren. Man erkennt dass alle DFA-Kurven eine Steigung sehr nahe bei  $\alpha = 0.5$  aufweisen, was unkorreliertes Verhalten anzeigt. Damit ist auch das Skalenverhalten der Niederschlagsreihen universell, aber es sind praktisch keine oder höchstens ganz schwache Langzeitkorrelationen vorhanden. Die Niederschlagsprozesse haben offensichtlich ein viel weniger ausgeprägtes Langzeitgedächtnis als die Temperaturen. Dieses Resultat hängt wohl mit den Kurzzeitprozessen bei der Wolkenbildung und Abregnung zusammen und ist bei der Klimamodellentwicklung zu berücksichtigen. Abbildung II.D.8 zeigt das Histogramm der DFA3-Fluktuationsexponenten für alle 99 Niederschlagsreihen. Dabei wurde das asymptotische Skalenverhalten der Fluktuationsfunktionen auf individuell für jede Reihe gewählten Zeitskalen in Bereichen von mehr als einer Dekade angepasst. Man erkennt, dass die weitaus meisten Reihen unkorreliert sind, und zwar unabhängig von der Feuchtezone. Auch von der geografischen Lage und der Klimazone gibt es keine systematische Abhängigkeit. Eine Schwankung von  $\alpha$  um 0.05 ist durchaus im Bereich der statistischen Unsicherheit (siehe Abschnitt II.A.4.f). Werte  $\alpha < 0.5$  kommen nicht vor, weil die Anpassungsbereiche entsprechend ausgewählt



**Abb. II.D.8:** Histogramm der DFA3-Fluktuationsexponenten  $\alpha$  für 99 tägliche Niederschlagszeitreihen. Jedes Kästchen entspricht einer Wetterstation, und die Graustufe gibt die Feuchte in der Klimazone an: arid und semi-arid (hellgrau), semi-humid (grün), humid (schwarz). Fast alle Reihen zeigen in dieser trendbereinigenden Analyse unkorreliertes Verhalten mit  $\alpha \approx 0.50$  bis  $0.55$  (aus [RYBSKI-02]).



**Abb. II.D.9:** Multifraktale DFA3-Fluktuationsfunktionen  $F_q(s)$  für drei typische Niederschlagszeitreihen, aus (a) Atbasar (Russland), (b) Ceyenne (USA) und (c) Brno (Tschechische Republik). Die Kurven entsprechen  $q = -20, -10, -6, -4, -2, -1, -0.2, 0.2, 1, 2 (\times), 4, 6, 10, 20$  (von oben nach unten) und sind zur Verdeutlichung vertikal verschoben. Die Geraden haben die Steigung  $\alpha = 0.5$  (aus [RYBSKI-02]).

wurden [RYBSKI-02]. Bei vier Stationen gibt es mit  $\alpha \approx 0.65$  merkliche langreichweitige Korrelationen, aber die Anzahl reicht nicht, um eine Systematik zu erkennen.

Diese Ergebnisse sind nicht in Übereinstimmung mit [MATSOUKASetal-00], die für neun Niederschlagsreihen mit 15 minütiger Auflösung von Langzeitkorrelationen berichten mit  $\alpha \approx 1.0$  auf Zeitskalen unterhalb von 10 Tagen und  $\alpha \approx 0.6$  bis 0.8 auf Zeitskalen zwischen 10 Tagen und 16 Monaten, und auch nicht in Übereinstimmung mit [PETERSetal-02, PETERS&CHRISTENSEN-02], die mit der Hurst-Analyse  $\alpha \approx 0.76$  auf Zeitskalen von bis zu 6 Monaten finden. Möglicherweise ist die Ursache für diese Abweichungen von unseren Ergebnissen in Nichtstationaritäten zu finden, die von der Hurst-Analyse und von der DFA1 nicht vollständig beseitigt werden und zu einer erhöhten Steigung auf großen Zeitskalen führen können. Es könnte gut sein, dass es bei den genannten Arbeiten Probleme mit dem Jahresgang gibt, der aus den hochaufgelösten Reihen nicht beseitigt werden kann, weil diese nicht über hinreichend viele Jahre gehen. Die Begründung der höheren  $\alpha$ -Werte durch Nichtstationaritäten wird auch dadurch gestützt, dass [MATSOUKASetal-00] mit Spektralanalyse Exponenten  $\beta$  finden, die  $\alpha \approx 0.5$  bis 0.6 entsprechen. Die Diskrepanz zwischen Ergebnissen der Spektralanalyse und der DFA deutet meist auf ein Problem mit Nichtstationaritäten hin [TAQUUetal-95]. Bei der Spektralanalyse stört der Jahresgang im Allgemeinen weniger, weil er sich nur in einem sehr engen Frequenzband um  $1/365 \text{ d}^{-1}$  zeigt. Die Ergebnisse der Spektralanalyse mit logarithmischem Binning (siehe Abschnitt II.A.1.c) in [MATSOUKASetal-00] sind in Übereinstimmung mit unseren DFA3-Ergebnissen.

### b) Nicht-universelles multifraktales Skalenverhalten

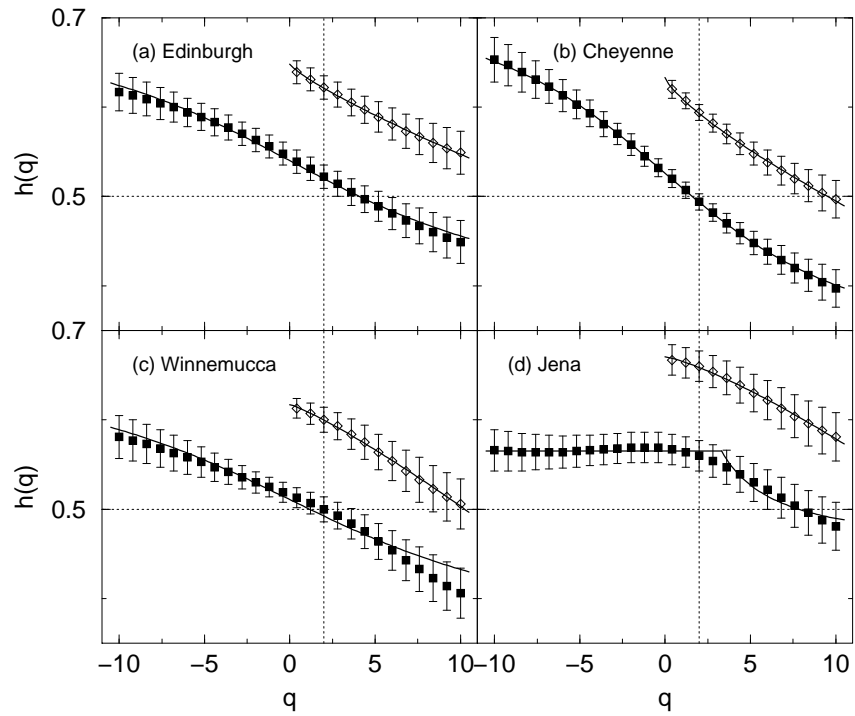
Es sind bereits mehrere Studien mit multifraktalen Analysen von Niederschlagsreihen publiziert worden, bei denen auf zeitliches und räumliches Skalenverhalten Wert gelegt wurde [TESSIERetal-93, LOVEJOY&SCHERTZER-95, TESSIERetal-96, HARRISetal-96, PANDEYetal-98, OLSSONetal-99, DEIDDAetal-99, DEIDDA-00, DOUGLAS&BARROS-03]. Allerdings beschränkten sich diese Ansätze meist auf die Multifraktalität und die Übergänge auf relativ kurzen Zeitskalen. Hier soll es um das asymptotische Verhalten auf Zeitskalen von über einem Jahr gehen, auf denen auch ein nicht vollständig beseitigter Jahresgang keine Störungen verursacht.

Abbildung II.D.9 zeigt drei MF-DFA-Untersuchungen (siehe Abschnitt II.A.4) von Niederschlagszeitreihen. Da die Ergebnisse für MF-DFA2 bis MF-DFA4 sich praktisch nicht unterscheiden, betrachten wir hier nur MF-DFA3. Man erkennt, dass der Skalenexponent der Standard-DFA,  $F_2(s)$ , zwar ziemlich genau  $h(2) = \alpha = 0.5$  beträgt, was unkorrelierte Fluktuationen bedeutet, dass aber die anderen Momente durchaus abweichende Fluktuationsexponenten zur Charakterisierung benötigen.

Für Cheyenne beispielsweise (Abb. II.D.9(b)) liegen die Steigungen zwischen  $h(-10) \approx 0.65$  und  $h(10) \approx 0.40$  und zeigen damit unterschiedliches Skalenverhalten von starken und schwachen Fluktuationen an. Im Gegensatz zu den Temperaturreihen (siehe Abschnitt II.D.1) ist die Multifraktalität der Niederschlagsreihen signifikant stärker als die scheinbare Multifraktalität, die bei kurzen Reihen aus statistischen Gründen immer beobachtet wird (siehe Abschnitt II.A.4.f). Die Fluktuationen für die negativen  $q$ -Werte lassen in Abb. II.D.9 auf Zeitskalen unter 100 bis 300 Tagen eine nochmals erhöhte Steigung erkennen. Es ist wahrscheinlich, dass diese scheinbar stärkere Multifraktalität durch Reste des Jahresgangs verursacht wird, und deshalb haben wir alle Fluktuationsexponenten  $h(q)$  auf Skalen oberhalb von 400 Tagen bestimmt. Dadurch, und

weil wir eine trendbereinigende Methode verwenden, sind unsere Ergebnisse nicht direkt mit den meisten vorhergehenden geophysikalischen Veröffentlichungen vergleichbar.

Abbildung II.D.10 zeigt für vier repräsentative Niederschlags-Datensätze das Ergebnis unserer Bestimmung der multifraktalen Skalenexponenten  $h(q)$ . Die  $h(q)$ -Funktion hat bei praktisch allen Datensätzen einen monoton fallenden Verlauf, so dass der Skalenexponent bei negativen  $q$  größer ist als bei positiven  $q$ . Um das multifraktale Verhalten zu charakterisieren, ist es sinnvoll, die  $h(q)$ -Kurven mit einem Modell zu beschreiben bzw. zu parametrisieren. In den Abschnitten II.A.4.b, c, d und g habe ich vier Modelle vorgestellt, deren Skalenverhalten nun mit dem der Niederschlagsreihen verglichen werden kann. In geophysikalischen Arbeiten wird das universelle Multifraktalmodell von Lovejoy und Schertzer [SCHERTZER&LOVEJOY-87, LOVEJOY&SCHERTZER-91, LAVALLEE-etal-93, TESSIERetal-96, PANDEYetal-98], siehe auch [RODRIGUEZ-ITURBE&RINALDO-97], am häufigsten verwendet, das in Abschnitt II.A.4.g beschrieben ist und die multifraktalen Skalenexponenten  $h(q)$  für positive  $q$  mit drei Parametern,  $H'$ ,  $C_1$  und  $\alpha'$ , charakterisiert (vgl. Glgn. (II.A.37) und (II.A.65)),



**Abb. II.D.10:** Ergebnisse der multifraktalen DFA2 für vier repräsentative Niederschlagsreihen (a) Edinburgh (Großbritannien), (b) Cheyenne (USA), (c) Winnemucca (USA) und (d) Jena (Deutschland). Die verallgemeinerten Fluktuationsexponenten  $h(q)$  wurden durch lineare Regression des asymptotischen Verlaufs der Fluktuationen  $F_q(s)$  in doppelt logarithmischen Bildern (wie in Abb. II.D.9) bestimmt und sind gegen  $q$  aufgetragen (■). Die Linien durch die ausgefüllten Symbole stellen Anpassungen des verallgemeinerten binomialen Multifraktalmodells, Gl. (II.D.2), dar, außer für (d), wo das bifraktale Modell, Gl. (II.D.3) verwendet wurde. Der Datensatz (c) ist ein Beispiel, in dem das verallgemeinerte binomiale Multifraktalmodell recht schlecht passt. In der oberen rechten Ecke jedes Teilbildes ist  $h(q)$  nochmals gezeigt (◇, um 0.1 nach oben verschoben) zusammen mit Linien, die einer Anpassung des Lovejoy-Schertzer-Multifraktalmodells, Gl. (II.D.1) entsprechen. Die gepunkteten Linien zeigen unkorreliertes Verhalten ( $h = 0.5$ ) bzw.  $q = 2$  an (aus [KANTELHARDTetal-04]).

$$h(q) = [1 + \tau(q)]/q = (H' + 1) - \frac{C_1}{\alpha' - 1} (q^{\alpha' - 1} - 1) \text{ für } q > 0. \quad (\text{II.D.1})$$

Abbildung II.D.10 zeigt, dass dieses Modell das Verhalten der verallgemeinerten Fluktuationsexponenten für positive  $q$  gut beschreibt; allerdings ist das Modell nicht für negative Momente zu gebrauchen. Das zweite, in Abschnitt II.A.4.b erklärte Modell ist das verallgemeinerte binomiale Multifraktalmodell, das auf (vgl. Gl. (II.A.51))

$$h(q) = [1 - \log_2(a^q + b^q)]/q \quad (\text{II.D.2})$$

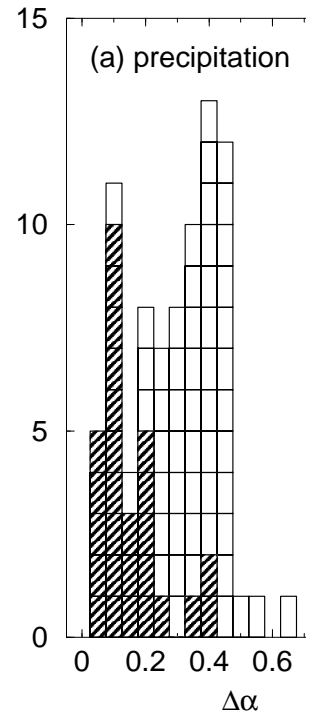
führt. Dieses Modell hat die Vorteile, (i) dass sich damit positive und negative Momente gleichzeitig beschreiben lassen, (ii) dass es mit nur zwei Parametern  $a$  und  $b$  auskommt, aus denen sich direkt die Stärke der Multifraktalität  $\Delta\alpha = h(-\infty) - h(\infty) = |\log_2(a/b)|$  berechnen lässt und (iii) dass sich zu Testzwecken leicht künstliche Datenreihen damit generieren lassen. Unsere Auswertung zeigt, dass sich mit dem Ansatz (II.D.2) die multifraktalen Skalenexponenten  $h(q)$  von 54 der 99 Niederschlagsreihen gut beschreiben lassen. Abbildung II.D.10 zeigt zwei solche Beispiele und eines, bei dem der verallgemeinerte binomiale Fit (II.D.2) nicht gut passt. Schließlich betrachten wir noch die beiden bifraktalen Modelle, die in den Abschnitten II.A.4.c und d beschrieben und zum Test der MF-DFA verwendet wurden. Das erste ist durch die Formeln (vgl. Gl. (II.A.55))

$$h(q) = \begin{cases} \alpha_1, & q > q_x \\ \alpha_2 + \frac{q_x}{q}(\alpha_1 - \alpha_2), & q < q_x \end{cases} \quad \text{oder} \quad h(q) = \begin{cases} \alpha_2 + \frac{q_x}{q}(\alpha_1 - \alpha_2), & q > q_x \\ \alpha_1, & q < q_x \end{cases} \quad (\text{II.D.3})$$

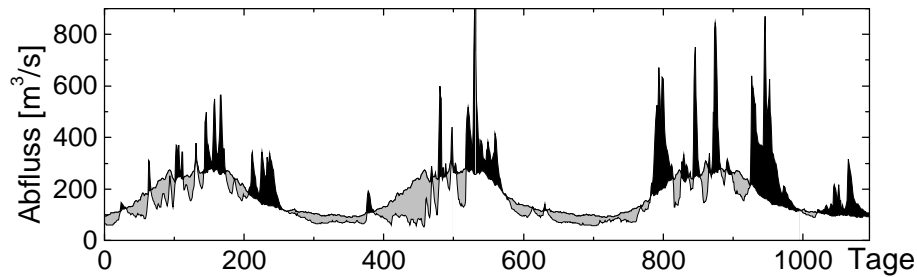
charakterisiert. Die Auswertung der Niederschlags-Datensätze zeigt, dass dieses Modell in 27 von 99 Fällen die beste Anpassung liefert. Auch dafür lässt sich die Stärke der Multifraktalität direkt berechnen,  $\Delta\alpha = h(-\infty) - h(\infty) = |\alpha_1 - \alpha_2|$ . In 18 Fällen ergeben weder Gl. (II.D.2) noch (II.D.3) eine befriedigende Anpassung, so dass wir die Multifraktalitätsstärke  $\Delta\alpha$  nicht über eine Parametrisierung bestimmen konnten.

Abbildung II.D.11 zeigt das Histogramm für die  $\Delta\alpha$ -Werte der 81 Niederschlagsreihen, für die Gl. (II.D.2) oder Gl. (II.D.3) verwendet werden konnte. Die Multifraktalitätsstärke  $\Delta\alpha$  bezeichnet den Bereich, in dem die lokalen Fluktuationsexponenten (Hölder-Exponenten)  $\alpha(i)$  variieren, siehe Abschnitt II.A.3.c. Auch hier ist kein Zusammenhang mit der geografischen Lage oder der Klimazone der einzelnen Wetterstationen zu erkennen. Man sieht nur, dass sich die Datensätze mit schwacher Multifraktalität tendenziell besser durch das bifraktale Modell beschreiben lassen, während die stark multifraktalen Datensätze besser mit dem verallgemeinerten binomialen Modell charakterisiert werden. Auf jeden Fall ist das Multifraktalverhalten der Niederschlagsreihen nicht universell. Der Mittelwert von  $\Delta\alpha$  für die 81 Wetterstationen beträgt  $0.29 \pm 0.14$ , was signifikant über der scheinbaren Multifraktalität aufgrund endlicher Reihenlängen liegt (systematischer Fehler  $\Delta\alpha \approx 0.05$  bis maximal 0.10, siehe Abschnitt II.A.4.f).

Das in Abschnitt II.A.4.d beschriebene bifraktale Modell, das auf einer breiten Verteilung der Werte der Zeitreihe statt auf langreichweitigen Korrelationen beruht, ist für keine der Niederschlagsreihen geeignet. Der Grund ist, dass für dieses Modell die gemischten Datenreihen genau dasselbe Skalenverhalten zeigen müssten wie die Originalreihen. Das ist bei den Niederschlagsdaten aber nicht der Fall. Tatsächlich ist die mittlere



**Abb. II.D.11:** Histogramm der Multifraktalitätsstärken  $\Delta\alpha$  für 81 Niederschlagsreihen, bei denen  $\Delta\alpha$  mit Gl. (II.D.2) (weiß) oder Gl. (II.D.3) (schraffiert) ermittelt werden konnte (aus [KANTELHARDTetal-04]).



**Abb. II.D.12:** Ausschnitt der Abflussreihe der Weser am Pegel Vlotho (1823-1825). Die positiven (negativen) Abweichungen vom mittleren Jahresgang sind schwarz (grau) schraffiert.

Stärke der Multifraktalität bei den gemischten Reihen weniger als halb so groß wie bei den Originalreihen. Diese Rest-Multifraktalität ist zu schwach, um signifikant über der scheinbaren Multifraktalität aufgrund der endlichen Reihenlängen zu liegen. Daher kann man sagen, dass praktisch die gesamte Multifraktalität der Niederschlagszeitreihen durch die Anordnung der Werte verursacht wird, obwohl diese Anordnung nach der Standard-Definition unkorreliert ist.

### II.D.3. Hydrologische Zeitreihen

Nach den Temperaturreihen mit fast universellen Langzeitkorrelationen und ohne Multifraktalität sowie den unkorrelierten Niederschlagsreihen mit nicht universeller Multifraktalität will ich mich nun den hydrologischen Zeitreihen zuwenden, d.h. den aus Pegelständen von Flüssen ermittelten (täglichen) Zeitreihen der Durchflussvolumina. Bisher werden die Eintrittswahrscheinlichkeiten extremer Hochwasser aus der Extrapolation der Durchfluss-Verteilungsfunktion zu großen Durchflüssen hin gewonnen. Diese Praxis ist fragwürdig, weil sie außer Stationarität auch die Abwesenheit von Langzeitkorrelationen voraussetzt, also die zeitliche Struktur der Hochwasserhistorie vernachlässigt und damit einen wesentlichen Teil der Informationen über das komplexe System ignoriert. Als Grundlage für die Abschätzung der Wahrscheinlichkeit von Extremereignissen (siehe Abschnitt II.E) ist eine Analyse des Korrelationsverhaltens notwendig.

Wie bereits in der Einleitung geschrieben geht die Analyse von hydrologischen Zeitreihen auf Hurst zurück [HURSTetal-51, HURSTetal-65]. Es gibt aber auch viele neuere Arbeiten zur Korrelationsanalyse [TURCOTTE&GREENE-93, GUPTAetal-94, MATSOUKASetal-00, MONTANARIetal-00, LIVINAetal-03a, LIVINAetal-03b] und multifraktalen Analyse [LOVEJOY&SCHERTZER-91, LAVALLEEetal-93, TESSIERetal-96, PANDEYetal-98] von hydrologischen Zeitreihen. Ich wende hier wieder die trendbereinigenden Verfahren an mit dem Ziel, die Fluktuationseigenschaften der Abflusszeitreihen auf denselben Zeitskalen wie beim Niederschlag zu charakterisieren und zu vergleichen.

Abbildung II.D.12 zeigt, dass der Jahresgang auch bei den Abflussreihen ein Problem darstellt. Allerdings lässt er sich besser als bei den Niederschlagsreihen durch Subtraktion des mittleren Jahresgangs (und evtl. zusätzlicher Division durch den Jahresgang der Standardabweichung) beseitigen, weil die Abflussreihen im Allgemeinen kein „Atom“ bei der Durchflussmenge 0 haben. Schon an den so bereinigten Daten erkennt man deutlich, dass die Abflussreihen starke Kurzzeitkorrelationen aufweisen, denn die schwarzen und grauen Bereiche in Abb. II.D.12, die die Abweichungen nach oben bzw. nach unten vom mittleren Jahresgang anzeigen, sind stärker ausgeprägt als bei den Temperaturreihen (vgl. Abb. II.D.1(a)) und den Niederschlagsreihen.

Wir haben lange, tägliche Abflusszeitreihen aus 42 Pegelstationen analysiert [KANTELHARDTetal-03c, KOSCIELNY-BUNDEetal-04, KANTELHARDTetal-04], von denen sich 18 in Süddeutschland (Bayern und Baden-Württemberg) befinden und 24 in Nord- und Südamerika, Asien, Afrika, Australien und Europa. Die Länge der Datensätze aus Süddeutschland beträgt zwischen 39 und 111 Jahren (Durchschnitt 77 Jahre) und die Länge der internationalen Datensätze ist 51 und 171 Jahre



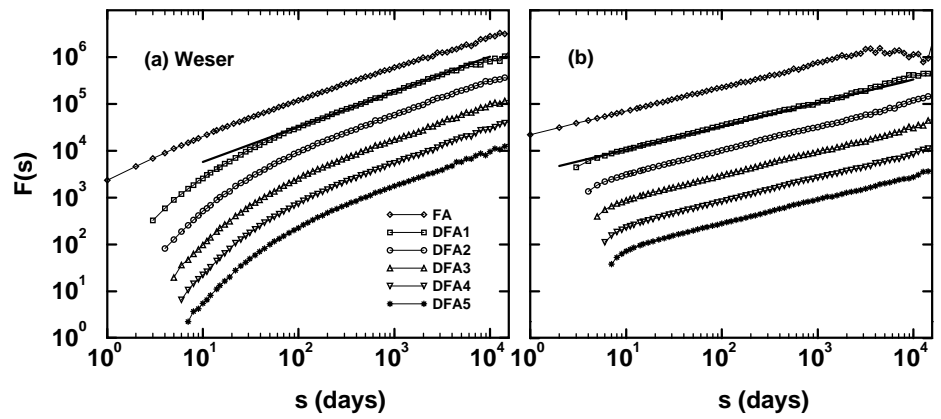
(Durchschnitt 90 Jahre), so dass sie ungefähr 14 000 bis 62 000 Datenpunkte umfassen. Die Einzugsgebietsgrößen variieren zwischen 390 km<sup>2</sup> und 3 475 000 km<sup>2</sup> mit den Mittelwerten 7 400 km<sup>2</sup> bzw. 350 000 km<sup>2</sup> für unsere beiden Datensätze.

### a) Nicht-universelle Lang- und Kurzzeitkorrelationen in Abflusszeitreihen

Abbildung II.D.13(a) zeigt exemplarisch die DFA-Ergebnisse für unsere längste Abflussreihe, die Weser am Pegel Vlotho. Man erkennt, dass die Kurven für DFA mit verschiedener Ordnung der Trendbereinigung das gleiche Verhalten aufweisen. Nach einem im Vergleich zu den Temperatur- und Niederschlagsreihen langen Bereich mit (nichtstationären) Kurzzeitkorrelationen (einige Wochen, dort  $\alpha > 1$  in Übereinstimmung mit [MATSOUKAS*etal*-00]) skalieren die Daten mit dem Fluktuationsexponenten  $\alpha \approx 0.75$  über fast drei Zeitdekaden. Dies entspricht Langzeitkorrelationen mit einem Korrelationsexponenten  $\gamma = 0.5$ . Auch bei einer weitergehenden Beseitigung des Jahresgangs durch die in Abschnitt II.D.2 erwähnten Methoden ändert sich dieses Ergebnis nicht wesentlich [LIVINA*etal*-03b]. Die Ursache der starken Kurzzeitkorrelationen ist wahrscheinlich die typische Zeitdauer für das Abfließen eines Hochwassers, die sich auch in der Ausdehnung der schwarzen Bereiche in Abb. II.D.12 zeigt. Es lässt sich kein systematischer Zusammenhang zwischen der Übergangs-Zeitskala und der Größe des Einzugsgebiets nachweisen. Möglicherweise kommt es für die Ausprägung der Kurzzeitkorrelationen mehr auf die typische Größe der Regenfelder und die Abflussgeschwindigkeit an als auf das Einzugsgebiet.

Dass das Skalenverhalten wirklich auf Korrelationen zurückgeht und nicht auf eine breite Verteilung der Abflusswerte, beweist Abb. II.D.13(b), in der die Ergebnisse für die gemischte Weser-Abflussreihe gezeigt sind, die eindeutig  $\alpha = 0.5$  zeigen. Demnach ist die Persistenz der Abflusszeitreihen auf einen „Josef-Effekt“ und nicht auf einen „Noah-Effekt“ zurückzuführen. Diese Begriffe aus den entsprechenden biblischen Geschichten hatten Mandelbrot und Wallis eingeführt [MANDELBROT&WALLIS-68, MANDELBROT-02], um von Korrelationen verursachte Effekte (Josef-Effekt wegen den sieben guten und sieben dürren Jahren) von nicht zusammenhängenden Extremereignissen (Noah-Effekt wegen der Sintflut) zu unterscheiden.

Unsere Resultate für die anderen 41 Abflussreihen sind ähnlich, d.h. sie zeigen auch deutliche Kurzzeitkorrelationen und dann ein mehr oder weniger gleichmäßiges Skalenverhalten auf großen Zeitskalen. Sie unterscheiden sich aber klar in der Ausprägung der Kurzzeitkorrelationen und im Wert des Fluktuationsexponenten  $\alpha$ , der die langreichweitigen Korrelationen charakterisiert. Das gilt auch für die eher kleinen Flüsse aus Bayern und Baden-Württemberg, die zudem weniger durch wasserbauliche Maßnahmen in ihrem Fluktuations-Verhalten gestört sind. Daraus ist zu schließen, dass die Abflusszeitreihen ein nicht-universelles Korrelationsverhalten aufweisen. Dieses Ergebnis



**Abb. II.D.13:** Ergebnisse der DFA-Untersuchung der Weser am Pegel Vlotho (Nordrhein-Westfalen, 1823-1993). (a) Die FA- und DFA1- bis DFA5-Fluktuationenfunktionen  $F(s)$  sind doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  in Tagen aufgetragen. Oberhalb von ca. 30 Tagen ist Skalenverhalten mit  $\alpha \approx 0.75$  (eingezeichnete Gerade an die DFA1-Funktion) zu erkennen. (b) Entsprechendes Ergebnis für gemischte Daten der Weser, bei denen die Korrelationen zerstört sind aber die Verteilung der Werte die gleiche ist zusammen mit einer Geraden der Steigung  $\alpha = 0.5$  (aus [KOSCIELNY-BUNDE*etal*-04]).

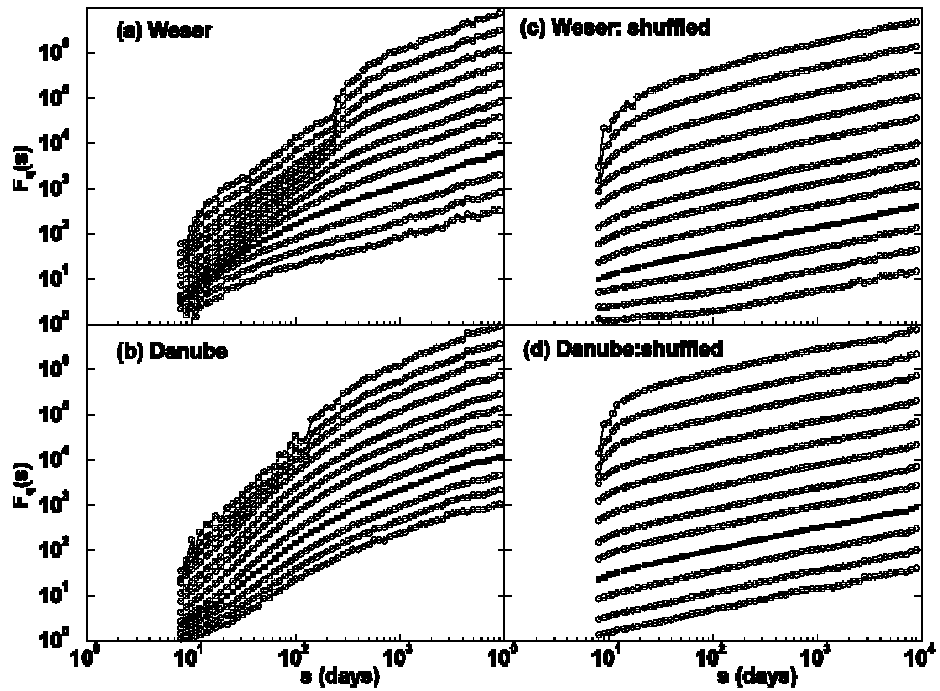
ist im Widerspruch zu [HURSTetal-65, FEDER-88, PETERS-etal-02], die von einem universellen Skalensexponenten  $\alpha \approx 0.75$  für kurze und lange Zeitskalen sprechen.

Anhand von nur drei Flüssen deutet sich darüber hinaus an, dass sowohl die Kurz- als auch die Langzeitkorrelationen bei Reihen von im Sommer zeitweise austrocknen oder im Winter zufrierenden Flüssen schwächer sind. Für eine signifikante Aussage sind hier noch weitergehende Untersuchungen an

zusätzlichen Beispielen erforderlich. Die nicht-universellen langreichweitigen Korrelationen bei den Abflussreihen stehen im Gegensatz zu den fehlenden Korrelationen bei den Niederschlagsreihen. Daher kann die Ursache der Korrelationen beim Abfluss nicht in der zeitlichen Struktur der Regenereignisse liegen, sondern man muss zu ihrer Erklärung räumliche Korrelationen der Regengebiete, sowie die Speicherwirkung vom Boden und von Wasser-Reservoirien heranziehen. Die starken Schwankungen in den  $\alpha$ -Werten spiegeln wahrscheinlich die Tatsache wider, dass es unterschiedliche Mechanismen für Wasserspeicherung und -abfluss gibt, wobei jeder Mechanismus ein anderes Skalenverhalten verursacht oder – je nach Stärke des Beitrags – den Exponenten  $\alpha$  in die entsprechende Richtung verschiebt. Beispielsweise können durch Regen oder Schnee verursachte Abflüsse unterschiedliches Skalenverhalten hervorrufen [GUPTA&DAWDY-95].

## b) Teilweise universelle Multifraktalität in Abflusszeitreihen

Wir haben auch die multifraktalen Skaleneigenschaften der 42 Abflusszeitreihen untersucht [KANTELHARDTetal-03c, KOSCIELNY-BUNDEetal-04, KANTELHARDTetal-04]. Ein Vergleich der Ergebnisse der MF-DFA (siehe Abschnitt II.A.4) unterschiedlicher Ordnung und ein Vergleich mit den Ergebnissen der WTMM-Methode (siehe Abschnitt II.A.3.f) brachte Übereinstimmung innerhalb der statistischen Fehlerbalken [KANTELHARDTetal-03c]. Abbildung II.D.14 zeigt zwei typische Beispiele für die MF-DFA4 Fluktuationsfunktionen  $F_q(s)$  für (a) die Weser und (b) die Donau. Die Ergebnisse der Standard-DFA sind mit ausgefüllten Symbolen eingezeichnet. Der schon im vorhergehenden Abschnitt diskutierte Übergang von deutlichen Kurzzeitkorrelationen zum Skalieren auf längeren Zeitskalen ist deutlich zu sehen und wird mit abnehmenden  $q$  stärker ausgeprägt. Hier soll es aber um das asymptotische Skalenverhalten von  $F_q(s)$  gehen. Man erkennt in Abb. II.D.14(a) und (b), dass die Steigungen  $h(q)$  von positiven zu negativen Momenten hin ansteigen



**Abb. II.D.14:** Multifraktale DFA4-Fluktuationsfunktionen  $F_q(s)$  für zwei typische, lange Abflusszeitreihen, (a) die Weser am Pegel Vlotho und (b) die Donau am Pegel Orsova (Rumänien). Die Kurven entsprechen  $q = -10, -6, -4, -2, -1, -0.2, 0.2, 1, 2$  (•), 4, 6, 10 (von oben nach unten) und sind zur Verdeutlichung vertikal verschoben. Rechts sind die Ergebnisse für die gemischten Reihen von (c) Weser und (d) Donau gezeigt, die unkorreliertes, nicht multifraktales Skalenverhalten aufweisen (aus [KOSCIELNY-BUNDEetal-04]).

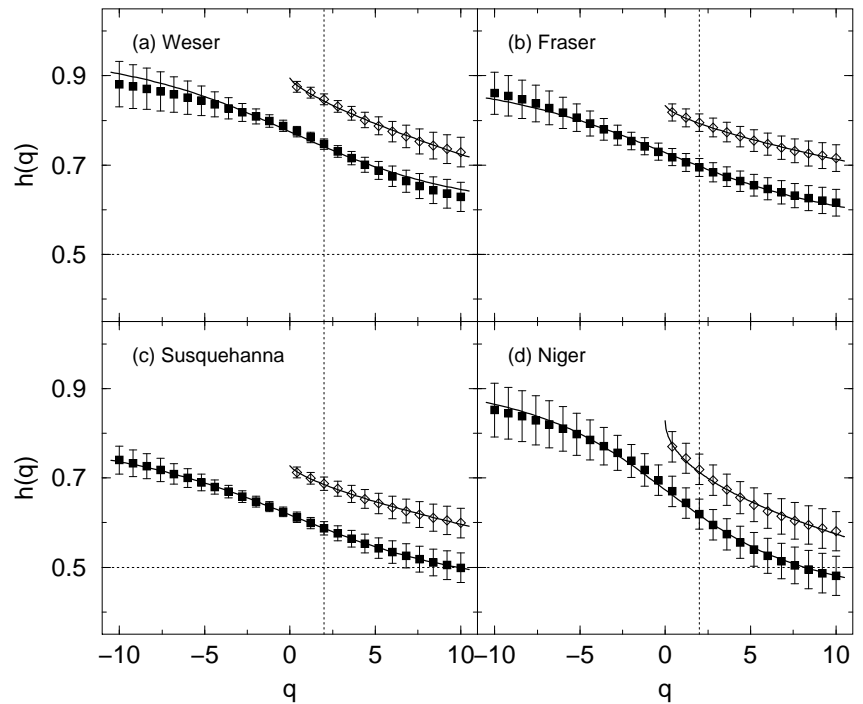
(von unten nach oben). Für die Weser gilt  $h(10) = 0.65$  und  $h(-10) = 0.90$ , was Multifraktalität anzeigt.

Die Multifraktalität wird – wie auch die Langzeitkorrelationen – nur durch die Anordnung der Werte in der Zeitreihe verursacht (Josef-Effekt) und nicht durch eine breite Verteilung mit Singularitäten (Noah-Effekt). Das erkennt man an der MF-DFA der gemischten Reihen in Abb. II.D.14(c) und (d). Nach der Subtraktion des Jahresgangs wurde die Reihenfolge der Werte durch Mischen zerstört, und es bleibt nur unkorreliertes Verhalten,  $F_q(s) \sim s^{1/2}$  für alle  $q$ . Eine beim Mischen beständige Multifraktalität entspräche einer „statistischen“ Nicht-Linearität [SIVAPALANetal-02].

Ähnliche Ergebnisse haben wir für alle 42 Abflusszeitreihen erhalten. Aus den

asymptotischen Steigungen der Kurven wie in Abb. II.D.14(a) und (b) erhalten wir die verallgemeinerten Skalenexponenten  $h(q)$ , die in Abb. II.D.15 für vier typische Beispiele gezeigt sind. Die Bereiche zur Bestimmung der Steigungen wurden für jeden Pegel individuell gewählt, so dass die Exponenten das Skalenverhalten möglichst gut beschreiben. Es zeigt sich, dass die multifraktalen Skalenexponenten  $h(q)$  für alle Abflussreihen gut durch das verallgemeinerte binomiale Multifraktalmodell, Gl. (II.D.2), beschrieben werden, was eine gewisse Universalität bedeutet. Die Stärke der Multifraktalität, ausgedrückt durch  $\Delta\alpha$ , ist nicht universell, sondern schwankt in einem breiten Bereich, der auch für die Flüsse in Bayern und Baden-Württemberg nicht wesentlich kleiner ist als für die Flüsse aus der ganzen Welt. Man kann nur einen leichten Trend hin zu geringerer Multifraktalitätsstärke bei den Flüssen mit größerem Einzugsgebiet feststellen, der möglicherweise durch verstärkte regulierende Wasserbaumaßnahmen bei den großen Flüssen verursacht ist.

Abbildung II.D.15 zeigt auch, dass sich für die positiven  $q$  das universelle Multifraktal-Modell von Lovejoy und Schertzer, Gl. (II.D.1), gut an die Daten anpassen lässt. Ein direkter Vergleich mit den Ergebnissen in der Literatur ist wieder schwierig, weil dort oft kürzere Zeitskalen betrachtet werden und keine Trendbereinigung erfolgt. Ein Vergleich mit den Ergebnissen für die Niederschlagsreihen zeigt, dass die Multifraktalität der Abflussreihen etwas stärker ist; der Mittelwert für alle 42 analysierten Abflussreihen beträgt  $\Delta\alpha = 0.49 \pm 0.16$  gegenüber  $\Delta\alpha = 0.29 \pm 0.14$  für die Niederschlagsreihen. Das bedeutet, dass auch die Multifraktalität nicht allein auf die zeitliche Struktur des

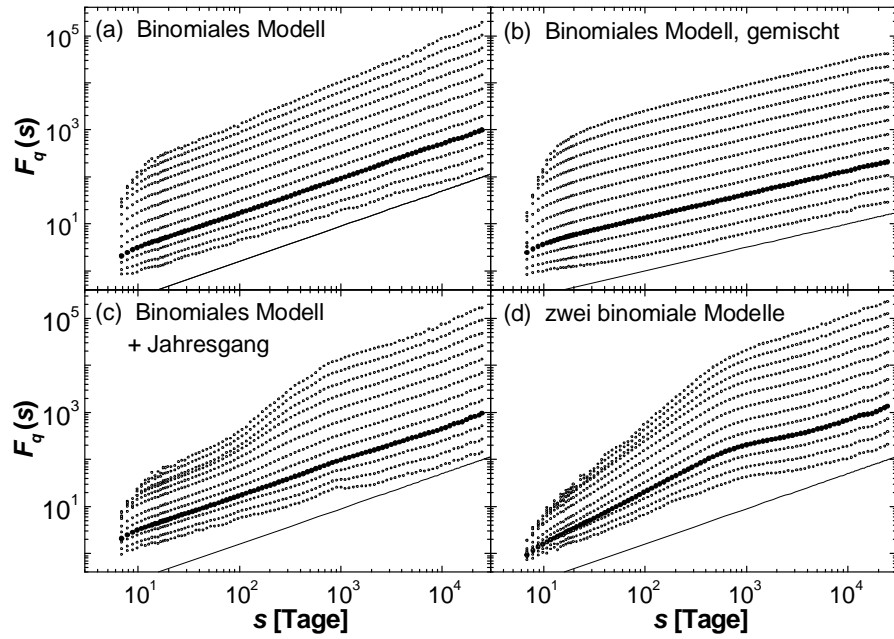


**Abb. II.D.15:** Ergebnisse der MF-DFA2 für vier repräsentative Abflussreihen (a) der Weser, (b) des Fraser (USA), (c) des Susquehanna (USA) und (d) des Niger (Mali). Die verallgemeinerten Fluktuationsexponenten  $h(q)$  wurden durch lineare Regression des asymptotischen Verlaufs der Fluktuationfunktionen  $F_q(s)$  in doppelt logarithmischen Bildern (wie Abb. II.D.14) bestimmt und sind gegen  $q$  aufgetragen (■). Die Linien durch die ausgefüllten Symbole stellen Anpassungen des verallgemeinerten binomialen Multifraktalmodells, Gl. (II.D.2), dar. In der oberen rechten Ecke jedes Teilbildes ist  $h(q)$  nochmals gezeigt (◇, um 0.1 nach oben verschoben) zusammen mit Linien, die einer Anpassung des Lovejoy-Schertzer-Multifraktalmodells, Gl. (II.D.1) entsprechen. Die gepunkteten Linien zeigen unkorreliertes Verhalten ( $h = 0.5$ ) bzw.  $q = 2$  an (aus [KANTELHARDTetal-04]).

Niederschlags zurückgeführt werden kann, sondern zumindest teilweise durch räumliche Niederschlagsmuster sowie die Speicherwirkung und die Ablauf-Charakteristik vom Boden und von Wasser-Reservoirs verursacht sein muss.

Im Zusammenhang mit den Multifraktalanalysen der Abflusszeitreihen ist ferner eine aktuelle Arbeit zur Spektralanalyse der Amplitudenreihen der Abfluss-Inkmente (vgl. Abschnitt II.A.2.e) für 30 internationale Flüsse zu nennen [LIVINA*et al.*-03a], weil sie auch die Nichtlinearitäten quan-

tifiziert. Das Ergebnis dieser Studie ist, dass die Amplitudenreihen einen wesentlich stärkeren Jahresgang aufweisen als die ursprünglichen Reihen. Darüber hinaus waren Langzeitkorrelationen ( $\beta \approx 0.49 \pm 0.11$ , entsprechend  $\alpha_{\text{ampl}} \approx 1.75 \pm 0.06$ , vgl. Abschnitt II.A.2.e) in der Amplitudenreihe zu erkennen, allerdings nur für die Zeitskalen unterhalb von etwa einem Jahr. Demnach werden Nichtlinearitäten in den Abflusszeitreihen vor allem durch den Jahresgang und durch eine starke Multifraktalität auf kurzen Zeitskalen hervorgerufen. Beide Möglichkeiten greife ich bei der Modellierung im folgenden Abschnitt wieder auf.



**Abb. II.D.16:** MF-DFA4-Fluktuationsfunktionen  $F_q(s)$  für (a) die Modelldaten des verallgemeinerten binomialen Multifraktalmodells mit den Parametern  $a$  und  $b$  für die Weser, (b) die gemischten Modelldaten, (c) die Modelldaten mit zusätzlichem Jahresgang in der Varianz und (d) die mit unterschiedlichen Generatoren auf kurzen und langen Zeitskalen erzeugten Modelldaten (siehe Text). Die Kurven entsprechen wieder  $q = -10, -6, -4, -2, -1, -0.2, 0.2, 1, 2$  (■). 4, 6, 10 (von oben nach unten) und sind zur Verdeutlichung vertikal verschoben (aus [KOSCIELNY-BUNDE*et al.*-04]).

### c) Modellierung von Abflusszeitreihen, Bedeutung des Jahresgangs

Da das verallgemeinerte binomiale Multifraktalmodell (siehe Abschnitt II.A.4.b) eine gute Beschreibung und Parametrisierung der multifraktalen Skalenexponenten  $h(q)$  für alle Abflussreihen ermöglicht, stellt sich die Frage, inwieweit dieses Modell auch zu einer Erzeugung künstlicher Abflusszeitreihen verwendet werden kann. Solche künstlichen Reihen können wesentlich länger gemacht werden als die Messdaten, und das ist auch notwendig, um Ansätze zur Extremwertstatistik und besonders zur Statistik der Wiederkehrintervalle von Extremereignissen zu testen.

Abbildung II.D.16(a) zeigt die MF-DFA2 Untersuchung einer solchen künstlichen Datenreihe, die ich mit dem verallgemeinerten binomialen Multifraktalmodell basierend auf den Parametern  $a = 0.50$  und  $b = 0.68$  für die Weser erzeugt habe. Man erkennt deutlich das multifraktale Skalenverhalten, das sich in einer  $q$ -Abhängigkeit der Steigungen  $h(q)$  äußert. Die Kurven stimmen auch gut mit den Ergebnissen für die echten Weser-Daten überein (vgl. mit Abb. II.D.14(a)), wenn man die kurzen Zeitskalen und den Übergang außer Acht lässt. Auch die gemischte Datenreihe des Modells ist unkorreliert und nicht multifraktal wie bei den echten Daten (vgl. Abb. II.D.16(b) mit Abb. II.D.14(c)). Unterhalb des Skalenübergangs zeigt das Modell aber nicht das gleiche Skalenverhalten wie die echten Daten. Um das Modell in diesem Bereich zu verbessern, kann man entweder

einen Jahresgang zu den Modelldaten hinzufügen oder für die kleinen Zeitskalen einen veränderten Multifraktalgenerator benutzen.

Um einen Jahresgang hinzuzufügen, habe ich die Modelldaten des verallgemeinerten binomialen Multifraktalmodells mit  $0.1 + \sin^2(\pi i / 365)$  multipliziert, wobei  $i$  der Index der Tage ist. Das erzeugt einen Jahresgang mit der Periode 365 Tage in der Varianz. Abbildung II.D.16(c) zeigt die MF-DFA4 Ergebnisse, die jetzt besser mit Abb. II.D.14(a) übereinstimmen. Es ist auch möglich, den Multifraktalitätsgenerator selbst auf den kurzen Zeitskalen zu verändern, indem ich dafür andere Parameter  $a'$  und  $b'$  verwende; dann müssen allerdings auch die  $a$  und  $b$  für die langen Zeitskalen leicht angepasst werden, um dort noch das korrekte Skalenverhalten zu bekommen. Für Abb. II.D.16(d) habe ich  $a' = 0.26$ ,  $b' = 0.59$  auf Zeitskalen unter 128 Tagen verwendet und  $a = 0.48$ ,  $b = 0.68$  auf Zeitskalen über 256 Tagen. Wenn man die Analyse der künstlichen Reihen, Abb. II.D.16(c,d), mit der Analyse der echten Daten, Abb. II.D.14 vergleicht, fällt auf, dass die starken Kurzzeitkorrelationen bei der Weser eher durch den Jahresgang verursacht sein könnten, während bei der Donau das Modell mit den beiden Multifraktalgeneratoren besser zu passen scheint. Diese Ergebnisse sind auch typisch für die anderen untersuchten Abflusszeitreihen. Es wäre interessant, zu überprüfen ob stärker physikalisch motivierte Modelle für Abflusszeitreihen, wie z.B. das zufällige Baumstruktur-Modell von [GUPTAetal-96], das auch räumliche Aspekte mit einschließt, mit den hier betrachteten Modellen in Verbindung gebracht werden können und so vielleicht eine physikalische Motivation für das verallgemeinerte binomiale Multifraktalmodell liefern können.

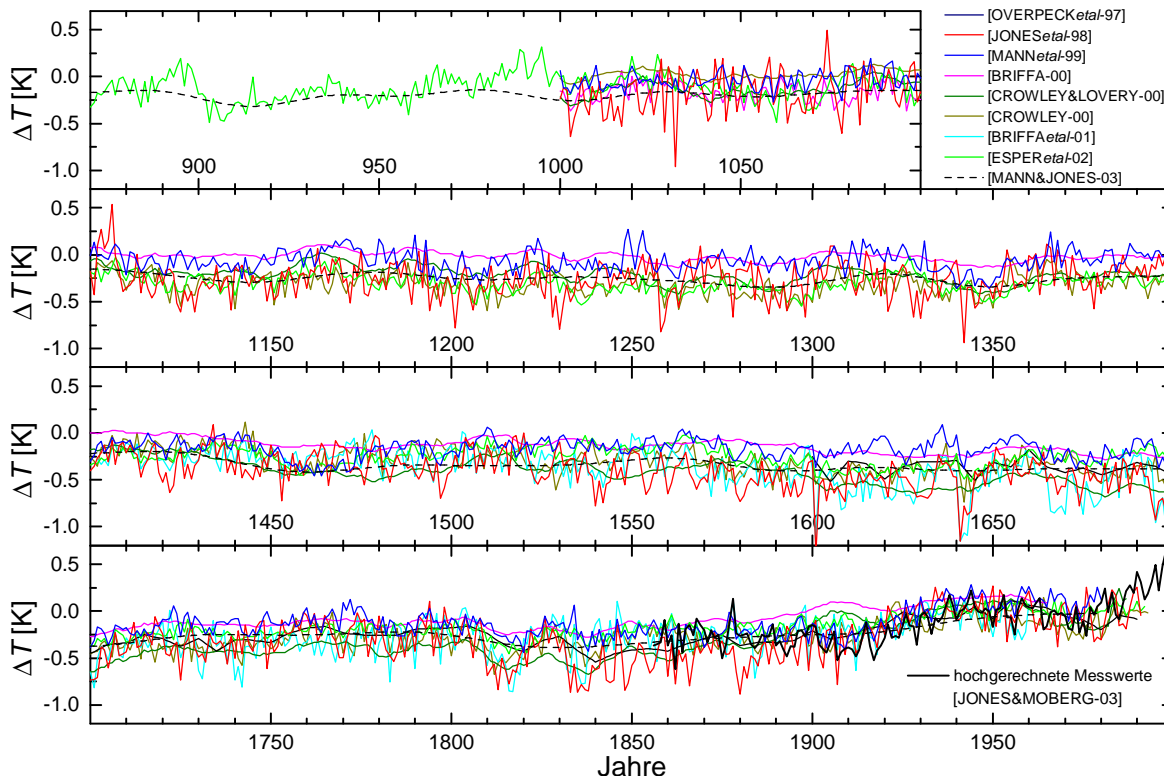
### II.D.4. Tests rekonstruierter langjähriger Datenreihen

Zum Abschluss des Kapitels über geophysikalische Zeitreihen will ich noch Reihen betrachten, die anhand von historischen Quellen oder natürlichen Profilen wie – in der Reihenfolge ihrer Wichtigkeit – Baumringen, Eisbohrkernen, Ablagerungen, wie z.B. Stalagmiten oder Sedimentablagerungen in Binnenseen, und Korallen rekonstruiert wurden. Bei der Rekonstruktion wird teilweise von der Dicke der einzelnen Schichten in den Profilen ausgegangen und teilweise von ihrer chemischen oder physikalischen Zusammensetzung. Details zu den Datensätzen und den Ergebnissen der Analysen sind in den Tabellen IV.D.1 bis IV.D.3 im Anhang zusammengefasst. Hier stellt sich die Frage, wie gut die Rekonstruktionen sind, und ob das gefundene Fluktuationsverhalten realistisch ist.

#### a) Temperaturreihen

Die meisten Arbeiten beschäftigen sich mit der Rekonstruktion von Temperaturreihen, weil diesen im Zuge der Klimadiskussion um die globale Erwärmung besondere Bedeutung zukommt (siehe auch Abschnitt II.D.1.c). In Abb. II.D.17 habe ich die meisten in den letzten Jahren veröffentlichten Temperatur-Rekonstruktionen für die nördliche Hemisphäre zusammengestellt; für die südliche Hemisphäre gibt es weniger Rekonstruktionen, und die sind auch noch unzuverlässiger. Alle Rekonstruktionen beruhen auf vielen, teilweise über tausend Quellen. Man erkennt, dass die Übereinstimmung zwischen den einzelnen Reihen auch für die nördliche Hemisphäre nicht so groß ist, wie man vielleicht erwarten würde. Darum stellt sich die Frage, nach der Zuverlässigkeit der Rekonstruktionen. Eine Möglichkeit, das unabhängig zu testen, stellt ein Vergleich der Fluktuationseigenschaften mit denen von echten Daten dar. Zwar war es nicht das primäre Ziel der Daten-Rekonstruierer, die Fluktuationen korrekt wiederzugeben, sondern ihnen geht es vor allem um Trends und Warm- oder Kaltperioden; trotzdem sollte man ein sinnvolles Fluktuationsverhalten erwarten.

Abbildung II.D.18 zeigt die DFA2-Ergebnisse für die auf die gesamte Hemisphäre hochgerechneten Temperaturmesswerte der letzten 148 Jahre [JONES&MOBERG-03] sowie für die verschiedenen Hemisphären-Temperatur-Rekonstruktionen, deren Länge von 391 [OVERPECKetal-87] bis 1781 [MANN&JONES-03] Datenpunkten (Jahren) reicht. Die bekanntesten Reihen sind von [MANNetal-99] und [JONESetal-98]. Man erkennt, dass diese – anders als die ältere Rekonstruktion von



**Abb. II.D.17:** Zusammenstellung rekonstruierter Temperaturreihen für die nördliche Hemisphäre, die in den letzten Jahren veröffentlicht wurden. Gezeigt ist die Abweichung der mittleren Jahrestemperatur vom Mittelwert der Jahre 1960 bis 1990. Die Originalveröffentlichungen sind in der Legende oben rechts zitiert; alle Datenreihen sind im Internet verfügbar. Zum Vergleich sind für die letzten 148 Jahre die auf die gesamte Hemisphäre hochgerechneten Temperaturmesswerte nach [JONES&MOBERG-03] eingezeichnet.

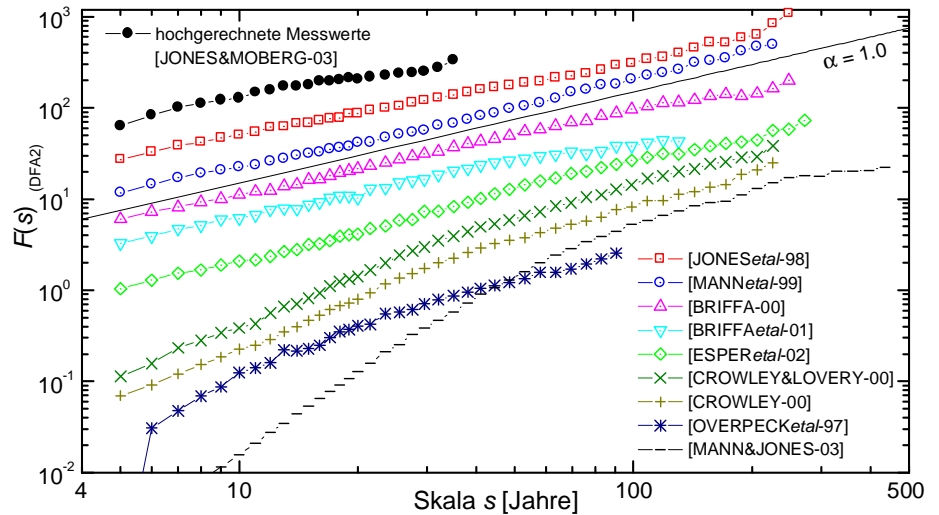
[OVERPECKetal-97] sowie die Reihen von [CROWLEY&LOWERY-00, CROWLEY-00] – keinen starken Übergang aufweisen, sondern im Wesentlichen durch einen einzigen Fluktuationsexponenten charakterisiert werden können. Dies ist in Übereinstimmung mit den DFA-Ergebnissen für die gemessenen Temperaturreihen der meisten Klimastationen (siehe Abschnitt II.D.1.a). Auch die Reihen von [BRIFFA-00] und [ESPERetal-02] lassen sich durch einen einzigen Exponenten charakterisieren, obwohl eine gewisse Krümmung hin zu kleineren  $\alpha$ -Werten auf großen Skalen bemerkbar ist. Die Reihen von [BRIFFAetal-01], [MANN&JONES-03] sowie die hochgerechneten Temperaturmessungen [JONES&MOBERG-03] zeigen auf den großen Skalen ungefähr unkorreliertes Verhalten ( $\alpha \approx 0.5$ ), was bedeutet, dass die langreichweitige Persistenz unterschätzt wird. Die numerischen Werte von  $\alpha$  liegen bei den meisten Reihen mit gutem Skalenverhalten,  $\alpha \approx 0.95$  für [MANNetal-99],  $\alpha \approx 0.90$  für [BRIFFA-00] und  $\alpha \approx 1.07$  für [ESPERetal-02], merklich über denen der Messdaten, selbst wenn man annimmt, dass die stärker korrelierten Fluktuationen der Temperaturen auf See ( $\alpha = 0.80 \pm 0.08$ , siehe Abschnitt II.D.1.c) die Hemisphären-Mittelwerte dominieren. Das bedeutet, dass die langreichweitige Persistenz etwas überschätzt wird. Die neue lange Reihe von [ESPERetal-02] ist dadurch sogar nichtstationär. Insgesamt scheint das Skalenverhalten der Reihe von [JONESetal-98],  $\alpha \approx 0.82$ , am besten den echten Temperaturreihen zu entsprechen, obwohl es eine der ältesten Reihen ist. Bei der neusten und längsten Reihe [MANN&JONES-03] fällt das Fehlen jeglicher hochfrequenten Fluktuationen auf; sie enthält nur langsame Trends (siehe auch Abb. II.D.17).

Neben den Hemisphären-Mittelwerten der Temperaturen wurden in den letzten Jahren auch viele lokale Temperaturreihen veröffentlicht, die zum Teil eine wesentlich größere Länge haben. Einige solche Reihen habe ich ausgewählt und in Abb. II.D.19 analysiert. Die längste Temperaturreihe ist aus den Sauerstoff-Isotopen-Verhältnissen im Eisbohrkern von Vostok (Sibirien) abgeleitet und reicht mehr als 400 000 Jahre in die Vergangenheit zurück [PETITetal-99]; allerdings ist hier keine

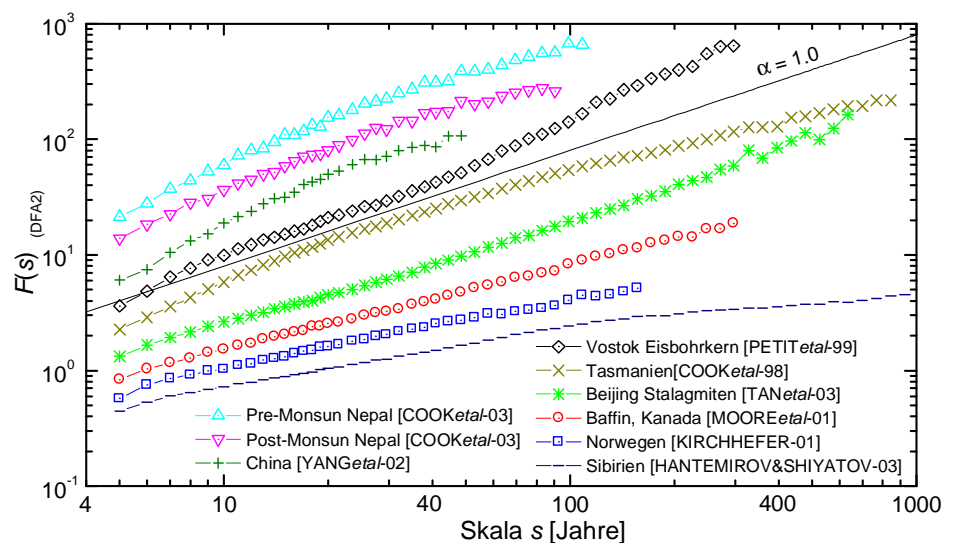
jährliche Auflösung der Daten möglich. Weil das Eis in tiefen Schichten stärker zusammengepresst wird, nimmt die Auflösung von anfangs 17 Jahren pro Datenpunkt immer weiter bis auf 631 Jahre pro Datenpunkt ab, je länger die betrachteten Abschnitte zurückliegen. Die länger zurückliegenden Werte sind schon allein deshalb schwierig auszuwerten, weil es dafür stark unterschiedliche

Datierungen von verschiedenen Autoren gibt. Mir ist aber aufgefallen, dass in einem längeren Abschnitt mittleren Alters, der immerhin 39% der gesamten Datenpunkte umfasst und von 13 300 bis 115 200 Jahren vor der Gegenwart reicht, die Auflösung ungefähr konstant bei  $78 \pm 8$  Jahren pro Datenpunkt liegt. Diesen Abschnitt habe ich mit der DFA analysiert. Das Ergebnis sind ungefähr  $1/f$ -Fluktuationen ( $\alpha \approx 1.0$ ) auf Skalen bis zu ca. 3000 Jahren, was konsistent mit den Resultaten für die oben betrachteten rekonstruierten Hemisphären-Temperaturen ist. Auf längeren Skalen tritt stark nichtstationäres Skalenverhalten mit  $\alpha \approx 1.4$  auf, was – wenn die Reihe tatsächlich die Langzeit-Fluktuationen der Temperatur korrekt wiedergibt – bedeuten würde, dass das Klimasystem auf Zeitskalen von einigen tausend Jahren nicht stationär ist.

Anders als viele rekonstruierte Hemisphären-Temperaturen und der Eisbohrkern weisen die lokalen, auf Baumringen basierenden Temperaturreihen auf langen Zeitskalen stationäres Skalenverhalten auf, obwohl sie zum Teil bis 4000 Jahre zurückreichen. Das zeigt, dass das Langzeit-Fluktuationsverhalten der lokalen Reihen besser mit dem Verhalten der Reihen von Klimastationen übereinstimmt und dass die Nichtstationarität schon auf Zeitskalen unter 2000 Jahren möglicherwei-



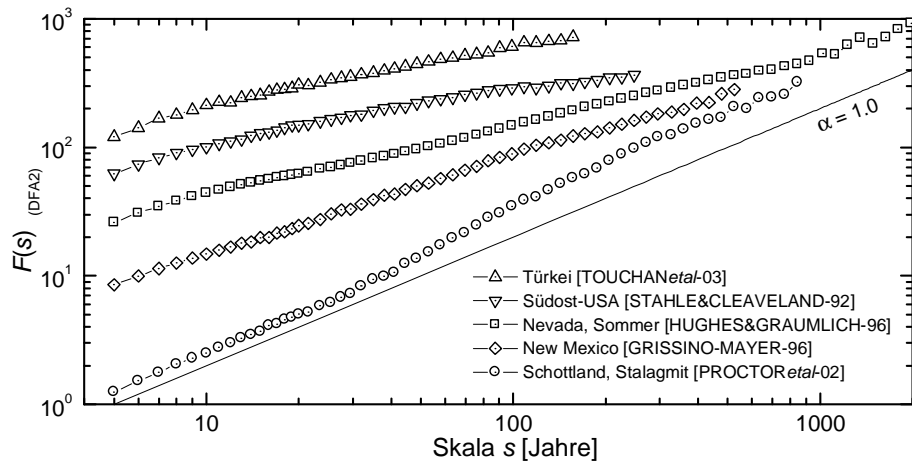
**Abb. II.D.18:** Fluktuationsanalyse von rekonstruierten Temperaturdaten der nördlichen Hemisphäre mit DFA2.  $F(s)$  ist doppelt logarithmisch gegen die Skala  $s$  in Jahren aufgetragen. Die Quellen der Datensätze sind in der Legende angegeben und die Farben der Kurven entsprechen Abb. II.D.17. Zum Vergleich ist eine Gerade mit der Steigung  $\alpha = 1$  eingezeichnet.



**Abb. II.D.19:** Fluktuationsanalyse von rekonstruierten lokalen Temperaturdaten mit DFA2 entsprechend Abb. II.D.18. Für den Vostok Eisbohrkern [PETITetal-99] und die chinesische Reihe [YANGetal-02] ist die Skala  $s$  nicht in Jahren, sondern in Einheiten von ca. 78 bzw. 10 Jahren.



se ein Artefakt der Hemisphären-Extrapolationen sein könnte. Nur die auf Stalagmiten beruhende Reihe aus Peking [TANetal-03] wird am Ende leicht nichtstationär ( $\alpha \approx 1.1$ ). Ein sehr realistisches Skalenverhalten zeigen insbesondere die Reihen zur Küstentemperatur in Norwegen ( $\alpha \approx 0.58$ , aus Baumringen,



**Abb. II.D.20:** Fluktuationsanalyse von rekonstruierten lokalen Niederschlagsdaten mit DFA2 entsprechend Abb. II.D.18.

[KIRCHHEFER-01]) und zur Sommertemperatur auf der Baffin-Insel in Kanada ( $\alpha \approx 0.725$ , aus See-Sedimenten, [MOOREetal-01]). Nach den Ergebnissen in Abschnitt II.D.1.a und b ist bei Küstenstationen (wie bei kontinentalen Stationen)  $\alpha \approx 0.65$  und bei Inselstationen ein etwas höherer Wert zu erwarten. Bei den anderen lokalen Temperaturreihen aus Baumring-Daten ist oft der Fluktuations-exponent auf den kurzen Zeitskalen zu groß ( $\alpha \approx 1.2 - 1.5$  [COOKetal-00, BAOetal-02, COOKetal-03]), was zu starke Kurzzeitkorrelationen oder fehlende Variabilität auf kurzen Zeitskalen bedeutet. Es könnte sein, dass diese überhöhten Werte auf eine künstliche Glättung der Reihen zurückzuführen sind. Die Reihe mit den meisten Datenpunkten, die Sommertemperatur in Yamal (Sibirien) [HANTEMIROV&SHIYATOV-02], fällt völlig aus dem Rahmen, weil die Werte unterhalb von ca. 100 Jahren unkorreliert sind und darüber sogar antikorreliert, also eher periodisch als persistent. Hier ist von einer ziemlich unrealistischen Rekonstruktion auszugehen.

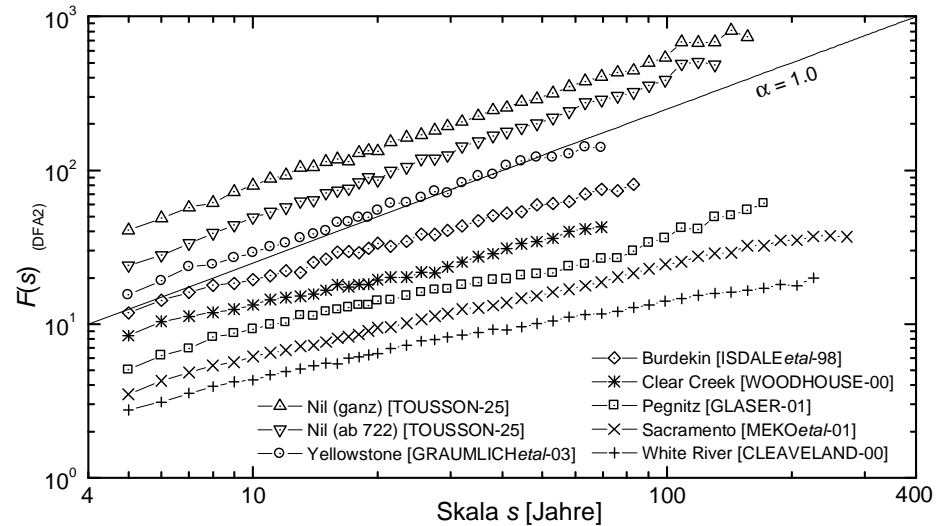
## b) Niederschlags- und Abflussreihen

Neben den Temperaturreihen wurden auch einige historische oder rekonstruierte Niederschlagsreihen und Abflussreihen veröffentlicht. Bei den Niederschlagsreihen würde man – wie bei den Messdaten in Abschnitt II.D.2 gefunden – unkorreliertes Verhalten erwarten. Die Ergebnisse meiner DFA-Untersuchung in Abb. II.D.20 zeigen, dass nur zwei der fünf betrachteten Reihen diesen Erwartungen entsprechen, nämlich die Niederschlagsreihe von Nevada [HUGHES&GRAUMLICH-96],  $\alpha \approx 0.55$ , die fast 8000 Jahre lang ist und damit die meisten Datenpunkte überhaupt hat, sowie die Frühlingsregen-Reihe aus der Türkei [TOUCHANetal-03]. Letztere erscheint zwar leicht antikorreliert ( $\alpha \approx 0.45$ ), aber das ist angesichts der Länge von nur 660 Werten noch innerhalb des statistischen Fehlers. Die Niederschlagsreihen aus New Mexico [GRISSINO-MAYER-96] und den gesamten Südwesten der USA [STAHL&CLEAVELAND-92] weisen nicht plausible Langzeitkorrelationen bzw. Antikorrelationen auf,  $\alpha \approx 0.8$  bzw.  $0.4$ . Die auf Stalagmiten-Daten beruhende Reihe aus Schottland [PROCTORetal-02], die einem Quotienten aus Temperatur und Niederschlag entsprechen soll, zeigt nichtstationäres Verhalten, also extrem starke Korrelationen, was nicht plausibel ist. Ein Vergleich mit der ebenfalls aus Stalagmiten-Daten rekonstruierten Temperaturreihe von Beijing [TANetal-03] zeigt, dass das  $1/f$ -Rauschen ( $\alpha \approx 1.0$ ) möglicherweise eher typisch für Stalagmiten ist.

Nun komme ich noch auf die historischen und rekonstruierten Datenreihen von Flüssen zu sprechen, die in Abb. II.D.21 analysiert sind. Als erstes ist hier die auf historischen Aufzeichnungen beruhende Reihe der jährlichen Wasserstandsminima des Nils am Pegel Roda bei Kairo zu nennen, die ich schon am Anfang des Kapitels erwähnt habe. Hurst bestimmte den Skalenexponent für diese Nil-Reihe zu  $\alpha \approx H = 0.77 \pm 0.06$  [HURSTetal-65, FEDER-88]. Ich erhalte mit der DFA2 einen etwas größeren Wert  $\alpha \approx 0.85$ . Kürzlich wurde berichtet [WHITCHERetal-02], dass nach den ersten



100 Jahren wahrscheinlich das Messverfahren für die Minima verändert wurde, was zu einer Verringerung des Messfehlers führte. Daher habe ich die Daten auch ohne die ersten 100 Jahre analysiert. Tatsächlich ist der Fluktuationsexponent mit  $\alpha \approx 0.93$  dann höher, wie man bei einer Reduktion der Kurzzeitfluktuationen durch Verringerung



**Abb. II.D.21:** Fluktuationsanalyse von historischen und rekonstruierten Reihen der Wasserstände bzw. Durchflussmengen verschiedener Flüsse mit DFA2 entsprechend Abb. II.D.18.

des Messrauschens erwartet. Beim Vergleich mit neuzeitlichen Pegelmessungen muss beachtet werden, dass in der historischen Nil-Reihe Minima des Wasserstands aufgezeichnet sind, während die neuzeitlichen Daten die tägliche Durchflussmenge angeben. Da Abflussreihen multifraktal sind und kleine Fluktuationen mit einem größeren Skalenexponenten beschrieben werden müssen, passt der erhöhte Wert für die historischen Nil-Daten gut zu den anderen Ergebnissen, denn die Minima sollten eher wie kleine Fluktuationen skalieren.

Eine weitere auf historischen Dokumenten basierende Reihe ist die Reihe der Hochwasser der Pegnitz [GLASER-01]. Dabei handelt es sich nicht um historische Messungen, sondern um eine Auswertung von historischen Text- und Bilddokumenten, anhand von denen die Hochwasserereignisse datiert und in drei Kategorien eingeteilt wurden. Die Analyse zeigt, dass die so gewonnenen Daten auf kurzen Zeitskalen wie weißes Rauschen skalieren; das möchte ich auf den sicher nicht optimalen und daher stark verrauschten „Messprozess“ zurückführen. Auf längeren Zeitskalen kann man Korrelationen erkennen, aber nicht zuverlässig mit einem Exponenten quantifizieren.

Von den restlichen Flüssen basieren vier Reihen auf Baumringen und eine basiert auf Korallen. Dabei zeigen die kürzeste und neuste Reihe, die des Yellowstone Rivers in Montana [GRAUMLICH-etal-03], und die australische Korallen-Reihe [ISDALEetal-98] ein Skalenverhalten mit für Flüsse realistischen Skalenexponenten  $\alpha \approx 0.85$  bzw.  $0.67$ . Für Flüsse zu schwache Persistenz weisen hingegen die beiden längsten Reihen für den Sacramento [MEKOetal-01] und den White River [CLEAVELAND-00] (beide USA) auf, die man als nahezu unkorreliert bezeichnen kann ( $\alpha \approx 0.60$  bzw.  $0.50$ ). Der Clear Creek [WOODHOUSE-00] (ebenfalls USA) schließlich ist auf kurzen Zeitskalen unkorreliert und hat erst auf längeren Zeitskalen ein realistisches Korrelationsverhalten,  $\alpha \approx 0.74$ , was auf einen stark verrauschten Messprozess hindeutet.

## II.E. Auswirkungen von Langzeitkorrelationen auf die Extremwertstatistik und die Wiederkehrintervall-Statistik

Im vorhergehenden Kapitel wurden Langzeitkorrelationen in geophysikalischen Reihen der Temperaturen, Niederschläge und Abflüsse aufgezeigt, zuletzt auch in rekonstruierten langjährigen Datenreihen und Paläodaten. Relevant sind bei diesen Daten besonders die Extremereignisse, so z.B. extreme Hitzeperioden, starke Regenstürme und Hochwasser. Die Abschätzung der Wahrscheinlichkeit für das Eintreten solcher Extremereignisse ist wichtig, um den Aufwand für notwendige Maßnahmen zur Gefahrenabwehr abzuschätzen. Die Höhe der Binnendeiche entlang von Flüssen beispielsweise wird so festgelegt, dass die Deiche mindestens einem Jahrhunderthochwasser standhalten sollen. Eine falsche Abschätzung der mittleren Wiederkehrzeit bis zum nächsten Extremereignis würde dazu führen, dass an einigen Stellen zu viel, an anderen Stellen zu wenig Vorsorgeaufwand betrieben wird. Die Vorhersage der Wiederkehrzeiten und Eintrittswahrscheinlichkeiten geht dabei meist von historischen Datenreihen aus. In der konventionellen Extremwertstatistik setzt man voraus, dass die einzelnen Extremereignisse unabhängig voneinander auftreten, d.h. unkorreliert sind. Demnach wäre das Auftreten eines Hochwassers unabhängig davon, wie lange das letzte Hochwasser zurückliegt. Bei Langzeit-korrelierten Größen liegt es nahe, dass die Extremereignisse auch irgendwie korreliert sind. Daher sollen in diesem Kapitel die Auswirkungen von Langzeitkorrelationen auf die Extremwertstatistik und insbesondere auf die Statistik der Wiederkehrintervalle zwischen aufeinander folgenden Extremereignissen theoretisch und durch Datenanalyse untersucht werden [BUNDEetal-03b, BUNDEetal-04a, BUNDEetal-04b, BUNDEetal-04c]. Um Probleme mit Jahresgängen zu umgehen, betrachte ich nur jährliche Datenreihen.

### II.E.1. Konventionelle Extremwertstatistik

Die konventionelle Extremwertstatistik beschäftigt sich mit der Verteilung von Extremereignissen in Zeitintervallen einer vorgegebenen Länge  $R$ ; einen Überblick geben [GUMBEL-58, GALAMBOSetal-94, EMBRECHTSetal-97, VONSTORCH&ZWIERS-02]. Ausgehend von der Zeitreihe  $(x_i)_{i=1}^N$  der Länge  $N$  mit einer Verteilung  $D(x)$  werden die Maxima  $M_k = \max_{i=(k-1)R+1}^{kR} x_i$  in aufeinander folgenden Segmenten der Länge  $R$  bestimmt. Asymptotisch für große Segmentlänge  $R$  erwartet man in den meisten Fällen für unkorrelierte Zeitreihen eine Fisher-Tippet-Gumbel-Verteilung der  $M_k$  [FISHER&TIPPET-28, GUMBEL-58, GALAMBOSetal-94, ANTALetal-01, VONSTORCH&ZWIERS-02],

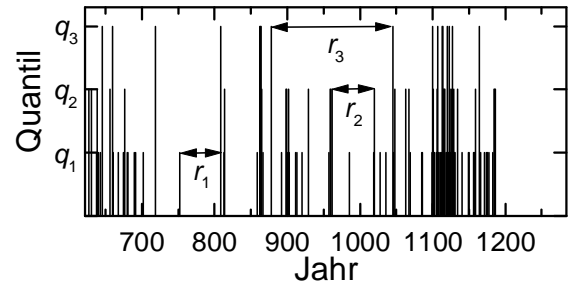
$$P(M) \sim \exp[-\exp(-M)]. \quad (\text{II.E.1})$$

Da man bei der Bestimmung der Maxima tatsächliche Werte der Zeitreihe betrachtet, ist bei dieser Art der Extremwertstatistik die Verteilung  $D(x)$  wesentlich. Wir haben mit der Fourier-Filter-Methode und dem iterativen Schreiber-Verfahren (siehe Abschnitt II.A.1.c) verschiedene unkorrelierte und langzeitkorrelierte Datenreihen erzeugt mit einer Gaußverteilung  $D(x)$  und mit einer Exponentialverteilung  $D(x)$ . Es zeigt sich, dass die Konvergenz gegen die Gumbel-Verteilung (II.E.1) für  $R \rightarrow \infty$  sehr langsam ist, wenn man von Gauß-verteilten Reihen ausgeht. Bei exponentiell verteilten Ursprungsdaten nähert sich die numerische Verteilung schneller, d.h. schon bei nicht ganz so großen  $R$ , an Gl. (II.E.1) an.

Ähnliche Auswirkungen wie eine nicht-exponentielle Werteverteilung scheinen Langzeitkorrelationen in den Daten zu haben. Ohne Langzeitkorrelationen ist die Konvergenz zu Gl. (II.E.1) schneller als mit Langzeitkorrelationen. Dabei scheint es keine abweichende universelle Form der Extremwert-Verteilung zu geben, die die Fisher-Tippet-Gumbel-Verteilung (II.E.1) ersetzen müsste, sondern nur Unterschiede in der Konvergenzgeschwindigkeit für endliche Zeitreihen. Diese Unterschiede können allerdings in der Praxis durchaus relevant sein, so dass die asymptotische Form der Verteilung (II.E.1) mit realen langzeitkorrelierten Messreihen kaum wirklich erreicht wird.

## II.E.2. Statistik der Wiederkehrintervalle

Im Gegensatz zu einer Analyse der fluktuierenden Maxima  $M_k$  in Segmenten einer festen Länge  $R$  ist es auch möglich, einen Schwellenwert für Extremereignisse vorzugeben und dann die Zeitintervalle  $r$  zwischen aufeinander folgenden Überschreitungen dieser Schwelle zu analysieren. Dadurch wird die Länge der Wiederkehrintervalle zur Zufallsvariable anstelle von Werten (Maxima) aus der ursprünglichen Zeitreihe. Der Schwellenwert wird auch als Quantil bezeichnet und darum mit  $q$  benannt, während die entsprechenden Wiederkehrintervalle  $r_q$  heißen und eine neue Reihe  $r_q(k)$ ,  $k = 1, \dots, N_q$  von  $N_q < N$  ganzzahligen Werten bilden. Abbildung II.E.1 zeigt für die historischen Wasserstandsdaten des Nils und für drei Quantilwerte  $q$  die Zeitpunkte, zu denen Messwerte über dem Quantil beobachtet wurden, und illustriert die Definition der Wiederkehrintervalle  $r_q(k)$ .



**Abb. II.E.1:** Illustration der Wiederkehrintervalle  $r_q(k)$ ,  $k = 1, \dots, N_q$  für drei Schwellen  $q_1$ ,  $q_2$  und  $q_3$  für die Wasserstände des Nils in Roda (bei Kairo, Ägypten). Für jedes Quantil ist ein Wiederkehr-Intervall durch einen Doppelpfeil gekennzeichnet (nach [BUNDEetal-04]).

### a) Mittlere Wiederkehrperiode

Für die mittlere Wiederkehrperiode, den Mittelwert aller  $r_q$ , gilt

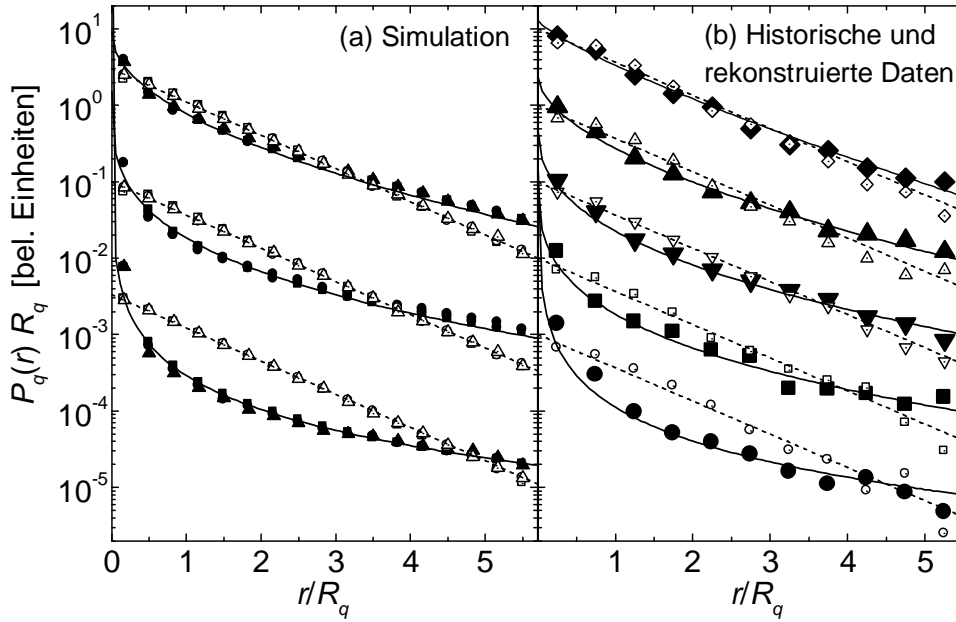
$$R_q = \langle r_q \rangle = \frac{1}{N_q} \sum_{k=1}^{N_q} r_q(k) = \frac{N'}{N_q} \rightarrow \frac{N}{N_q} \quad (N \rightarrow \infty), \quad (\text{II.E.2})$$

denn die Summe aller Wiederkehrperioden ist gerade  $N'$ , die Länge  $N$  der Reihe minus die (asymptotisch bei stationären Zeitreihen zu vernachlässigenden) Bereiche am Anfang und am Ende, in denen keine Extremwert-Überschreitungen vorkommen. Da es in dem Bereich der Länge  $N'$  genau  $N_q$  Extremwert-Überschreitungen gibt, ist  $R_q = N'/N_q$  der Kehrwert der Wahrscheinlichkeit für das Überschreiten der Schwelle  $q$ . Somit lässt sich, wenn  $D(x)$  wie oben die normierte Wahrscheinlichkeitsverteilung der Werte  $x_i$  in der ursprünglichen Reihe bezeichnet,  $R_q$  aus dem Integral über diese Verteilung berechnen,

$$R_q^{-1} = \int_q^\infty D(x) dx. \quad (\text{II.E.3})$$

Die Verteilung  $D(x)$  der Werte  $x_i$  in der ursprünglichen Reihe bestimmt zusammen mit dem Quantil  $q$  die mittlere Wiederkehrperiode  $R_q$ . Eine weiter gehende Rolle spielt die Verteilung  $D(x)$  nicht. Man kann sich leicht klar machen, dass sich weder  $R_q$  noch die Reihe der  $r_q(k)$  ändern, wenn man alle  $x$ -Werte oberhalb der Schwelle  $q$  und alle  $x$ -Werte unterhalb der Schwelle  $q$  beliebig verschiebt, solange keiner dieser Werte die Schwelle überquert. Dabei lässt sich die Verteilung  $D(x)$  beliebig modifizieren und nur der Wert von Gl. (II.E.3) bleibt erhalten. Die Ergebnisse der Statistik der Wiederkehrintervalle hängen somit nicht von  $D(x)$  ab (wie bei der konventionellen Extremwertstatistik), sondern nur noch von  $R_q$ , das sich durch die Schwelle  $q$  einstellen lässt. Daher ist mit den Wiederkehrintervallen eine eher allgemeingültige Beschreibung von Extremereignissen möglich als mit der konventionellen Extremwertstatistik.

Um eine einfache Vergleichbarkeit der Ergebnisse für verschiedene gemessene, rekonstruierte oder simulierte Zeitreihen herzustellen, werden im Folgenden normierte Reihen betrachtet, bei denen der Mittelwert subtrahiert und durch die Standardabweichung dividiert wurde. Die Quantile  $q$  werden daher immer in Einheiten der Standardabweichung angegeben.



**Abb. II.E.2:** (a) Verteilungen  $P_q(r)$  von Wiederkehrintervallen  $r$  für die Schwellen  $q = 1.5$  ( $R_q \approx 15$ ,  $\square, \blacksquare$ ),  $q = 2.0$  ( $R_q \approx 44$ ,  $\circ, \bullet$ ) und  $q = 2.5$  ( $R_q \approx 161$ ,  $\triangle, \blacktriangle$ ) für simulierte langreichweitig korrelierte Zeitreihen ( $\square, \bullet, \blacktriangle$ ) mit Korrelationsexponenten  $\gamma = 0.5$  (oben),  $\gamma = 0.3$  (Mitte) und  $\gamma = 0.1$  (unten) sowie für die entsprechenden gemischten Datensätze ( $\square, \circ, \triangle$ ). Für die Simulationen habe ich 1000 Reihen der Länge  $N = 2 \times 10^6$  für jeden Wert von  $\gamma$  mit der Fourier-Filter-Methode (siehe Abschnitt II.A.1.c) erzeugt. (b) Verteilungen  $P_q(r)$  von Wiederkehrintervallen  $r$  für die historische Zeitreihe der Nil-Wasserstände ( $\square$ ) sowie vier rekonstruierte Zeitreihen, die Abflussreihe des Sacramento ( $\diamond$ ), die Temperaturreihe der Baffin-Insel ( $\blacktriangle$ ), den Niederschlag in New Mexico ( $\blacktriangledown$ ) und die Temperatur der nördlichen Hemisphäre ( $\bullet$ ). Die Ergebnisse der entsprechenden gemischten Reihen sind mit offenen Symbolen gezeigt. Die Ergebnisse für die Daten habe ich über alle Quantile  $q$  mit  $R_q > 3$  und mit  $N_q > 50$  Wiederkehrintervallen gemittelt. Die durchgezogenen Kurven in (a) und (b) entsprechen der gestreckten Exponential-Verteilung (II.E.5) mit den jeweiligen  $\gamma$ -Werten, und die gestrichelten Kurven der Poisson-Verteilung (II.E.4). Nur für die Reihen mit  $\gamma = 0.1$  (nahe an der Grenze zur Nichtstationarität) habe ich den  $a_r$ -Parameter in (a) und (b) leicht gegenüber dem aus Gl. (II.E.7) folgenden Wert erhöht, sonst sind alle Kurven parameterfrei (nach [BUNDEetal-04c]).

## b) Verteilung der Wiederkehrintervalle

Neben dem von  $q$  abhängigen Mittelwert  $R_q$  der Wiederkehrintervall-Reihe  $r_q(k)$ ,  $k = 1, \dots, N_q$  interessiert man sich für die Verteilung der  $r_q$ -Werte. Für unkorrelierte Zeitreihen sind alle Extremereignisse statistisch unabhängig voneinander. Die Wiederkehrintervalle  $r_q$  sind dann Zeitabstände zwischen zufälligen unabhängigen Ereignissen, und deren Verteilung ist bekanntermaßen die Poisson-Verteilung mit Erwartungswert  $R_q$ ,

$$P_q(r) = \frac{1}{R_q} \exp\left[-r/R_q\right]. \quad (\text{II.E.4})$$

Die Form dieser Verteilung hängt nicht von  $q$  ab;  $R_q P_q(r)$  ist stets eine einfache Exponentialfunktion von  $r/R_q$ . Abbildung II.E.2(a) bestätigt Gl. (II.E.4) für unkorrelierte (gemischte) simulierte Datenreihen für verschiedene Werte von  $q$ .

Für langreichweitig korrelierte Daten wird die Verteilung der Wiederkehrintervalle verändert. Durch die Korrelationen kommen besonders kurze und besonders lange Wiederkehrintervalle  $r$  häufiger vor, und die Wahrscheinlichkeit mittlerer Werte von  $r$  ist etwas verringert. Abbildung II.E.2(a) zeigt, dass trotzdem noch das Skalenverhalten gilt, d.h.  $R_q P_q(r)$  hängt weiterhin nur von  $r/R_q$  ab, aber nicht mehr als einfache Exponentialfunktion. Vielmehr finden wir für langreichweitig korrelierte Daten, die durch den Korrelationsexponenten  $\gamma$  (bzw. den Fluktuationsexponenten  $\alpha = 1 - \gamma/2$ ) charakterisiert werden, eine gestreckte Exponentialfunktion,

$$P_q(r) = \frac{a_\gamma}{R_q} \exp\left[-b_\gamma \left(r/R_q\right)^\gamma\right], \quad (\text{II.E.5})$$

bei der  $\gamma$  der Korrelationsexponent ist und die Parameter  $a_\gamma$  und  $b_\gamma$  nicht vom Quantil  $q$  abhängen. Es ist wichtig, dass durch diese Unabhängigkeit von  $q$  auch die gestreckte Exponentialverteilung (II.E.5) das Skalenverhalten mit  $R_q$  zeigt, weil nur durch die Mittelung über viele Quantile  $q$  bei den realen Datensätzen eine hinreichend gute Statistik zu bekommen ist. Außerdem kann man so vom Verhalten für kleine Schwellen  $q$  und kurze mittlere Wiederkehrintervalle  $R_q$  auf das Verhalten für große Schwellen und lange mittlere Wiederkehrintervalle schließen.

Die  $\gamma$ -Abhängigkeit der beiden Parameter  $a_\gamma$  und  $b_\gamma$  in Gl. (II.E.5) ist durch die beiden Normierungsbedingungen

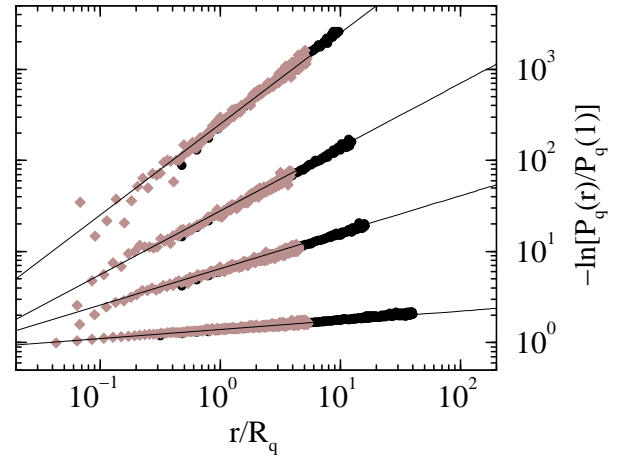
$$1 = \langle 1 \rangle = \int_0^\infty P_q(r) dr \quad \text{und} \quad 1 = \langle r/R_q \rangle = \int_0^\infty (r/R_q) P_q(r) dr \quad (\text{II.E.6})$$

festgelegt, so dass es keine freien Parameter gibt. Diese Normierungsbedingungen lassen sich mit Gl. (II.E.5) unter Verwendung von Gamma-Funktionen nach  $a_\gamma$  und  $b_\gamma$  auflösen, was auf

$$a_\gamma = \frac{\Gamma(2/\gamma)}{\gamma \Gamma^2(1+1/\gamma)} \quad \text{und} \quad b_\gamma = \left[ a_\gamma \Gamma(1+1/\gamma) \right]^\gamma \quad (\text{II.E.7})$$

führt. Es ist anzumerken, dass Gl. (II.E.5) für die Abstände  $r$  zwischen den Nulldurchgängen eines langzeitkorrelierten Prozesses früher von Mathematikern als Abschätzung hergeleitet wurde [NEWELL&ROSENBLATT-62]. Hier beschränken wir uns nicht auf das Quantil  $q = 0$  und betrachten die Abstände zwischen Quantil-Überschreitungen, wobei auch direkt aufeinander folgende Überschreitungen mitzählen, nicht nur Durchgänge durch die Schwelle. Wir finden, dass die gestreckte Exponentialverteilung viel allgemeiner gilt, als in der mathematischen Arbeit gezeigt. Zur Überprüfung, dass der Exponent in der gestreckten Exponentialfunktion (II.E.5) wirklich der Korrelationsexponent  $\gamma$  sein muss, ist für simulierte Daten mit unterschiedlichem  $\gamma$  in Abb. II.E.3 der negative Logarithmus von  $P_q(r)/P_q(1)$  doppelt logarithmisch gegen  $r/R_q$  aufgetragen. Man erkennt deutlich, dass die Kurven die entsprechende Steigung  $\gamma$  haben.

Weiterhin haben wir auch alle langjährigen historischen und rekonstruierten Datensätze untersucht, für die ich schon in Kapitel II.D.4 mit der DFA-Methode die Langzeitkorrelationen bestimmt habe. Die Ergebnisse für fünf repräsentative Reihen mit einem gleichmäßigen Skalenverhalten ohne Übergänge ist in Abb. II.E.2(b) gezeigt. Es handelt sich um die historische Reihe der jährlichen Wasserstände des Nils am Pegel Roda bei Kairo (Dauer 663 Jahre,  $\alpha = 0.85$ , siehe Abb. II.D.21,  $\gamma = 0.3$ , [TOUSSON-25, POPPER-51, BERAN-94]) sowie um vier rekonstruierte Datenreihen: die Abflussreihe des Sacramento River in Kalifornien, USA (aus Baumringen, Dauer 1109 Jahre,  $\alpha = 0.6$ , siehe Abb. II.D.21,  $\gamma = 0.8$ , [MEKOetal-01]), die Reihe der Sommertemperaturen auf der Baffin-Insel im Norden Kanadas (aus Seesedimenten, 1241 Jahre,  $\alpha = 0.725$ , siehe Abb. II.D.19,  $\gamma = 0.55$ , [MOOREetal-01]), den Jahresniederschlag in New Mexiko, USA (aus Baumringen, 2131 Jahre,  $\alpha = 0.8$ , siehe Abb. II.D.20,  $\gamma = 0.4$ , [GRISSINO-MAYER-96]) und schließlich die Temperatur der nördlichen Hemisphäre in der Rekonstruktion nach Mann et al. (981 Jahre,  $\alpha = 0.95$ , siehe Abb. II.D.18,  $\gamma =$



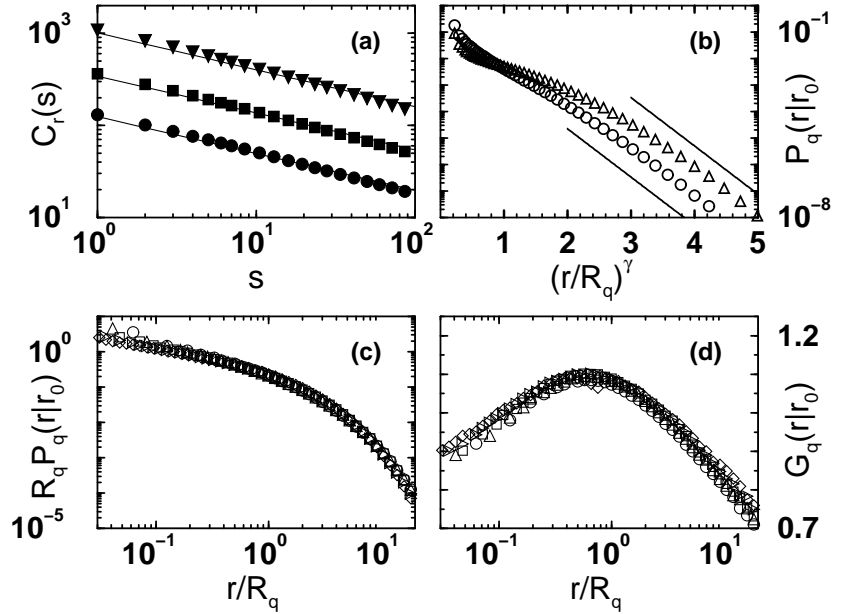
**Abb. II.E.3:** Doppelt logarithmische Darstellung von  $-\ln[P_q(r)/P_q(1)]$  in Abhängigkeit von  $r/R_q$  für simulierte Daten mit  $\gamma = \infty, 0.7, 0.4$  und  $0.1$  (von oben nach unten) sowie  $q = 1.5$  (schwarz) und  $2.5$  (grau). Die Geraden haben die Steigung  $\gamma$  für die korrelierten Daten und 1 für die unkorrelierten Daten ( $\gamma = \infty$ ) (nach [BUNDEetal-04b]).

0.1, [MANNetal-99]). Bei der Auswertung der realen Datenreihen ist zur Verbesserung der Statistik eine Mittelung der Resultate für viele verschiedene Quantile  $q$  nötig. Dennoch fluktuieren die Werte von  $R_q P_q(r)$  insbesondere bei großen  $r$ -Werten, die seltener vorkommen. Man kann trotzdem gut die Übereinstimmung mit den durchgezogenen theoretischen Verteilungsfunktionen (II.E.5) erkennen, in die – außer dem  $\gamma$  bzw.  $\alpha$  aus den DFA-Untersuchungen – kein freier Parameter eingeht. Ähnliche Fluktuationen treten auch für die Ergebnisse der gemischten Datensätze auf, bei denen die Korrelationen zerstört sind und die daher der Poisson-Verteilung (II.E.4) folgen.

### c) Korrelationen der Wiederkehrintervalle und bedingte Wiederkehrintervall-Verteilungen

Die bisher betrachtete Verteilung der Wiederkehrintervalle zeigt zwar, dass sehr kurze und sehr lange Intervalle bei korrelierten Daten häufiger werden, aber sie macht keine Aussagen über die Anordnung der Wiederkehrintervalle, d.h. über die Korrelationseigenschaften der Reihe  $r_q(k)$ ,  $k = 1, \dots, N_q$ . Um diese Eigenschaften zu untersuchen, berechnen wir die Autokorrelationsfunktion  $C_r(s) \equiv \langle r_q(k) r_q(k+s) \rangle - R_q^2$ , denn die Reihe enthält keine Trends oder Nichtstationaritäten und der Mittelwert  $R_q$  ist wohl definiert. Abbildung II.E.4(a) zeigt repräsentative Ergebnisse für  $\gamma = 0.4$  und drei Quantile  $q$ . In der doppelt logarithmischen Darstellung sind die drei Kurven nahezu parallele Geraden mit der Steigung  $-\gamma = -0.4$ . Dies Ergebnis bedeutet, dass die Reihen der Wiederkehrintervalle langreichweitig korreliert sind mit demselben Korrelationsexponenten  $\gamma$  wie die ursprüngliche Reihe. Dementsprechend sind lange und kurze Wiederkehrintervalle nicht zufällig und unabhängig angeordnet, sondern man kann erwarten, dass Bereiche (Cluster) aus ähnlichen Werten vorliegen, so dass nach einem langen Wiederkehrintervall eher ein langes und nach einem kurzen eher ein kurzes folgen sollte.

Die Konsequenz der Korrelationen in den Wiederkehrintervall-Reihen ist, dass die Wahrscheinlichkeit, einen bestimmten Wert von  $r$  zu finden, von der Vorgeschichte und insbesondere von dem direkt vorhergehenden Wert in der Reihe abhängt, der hier mit  $r_0$  bezeichnet werden soll. Dies sollte bei Vorhersagen und Risikoabschätzungen beachtet werden. Abbildung II.E.4(b) zeigt die (bedingte) Verteilungsfunktion  $P_q(r|r_0)$ , dass ein Wiederkehrintervall  $r$  auftritt unter der Bedingung, dass das vorhergehende Wiederkehrintervall  $r_0$  war. Man erkennt, dass sich die Verläufe für ver-



**Abb. II.E.4:** (a) Autokorrelationsfunktion  $C_r(s)$  der Wiederkehrintervalle für die Schwellen  $q = 1.5$  (●),  $1.75$  (◐) und  $2.0$  (▼) für simulierte, langreichweitig korrelierte Reihen mit  $\gamma = 0.4$ ; die Geraden haben die Steigung  $-0.4$ . (b) Bedingte Verteilungsfunktionen  $P_q(r|r_0)$  gegen  $(r/R_q)^\gamma$  aufgetragen für simulierte Reihen mit  $\gamma = 0.4$  und  $q = 2.0$  für die beiden Bedingungen  $r_0 = R_q/8$  (◐) und  $r_0 = 8R_q$  (Δ). Die Geraden markieren den asymptotischen, gestreckt exponentiellen Abfall. (c)  $R_q P_q(r|r_0)$  aufgetragen gegen  $r/R_q$  für simulierte Reihen mit  $\gamma = 0.4$  und  $r_0 = R_q/2$  bei  $q = 1.0, 1.5, 2.0$  und  $2.5$  (verschiedene Symbole). (d)  $G_q(r|r_0) \equiv P_q(r|r_0)/P_q(r)$  aufgetragen gegen  $r/R_q$  für dieselben Parameter wie in (c); für unkorrelierte Daten ist  $G_q(r|r_0) = 1$ . Die Ergebnisse basieren auf der gleichen Statistik wie bei Abb. II.E.2(a) (aus [BUNDEetal-04c]).

schiedene Werte von  $r_0$  deutlich aufgrund der Korrelationen unterscheiden und dass beide keine echten gestreckten Exponentialfunktionen mehr sind. Asymptotisch nähern sich beide Kurven allerdings gestreckten Exponentialfunktionen mit unterschiedlichen Vorfaktoren an.

Abbildung II.E.4(c) zeigt, dass die bedingte Wiederkehrintervall-Verteilungsfunktion  $P_q(r|r_0)$  auch das schon bei  $P_q(r)$  angesprochene Skalenverhalten für verschiedene Quantile  $q$  aufweist, d.h. dass  $R_q P_q(r|r_0)$  nur von  $r/R_q$  und  $r_0/R_q$  abhängt, aber nicht von  $r$ ,  $r_0$  und  $q$  getrennt. Die Kurven für verschiedene Quantile  $q$  fallen wieder übereinander. Um die Abweichungen der bedingten Verteilungsfunktion  $P_q(r|r_0)$  von der unbedingten Verteilungsfunktion  $P_q(r)$  zu zeigen, die nach Gl. (II.E.5) eine gestreckte Exponentialfunktion ist, haben wir in Abb. II.E.4(d) den Quotienten  $G_q(r|r_0) \equiv P_q(r|r_0)/P_q(r)$  gegen  $r/R_q$  aufgetragen. Als Konsequenz der Korrelationen ist die Wahrscheinlichkeit für  $r \approx r_0 = R_q/2$  deutlich erhöht, während stark von  $r_0$  abweichende Werte von  $r$  weniger häufig vorkommen. Für unkorrelierte Daten ist  $G_q(r|r_0) = 1$ . Man beachte aber die gedehnte, nicht logarithmische vertikale Achse in Abb. II.E.4(d); die Veränderungen in der bedingten Wahrscheinlichkeit sind deutlich schwächer als der gestreckt exponentielle Abfall, der hier herausdividiert wurde.

### d) Bedingte Wiederkehrperiode und bedingte verbleibende Wiederkehrzeit

Die bedingte Verteilungsfunktion  $P_q(r|r_0)$  ist eine grundlegende Größe, aus der relevante Größen für eine Risikoabschätzung abgeleitet werden können. So ist beispielsweise das erste Moment von  $P_q(r|r_0)$  die bedingte Wiederkehrperiode,

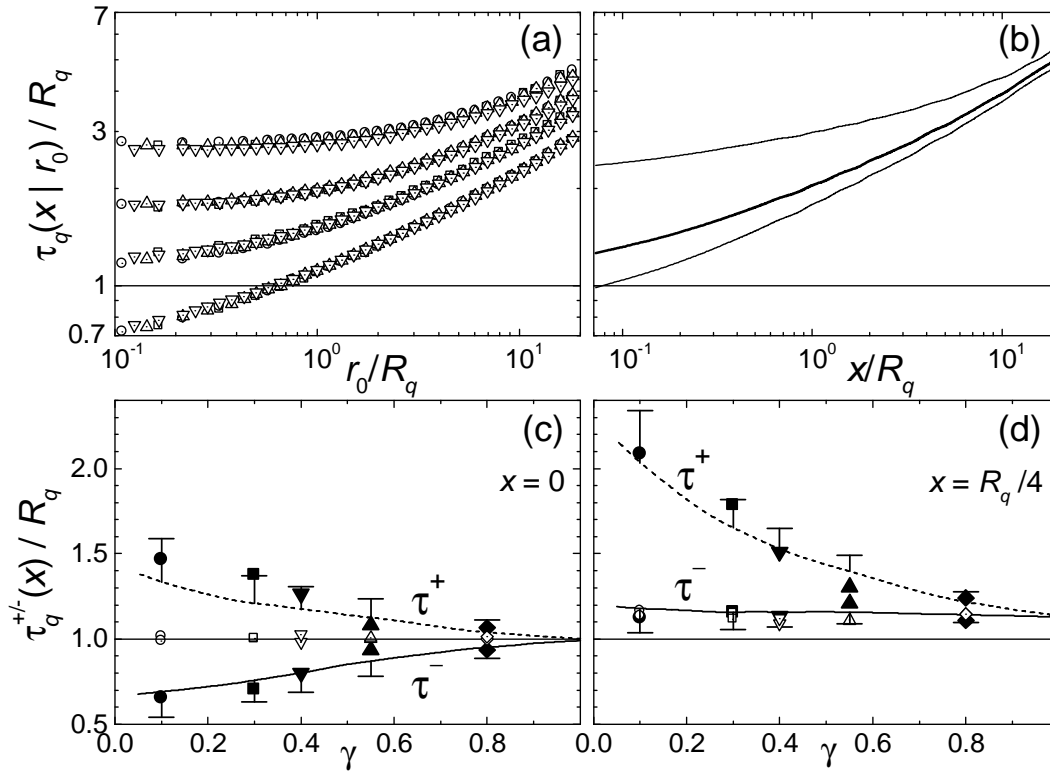
$$R_q(r_0) = \int_0^\infty r P_q(r | r_0) dr, \quad (\text{II.E.8})$$

d.h. die erwartete mittlere Wiederkehrzeit bis zum nächsten Extremereignis unter der Voraussetzung, dass zwischen den beiden letzten Extremereignissen die Zeit  $r_0$  vergangen war. Eine allgemeinere Größe, die auch eine seit dem letzten Extremereignis schon vergangene Zeit  $x$  berücksichtigt, ist die mittlere bedingte verbleibende Wiederkehrzeit

$$\tau_q(x | r_0) = \int_x^\infty (r - x) P_q(r | r_0) dr / \int_x^\infty P_q(r | r_0) dr, \quad (\text{II.E.9})$$

wobei  $\tau_q(0|r_0) \equiv R_q(r_0)$ . Hier werden drei Extremereignisse betrachtet: Zwischen den ersten beiden ist die Zeit  $r_0$  vergangen und das dritte Extremereignis ist innerhalb der Zeit  $x$  nach dem zweiten noch nicht eingetreten.  $\tau_q(x|r_0)$  ist dann die mittlere noch ausstehende Wartezeit bis zum dritten Extremereignis. Für unkorrelierte Zeitreihen gilt  $\tau_q(x|r_0) = R_q$ , außer dass durch die Diskretheit der  $r$ -Werte und eine möglicherweise nicht exakte Bestimmung von  $R_q$  bei endlichen Reihen  $\tau_q(x|r_0) \gtrsim R_q$  auftreten kann für  $x > 0$ , siehe auch [SORNETTE&KNOPOFF-97]. Bei unkorrelierten Reihen gilt aber stets  $\tau_q(0|r_0) \equiv R_q(r_0) = R_q$ . Aufgrund des Skalenverhaltens von  $P_q(r|r_0)$  erwarten wir, dass  $\tau_q(x|r_0)/R_q$  nur eine Funktion von  $x/R_q$  und  $r_0/R_q$  ist und nicht von  $x$ ,  $r_0$  und  $q$  getrennt abhängt. Das wird in Abb. II.E.5(a) bestätigt, denn dort liegen die Kurven für verschiedene Quantile  $q$  wieder aufeinander. Weiterhin zeigt die Abbildung für  $x = 0$  (unterste Kurve) die Auswirkungen der Korrelationen: Große Wiederkehrintervalle werden im Mittel von großen Intervallen gefolgt und kleine von kleinen, so dass  $\tau_q(0|r_0)/R_q \equiv R_q(r_0)/R_q$  deutlich  $>$  bzw.  $< 1$  ist  $r_0/R_q >$  bzw.  $< 1$ .

Es ist auf den ersten Blick überraschend, dass mit zunehmender Zeit  $x$  seit dem letzten Extremereignis die mittlere bedingte verbleibende Zeit  $\tau_q(x|r_0)$  bis zum nächsten Extremereignis ansteigt, d.h. dass die Kurven für zunehmende  $x$  in Abb. II.E.5(a) immer höher liegen. Wenn schon das Vierfache der Wiederkehrperiode seit dem letzten Extremereignis vergangen ist ( $x = 4R_q$ , oberste Kurve in Abb. II.E.5(a)), liegt die mittlere verbleibende Wiederkehrzeit bei etwa 3 bis  $5R_q$  je nach dem Wert des vorhergehenden Wiederkehrintervalls  $r_0$ . Das bedeutet, dass eine lange Pause seit dem letzten Extremereignis das nächste Extremereignis nicht mehr, sondern weniger wahrscheinlich macht. Aufgrund der Langzeitkorrelationen in den betrachteten Zeitreihen ist ein langes Ausbleiben des



**Abb. II.E.5:** (a) Mittlere bedingte verbleibende Wiederkehrzeit  $\tau_q(x|r_0)$  bis zum nächsten Extremereignis (in Einheiten von  $R_q$ ) für vier Quantile ( $q = 1.0, 1.25, 1.5$  und  $1.75$ ; verschiedene Symbole) und vier Werte der vergangenen Zeit  $x$  seit dem letzten Extremereignis ( $x = 0, 0.25R_q, R_q$  und  $4R_q$ ; von unten nach oben) für simulierte, langreichweitig korrelierte Reihen mit  $\gamma = 0.4$ . (b) Mittlere bedingte verbleibende Wiederkehrzeit  $\tau_q(x|r_0)$  in Abhängigkeit von  $x/R_q$  für  $r_0 = R_q/8$  (untere Kurve),  $r_0 = 8R_q$  (obere Kurve) und gemittelt über alle Werte von  $r_0$  (unbedingte verbleibende Wiederkehrzeit; mittlere Kurve). Die Simulationen in (a,b) beruhen auf derselben Statistik wie die für Abb. II.E.2(a) und II.E.4. (c,d) Bedingte verbleibende Wiederkehrzeiten  $\tau_q^-(x)/R_q$  und  $\tau_q^+(x)/R_q$  gemittelt über alle  $r_0$  unter- bzw. oberhalb des Medians der Wiederkehrintervalle in Abhängigkeit vom Korrelationsexponenten  $\gamma$  für (c)  $x = 0$  und (d)  $x = R_q/4$ . Die Symbole gelten für die schon in Abb. II.E.2(b) betrachteten historischen und rekonstruierten Datensätze (ausgefüllte Symbole) bzw. die entsprechenden gemischten Datensätze (offene Symbole). Die Linien geben Simulationsergebnisse an für  $\tau_q^-(x)/R_q$  (durchgezogen) und für  $\tau_q^+(x)/R_q$  (gestrichelt), wobei 1000 Reihen der Länge  $N = 1250$  (entsprechend der mittleren Länge der realen Datensätze) betrachtet wurden; die nur nach außen gezeichneten Fehlerbalken habe ich aus den Schwankungen der Simulationsergebnisse zwischen den einzelnen Reihen ermittelt (aus [BUNDEetal-04c]).

nächsten Extremereignisses ein Hinweis auf persistent niedrigere Messwerte, und dadurch erhöht sich die mittlere Wartezeit bis zum nächsten Extremereignis. Somit widerspricht der Effekt nur auf den ersten Blick der Intuition. Für Erdbeben müssen diese Ergebnisse aber nicht gelten, denn erstens sind Langzeitkorrelationen dabei (außer für Nachbeben) umstritten und zweitens bauen sich an Verwerfungen mit der Zeit immer stärkere Spannungen auf, so dass die Wahrscheinlichkeit für ein Beben mit der seit dem letzten Beben vergangenen Zeit anstieg.

Abbildung II.E.5(b) zeigt – für zwei feste Werte von  $r_0$  sowie gemittelt über alle  $r_0$  – die mittlere bedingte verbleibende Wiederkehrzeit  $\tau_q(x|r_0)$  in Abhängigkeit von der schon abgelaufenen Wartezeit  $x$ . Man erkennt deutlich den Anstieg mit zunehmendem  $x$  aber auch klare Unterschiede zwischen den beiden Kurven für verschiedene  $r_0$ . Insbesondere bei kleinen Werten von  $x$  reicht es offensichtlich nicht, bei Risikoabschätzungen nur die *unbedingte* verbleibende Wiederkehrzeit, d.h.  $\tau_q(x|r_0)$  gemittelt über alle  $r_0$  (mittlere Kurve in Abb. II.E.5(b)), zu betrachten, wie es [SORNETTE&KNOPOFF-97, CORRAL-03] für Erdbeben-Verteilungen tun, siehe auch [CORRAL-04]. Die Langzeitkorrelationen in den hier schwerpunktmäßig betrachteten hydro-klimatischen Zeitreihen führen zu deutlichen Unterschieden in Abhängigkeit vom vorhergehenden Wiederkehrintervall  $r_0$ , so dass



man die  $r_0$ -Abhängigkeit in  $P_q(r|r_0)$  mit berücksichtigen muss und nicht von der unbedingten Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P_q(r)$  ausgehen kann.

Um diese Abhängigkeit vom vorhergehenden Wiederkehrintervall  $r_0$ , die eine direkte Auswirkung der Langzeitkorrelationen ist, auch bei den vergleichsweise kurzen historischen und rekonstruierten Jahresdaten-Reihen beobachten zu können, ist es notwendig, die Statistik durch eine Mittelung über viele Quantile  $q$  und mehrere Wiederkehrintervalle  $r_0$  zu verbessern. Wir haben dazu den Median der Wiederkehrintervalle,  $r_q^*$ , bestimmt, und die mittlere bedingte verbleibende Wiederkehrzeit  $\tau_q(x|r_0)$  für alle  $r_0 \leq r_q^*$  bzw.  $r_0 > r_q^*$  gemittelt, um so die Größen  $\tau_q^-(x)$  bzw.  $\tau_q^+(x)$  zu erhalten; die Bedingung wird hier durch  $-$  und  $+$  ausgedrückt. Anschließend haben wir  $\tau_q^-(x)/R_q$  und  $\tau_q^+(x)/R_q$  über alle Quantile  $q$  gemittelt, für die  $R_q > 3$  Jahre und  $N_q > 50$  ist (wie für Abb. II.E.2(b)). Abbildung II.E.5(c) zeigt  $R_q^-/R_q \equiv \tau_q^-(0)/R_q$  und  $R_q^+/R_q \equiv \tau_q^+(0)/R_q$  für simulierte Datensätze (Linien) und für die fünf repräsentativen historischen und rekonstruierten Jahresdaten-Reihen (ausgefüllte Symbole), die wir schon für Abb. II.E.2(b) analysiert hatten, in Abhängigkeit vom Korrelationsexponenten  $\gamma$ . Der Unterschied zwischen  $\tau_q^-(0)$  und  $\tau_q^+(0)$  wird mit abnehmendem Wert von  $\gamma$  größer, steigt also mit zunehmendem Langzeitgedächtnis in den Zeitreihen an. Die Ergebnisse für die historischen und rekonstruierten Zeitreihen sind innerhalb der Fehlerbalken in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen für die simulierten Daten. Man erkennt deutlich, dass  $\tau_q^-(0)/R_q$  und  $\tau_q^+(0)/R_q$  verschieden sind, d.h. dass die mittlere verbleibende Wiederkehrzeit signifikant vom vorhergehenden Wiederkehrintervall  $r_0$  abhängt. Um eine Vergleichbarkeit herzustellen und auch die Fehlerbalken korrekt abzuschätzen, habe ich bei den Simulationen Reihen der Länge  $N = 1250$  Jahre verwendet, was der durchschnittlichen Länge der betrachteten historischen und rekonstruierten Zeitreihen entspricht. Die (der Übersichtlichkeit wegen nur in einer Richtung gezeichneten) Fehlerbalken geben die Schwankungen der Simulationsergebnisse für solche vergleichsweise kurzen Reihen an.

Abbildung II.E.5(d) zeigt entsprechende Ergebnisse wie Abb. II.E.5(c) für  $x = R_q/4$  statt  $x = 0$ , also für eine schon abgelaufene Wartezeit von einem Viertel der Wiederkehrperiode. Die  $\gamma$ -Abhängigkeit ist nicht nur quantitativ, sondern auch qualitativ verschieden. Während  $\tau_q^-(0)/R_q$  mit ansteigendem  $\gamma$  ansteigt, ist  $\tau_q^-(R_q/4)/R_q$  praktisch unabhängig vom Korrelationsexponenten. Wiederum ist die Übereinstimmung zwischen den simulierten und den realen Daten zufrieden stellend. Um die Signifikanz der Ergebnisse zu zeigen, haben wir auch die entsprechenden gemischten Datenreihen analysiert, siehe offene Symbole und gestrichelte Linien in Abb. II.E.5(c,d). Wir erhalten  $\tau_q^-(0)/R_q \approx \tau_q^+(0)/R_q \approx 1$  und  $\tau_q^-(R_q/4)/R_q \approx \tau_q^+(R_q/4)/R_q \approx 1.1$ , was anzeigt, dass keiner der Effekte für unkorrelierte Daten auftritt, außer einer leichten Erhöhung von  $\tau_q^-(x)/R_q$  und  $\tau_q^+(x)/R_q$  für  $x > 0$ . Für die gemischten Daten, deren Wiederkehrintervalle der Poisson-Verteilung folgen (siehe Abb. II.E.2) sind  $\tau_q^-(x)/R_q$  und  $\tau_q^+(x)/R_q$  nicht unterschiedlich und hängen nicht von  $\gamma$  ab.

Zusammenfassend ist zu sagen, dass die langreichweitigen Korrelationen in hydroklimatischen Zeitreihen einen natürlichen Mechanismus für eine Häufung von Extremereignissen in manchen Abschnitten und das seltene Vorkommen solcher Ereignisse in anderen Abschnitten darstellen. Diese Häufungen führen dazu, dass besonders kurze und besonders lange Wiederkehrintervalle vermehrt vorkommen und dass die Reihe der Wiederkehrintervalle langzeitkorreliert ist. Diese Korrelationen verändern die mittlere bedingte Wiederkehrperiode und die bedingte verbleibende Wiederkehrzeit, so dass sie bei der Abschätzung der Wahrscheinlichkeit für Extremereignisse berücksichtigt werden müssen.

## II.F. Langzeitkorrelationen in der Festkörperphysik

### II.F.1. Speckle-Fluktuationen

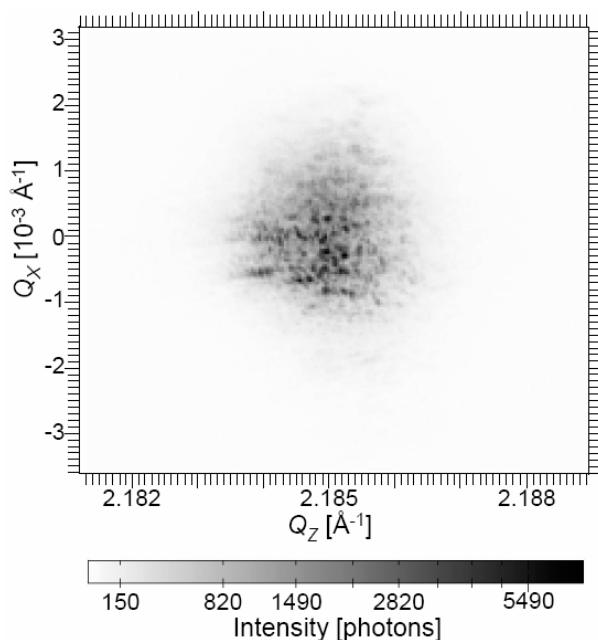
Korrelations- und Fluktuationsanalysen sind auch in der experimentellen Festkörperphysik von Bedeutung, weil sie bei der Interpretation räumlich und zeitlich fluktuierender Messdaten helfen. In diesem Abschnitt geht es um die zeitlichen Fluktuationen von an ungeordneten Proben gestreutem Röntgenlicht. Die Variationen werden dabei von einer Strukturveränderung durch Diffusion verursacht, die man auf diese Art in einem großen Volumenbereich und über lange Zeit beobachten, und deren Mechanismus man so klären kann.

#### a) Messung von Speckle-Mustern mit Synchrotron-Röntgenstrahlung

In einem klassischen Streuexperiment wird Röntgenstrahlung mit einer kleinen Kohärenzlänge am Kristallgitter eines Festkörpers gestreut, so dass man aus den entstehenden Beugungsmustern die Gitterkonstante und möglicherweise auch die Struktur der Einheitszelle bestimmen kann. Diese Experimente zeigen immer die durchschnittlichen Eigenschaften der Probe an, weil die in verschiedenen Regionen der Probe gestreuten Photonen nicht interferieren, sondern sich inkohärent überlagern. Unordnung in der Probe führt zu einer Verbreiterung der Beugungsreflexe, so dass im Extremfall breite Beugungsringe auftreten, wenn viele kleine Kristallite mit Defekten in einer polykristallinen oder pulverförmigen Probe bestrahlt werden. Aus der Breite der Beugungsreflexe im Raum der Streuvektoren  $Q$  lässt sich ein Maß für die Stärke der Unordnung gewinnen, d.h. beispielsweise die Größe geordneter Domänen in der Probe abschätzen. Mikroskopische Veränderungen in der Probe führen nicht zu einer Veränderung des Beugungsbilds.

Bei der Benutzung eines Elektronen-Synchrotrons als Strahlungsquelle ist es hingegen möglich, eine Probe mit kohärenter Röntgenstrahlung zu untersuchen. Dazu muss die verwendete Strahlung durch den Einsatz eines guten Monochromators und einer kleinen Blende sowohl in longitudinaler als auch in transversaler Richtung hinreichend kohärent gemacht werden, so dass alle im bestrahlten Probenteil gestreuten Photonen interferieren können. Man braucht Synchrotronstrahlung, weil sonst die Intensität und die transversale Kohärenz nicht ausreichen. Bei kohärenter Bestrahlung steht das Beugungsbild in direkter Beziehung zu den Positionen der einzelnen Atome im bestrahlten Probenteil, und jede Art von Unordnung in der Probe führt zu einer fluktuierenden „Feinstruktur“ der Beugungsreflexe, einem so genannten „Speckle“- (Flecken-) Muster im Raum der Streuvektoren (Wellenzahlen)  $Q$  wie in Abb. II.F.1 gezeigt. Ein solches statisches Speckle-Muster wurde erstmals vor gut 10 Jahren an  $\text{Cu}_3\text{Au}$  aufgenommen [SUTTON*et al.*-91].

Zusätzlich muss das Speckle-Muster nicht statisch sein, denn schon eine minimale zeitliche Veränderung der Struktur der Probe, z.B. durch die Diffusionsbewegung einzelner Atome, führt



**Abb. II.F.1:** Statisches „Speckle“- (Flecken-) Muster im Raum der Streuvektoren  $Q$  für kohärente Röntgenstreuung an einer  $\text{Co}_{60}\text{Ga}_{40}$ -Probe bei Raumtemperatur. Der (100)-Überstrukturreflex zeigt das Muster aufgrund ungeordneter Antiphasen-Domänen (aus [STADLER*et al.*-04]).

auch zu einer zeitlichen Veränderung des Beugungsbilds. Wenn man die zeitlichen Korrelationen im Speckle-Muster analysiert, kann man etwas über die Dynamik in der Probe, d.h. über den Mechanismus der Veränderungen, lernen. Normalerweise geschieht das durch eine Berechnung der Autokorrelationsfunktion  $C(s)$  der Intensität in einzelnen Flecken („Speckles“) des Beugungsbilds. Das ist das Prinzip der Röntgen-Photonen Korrelations-Spektroskopie (X-ray Photon Correlation Spectroscopy, XPCS), die hauptsächlich zur Untersuchung weicher [THURN-ALBERECHT*etal*-96, LUMMA*etal*-01, MADSEN*etal*-03, THURN-ALBERECHT*etal*-03] aber auch harter [BRAUER*etal*-95, MALIK*etal*-98, FRANCOUA*etal*-03] kondensierter Materie angewandt wird. Im Gegensatz zur Elektronenmikroskopie ist es dabei möglich, ein vergleichsweise großes Probenvolumen und auch sehr langsam ablaufende Prozesse zu untersuchen.

Die Analyse der Speckle-Intensitäten mit der Autokorrelationsfunktion hat den Nachteil, dass sie stationäre Datenreihen erfordert und bei langsamer Dynamik unzuverlässig wird, weil man das asymptotische Verhalten der Autokorrelationsfunktion schlecht erkennen kann. Nichtstationär werden lange Aufzeichnungen der Speckle-Intensität schon dadurch, dass die Intensität der Synchrotron-Strahlungsquelle ungefähr exponentiell mit der Zeit abnimmt, weil die im Speicherring umlaufenden Elektronen mit der Zeit durch Stöße mit Restgasatomen oder andere Prozesse verloren gehen. Daher haben wir erstmals die trendbereinigende Fluktuationsanalyse (DFA) zur Analyse der Röntgen-Photonen Korrelations-Spektroskopie eingesetzt [STADLER*etal*-03, STADLER*etal*-04].

### b) Erklärung für das Korrelationsverhalten der Speckle-Intensitäten

Zusätzlich erlaubt die DFA auch ein besseres, eher mikroskopisches Verständnis der Fluktuationen in den Zeitreihen der Speckle-Intensitäten, während die Autokorrelationsfunktion nur ein Abklingen der Korrelationen zeigt, ohne dass die genaue Ursache dafür deutlich wird. Zur Herleitung unserer Erklärung [STADLER*etal*-04] nehmen wir eine auf den Skalen der Wellenlänge der Röntgenstrahlung im Wesentlichen kontinuierliche Diffusion der Atome im Festkörper an. Diese führt auch zu einer diffusionsartigen Veränderung der Phasen der interferierenden Wellen, denn eine kleine Veränderung der Atom-Positionen führt zu einer kleinen Phasenverschiebung der gestreuten Wellen. „Diffusionsartige Veränderung“ bedeutet hier, dass die Phase zum Zeitpunkt  $t$  der Phase zum Zeitpunkt  $t - \Delta t$  entspricht plus einer kleinen Veränderung. Mit den Phasen der interferierenden Wellen verändern sich auch die Phasen der Streuamplituden in dieser Weise. Demnach wechseln die Speckle-Intensitäten – die Quadrate der Streuamplituden für verschiedene Streuvektoren  $Q$  – nicht vollkommen zufällig, sondern das Muster zum Zeitpunkt  $t$  ist immer das Muster zum vorherigen Zeitpunkt  $t - \Delta t$  plus einer kleinen Veränderung. Dies entspricht für kurze Zeiten einem Diffusionsprozess für die Speckle-Intensitäten und bei der DFA einem Fluktuationsexponenten  $\alpha = 1.5$ .

Natürlich kann dieses nichtstationäre Verhalten nicht für große Zeiten gelten, denn sonst müssten die Speckle-Intensitäten wie  $\sqrt{t}$  divergieren. Der Grund für den Übergang zu unkorreliertem Verhalten auf größeren Zeitskalen ist, dass zwar die Phasen eine diffusionsartige Veränderung auf großen Zeitskalen zeigen, aber nicht die Intensitäten. Eine Veränderung der Phase um  $2\pi$  führt wieder zu derselben Speckle-Intensität; das entspricht einer Verschiebung des streuenden Atoms in der Größenordnung der verwendeten Röntgen-Wellenlänge. Für eine realistische Beschreibung der Intensitäten kann man die Reihe  $I_0 \sin^2[\varphi(t)]$  betrachten, wobei  $\varphi(t)$  die diffusionsartig fluktuierende Phase ist. Zur Motivation dieser Formel kann eine Interferenz der gestreuten Welle der Phase  $\varphi(t)$  mit einer in einem anderen Teil des Probenvolumens gestreuten Welle mit konstanter Phase angenommen werden; um von der Streuamplitude zur Intensität zu kommen, muss quadriert werden.

Abbildung II.F.2 zeigt die Ergebnisse der DFA3 für verschiedene künstliche Datenreihen. Wie erwartet erhält man für unkorrelierte Zahlen  $\Delta\varphi_t$  die Steigung  $\alpha = 0.5$  und für einen auf diesen Zahlen als Inkrementen basierenden Diffusionsprozess  $\varphi(t) = \varphi(t - \Delta t) + \Delta\varphi_t$  den Wert  $\alpha = 1.5$ . Die Reihe der simulierten Intensitäten  $I_0 \sin^2[\varphi(t)]$  zeigt dann einen Übergang von  $\alpha = 1.5$  auf kleinen und

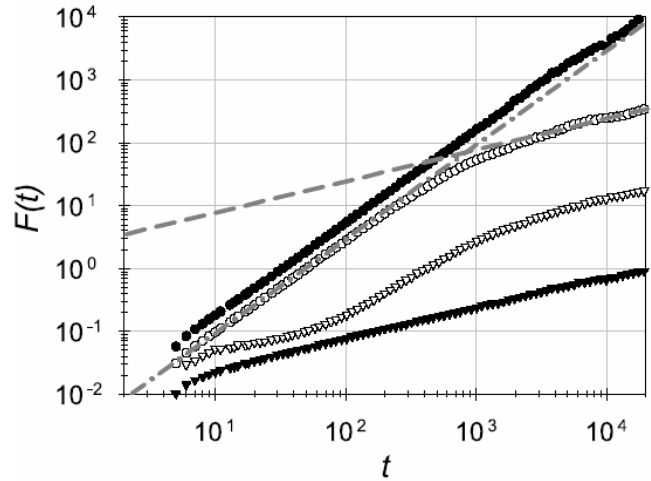
mittleren Zeitskalen zu  $\alpha = 0.5$  auf großen Zeitskalen, weil das Verhalten unkorreliert wird, sobald die Variationen der Phasen  $2\pi$  übersteigen. Zusätzlich ist in den Messdaten noch unkorreliertes Verhalten auf kleinen Zeitskalen zu beobachten, das seine Ursache in der statistisch schwankenden Anzahl der in jeder Zeiteinheit registrierten Photonen hat (Photonenrauschen) sowie im Rauschen des Röntgen-Bildsensors. Wenn man zu  $I_0 \sin^2[\varphi(t)]$  noch ein unkorreliertes Rauschen addiert, erhält man eine Kurve mit zwei Übergängen (siehe Abb. II.F.2).

Hier ist anzumerken, dass der erste Übergang vom Photonenrauschen zu dem diffusiven Verhalten mit der Autokorrelationsanalyse nicht zu sehen ist, denn die Autokorrelationsfunktion zeigt keine unkorrelierten Fluktuationen. Man kann damit nur das Verschwinden des diffusiven Prozesses auf großen Zeitskalen sehen, das sich in einem ungefähr exponentiellen Abfall von  $C(s)$  äußert wie bei Kurzzeitkorrelationen. So wird bei Untersuchungen der Autokorrelationsfunktion durch Anpassung einer Exponentialfunktion eine Abklingkonstante bestimmt. Diese gibt an, wann die Phasen der Streuamplituden sich gegeneinander im Mittel um etwa  $2\pi$  verschoben haben, d.h. wann sich die relativen Positionen der Atome typischerweise in der Größenordnung der verwendeten Wellenlänge gegeneinander verschoben haben. Die Abklingkonstante, die der zweiten Übergangszeit bei der DFA entspricht, ist daher ein Maß für die Geschwindigkeit der diffusiven Strukturveränderungen in der Probe. Je schneller die Dynamik ist, desto schneller wird eine Phasenverschiebung von  $2\pi$  überschritten. Zur Aufklärung der Dynamik in der Probe interessiert man sich besonders für die Temperaturabhängigkeit der Übergangszeit und für ihre Abhängigkeit vom Streuvektor  $Q$ .

Ein Problem ergibt sich, wenn die Übergangszeit sehr lang ist und Nichtstationaritäten die Bestimmung stören. Mit einer DFA-Untersuchung der Speckle-Fluktuationen kann die Übergangszeit dann zuverlässiger bestimmt werden. Unter Umständen kann die Geschwindigkeit der diffusiven Strukturveränderungen in der Probe auch aus dem *ersten* Übergang vom Photonenrauschen zum diffusiven Verhalten abgeschätzt werden, wenn man annimmt, dass das Photonenrauschen konstant ist oder die bestimmten Werte entsprechend den Veränderungen beim Photonenrauschen korrigiert. Der Grund ist, dass beide Übergangszeiten von der Geschwindigkeit der diffusiven Strukturveränderungen in der Probe festgelegt werden und – konstantes Photonenrauschen vorausgesetzt – proportional zueinander sind. Bei der Bestimmung aus dem ersten statt dem zweiten Übergang kann die Messzeit deutlich reduziert werden, bzw. es können bei gleicher Synchrotron-Strahlzeit mehr unterschiedliche Messungen durchgeführt oder mehr Proben gemessen werden.

### c) Dynamik von Antiphasendomänen in Einphasen-Legierungen

In diesem Abschnitt betrachte ich die Anwendung der Röntgen-Photonen Korrelations-Spektroskopie (XPCS) mit DFA-Auswertung zur Klärung der Dynamik von Antiphasendomänen in der einphasigen Legierung  $\text{Co}_{60}\text{Ga}_{40}$  [STADLERetal-04]. Diese Legierung hat kubisch-raumzentrierte Kristallstruktur, wobei die eine Atomart die Ecken der Einheitszelle, die andere das Zentrum besetzt.



**Abb. II.F.2:** Illustration des Korrelationsverhaltens von Speckle-Fluktuationen. Für unkorrelierte Zahlen  $\Delta\varphi_t$  ( $\blacktriangledown$ ), einen damit gebildeten Diffusionsprozess  $\varphi(t) = \varphi(t - \Delta t) + \Delta\varphi_t$  ( $\bullet$ ), eine entsprechende kohärente Intensität  $I_0 \sin^2[\varphi(t)]$  ( $\circ$ ) und eine solche Intensität mit zusätzlichem Photonenrauschen ( $\triangledown$ ) sind die DFA3-Fluktuationsfunktionen gezeigt; die Kurven sind vertikal verschoben. Die gestrichelte Gerade hat die Steigung  $\alpha = 0.5$ , die strichpunktier-te Gerade  $\alpha = 1.5$  (aus [STADLERetal-04]).

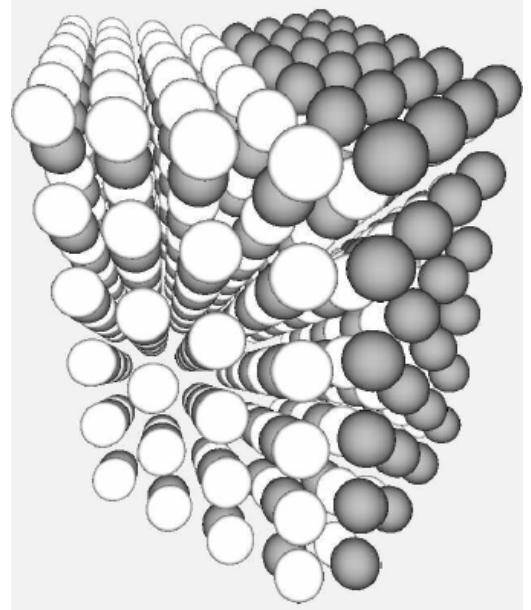
Allerdings bildet sich diese Überstruktur nicht gleichmäßig über den ganzen Kristall aus, sondern es kommt zu Phasendomänen in denen die Positionen von Co und Ga gegeneinander vertauscht sind (siehe Abb. II.F.3). Diese so genannten Antiphasendomänen sind – neben einigen thermisch induzierten Leerstellen – die Hauptquelle für Unordnung im Kristall.

Im Röntgen-Beugungsbild wäre der (100)-Reflex (der Überstrukturreflex) unterdrückt, wenn die Struktur aus nur einer Atomart bestünde, nicht aber der (110)-Reflex (der Fundamentalreflex). Daher können sich im Überstrukturreflex nur die Unordnung und die Dynamik der Antiphasendomänen widerspiegeln. Die Idee ist, durch einen Vergleich der Speckle-Fluktuationen von Überstruktur- und Fundamentalreflex die Eigenschaften der Antiphasendomänen-Dynamik zu extrahieren. Zunächst kann man aus der Breite des Überstrukturreflexes (siehe Abb. II.F.1) die mittlere Größe der Antiphasendomänen zu  $400 \pm 15$  nm abschätzen. Die Messungen erfolgten bei verschiedenen Temperaturen bis  $785^\circ\text{C}$  und mit bis zu 4096 Einzelaufnahmen der Speckle-Muster im Rhythmus von wenigen Sekunden. Jede Einzelaufnahme („frame“) umfasst typischerweise  $300 \times 300$  Punkte, wovon die Punkte im Bereich des Speckle-Musters ausgewählt wurden und jeweils Zeitreihen mit bis zu 4096 Werten lieferten. Die Quadrate der Fluktuationsfunktionen wurden für alle Reihen jeweils einer Temperatur gemittelt.

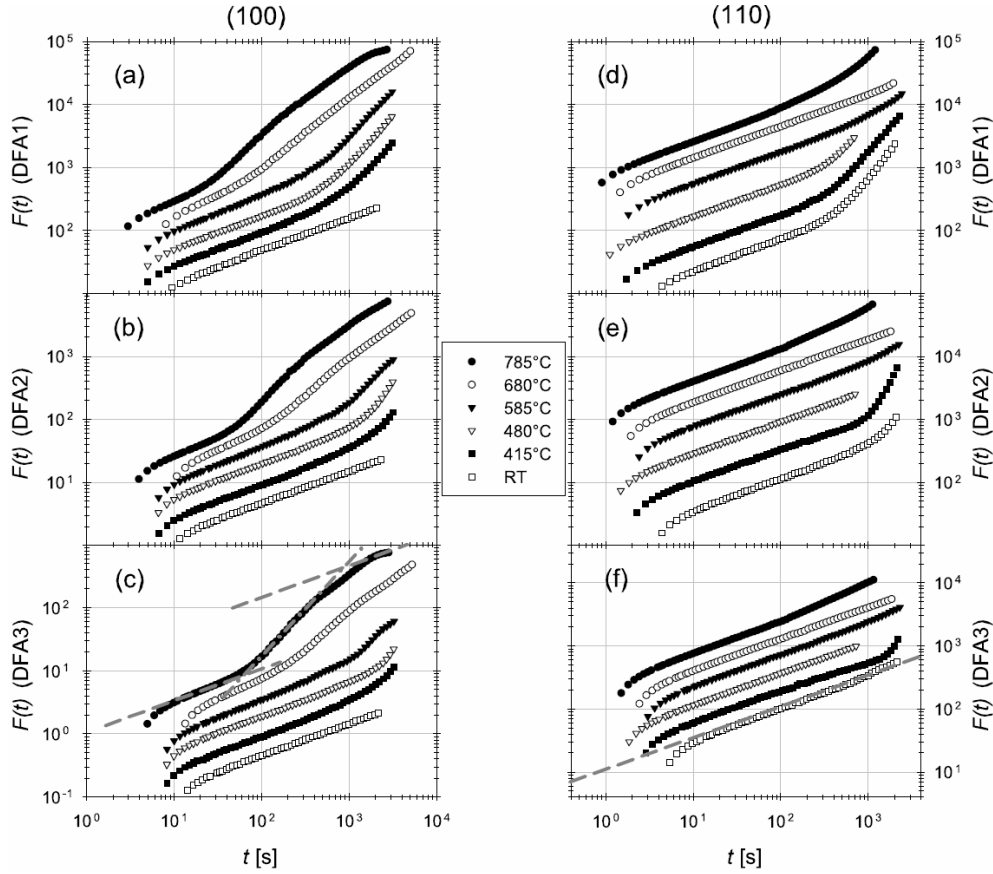
Abbildung II.F.4 zeigt die Ergebnisse der DFA1 bis DFA3 für die Speckle-Fluktuationen des Überstrukturreflexes (links) und des Fundamentalreflexes (rechts). Man erkennt, dass es keine qualitativen Unterschiede zwischen den Ergebnissen für die verschiedenen DFA-Ordnungen gibt, so dass Trends insbesondere beim Überstrukturreflex keine große Rolle spielen. Die Ergebnisse für den Fundamentalreflex zeigen merkbare Auswirkungen von Trends auf großen Zeitskalen, die aber bei DFA3 (Abb. II.F.4(f)) fast vollständig beseitigt sind. Es bleibt dann nur eine Steigung  $\alpha = 0.5$ , also unkorreliertes Verhalten übrig, das durch das Photonenrauschen verursacht ist. Dieses Ergebnis verdeutlicht die Notwendigkeit einer Verwendung von trendbereinigenden Analysemethoden. Der Fundamentalreflex zeigt im betrachteten Temperaturbereich keine Dynamik. Auch der Überstrukturreflex ist bei Raumtemperatur (RT) statisch und zeigt nur Photonenrauschen ohne Dynamik. Darum konnten in Abb. II.F.1 alle Einzelbilder summiert werden.

Anders sieht es für den Überstrukturreflex bei höheren Temperaturen aus. Man erkennt einen Anstieg der Steigungen auf  $\alpha \approx 1.5$  für größere Zeiten. Der Übergang zwischen den beiden Bereichen verschiebt sich systematisch für die höheren DFA-Ordnungen zu größeren Zeiten – ein Artefakt der Trendbereinigung, der durch die Eichkurve in Abb. II.A.6 korrigiert werden kann. Auf den Absolutwert der Übergangszeit kommt es hier allerdings nicht an. Für die höchste Temperatur  $785^\circ\text{C}$  erkennt man bei DFA3 (Abb. II.F.4(c)) auch den zweiten Übergang zu wieder unkorreliertem Verhalten, weil die Phasen  $2\pi$  überschreiten. Offensichtlich ist die Dynamik der Antiphasendomänen umso schneller, je höher die Temperatur ist; das deutet stark auf einen thermisch aktivierten Prozess hin. Da ein solcher Prozess im Fundamentalreflex nicht beobachtet wird, muss er mit der Bewegung der Antiphasendomänen-Grenzen identifiziert werden.

Um die Aktivierungsenergie der Antiphasendomänen-Dynamik zu bestimmen, haben wir die Zeiten  $\tau$  für den ersten Übergang in Abb. II.F.4(c) abgelesen und im Arrhenius-Diagramm Abb. II.F.5



**Abb. II.F.3:** Illustration von zwei Antiphasendomänen in  $\text{Co}_{60}\text{Ga}_{40}$ , bei denen die Positionen der Atome in der bcc-Struktur vertauscht sind (aus [STADLER-etal-04]).



**Abb. II.F.4:** Trendbereinigte Fluktuationsanalyse von Speckle-Korrelationen im Überstrukturefflex (a)-(c) und im Fundamentalreflex (d)-(f) an  $\text{Co}_{60}\text{Ga}_{40}$  mit DFA1 (a,d), DFA2 (b,e) und DFA3 (c,f). Die einzelnen Kurven gehören zu unterschiedlichen Temperaturen (siehe Legende; RT = Raumtemperatur) und sind doppelt logarithmisch gegen die Zeit  $t$  in Sekunden aufgetragen, die nicht mit der Anzahl  $s$  der Einzelaufnahmen („frames“) übereinstimmt – darum die unterschiedliche horizontale Position der einzelnen Kurven. In vertikaler Richtung sind die Kurven zur besseren Erkennbarkeit ebenfalls verschoben. Die zum Vergleich gezeigten gestrichelten bzw. strichpunktierten Geraden in (c) und (f) haben die Steigung  $\alpha = 0.5$  bzw.  $1.5$ . An der  $785^\circ\text{C}$  Kurve in (c) erkennt man das erwartete Verhalten mit zwei Übergängen, während für den Fundamentalreflex in (f) kein diffusives Verhalten sichtbar ist (aus [STADLERetal-04]).

halblogarithmisch gegen die inverse absolute Temperatur  $T^{-1}$  aufgetragen. Man erkennt, dass die Abhängigkeit innerhalb der Fehlerbalken für die Bestimmung des Übergangs  $\tau$  gut mit einer exponentiellen thermischen Aktivierung der Antiphasendomänen-Grenzen-Dynamik,

$$\tau \sim \exp[E_{\text{APB}}/k_{\text{B}}T] \quad (\text{II.F.1})$$

übereinstimmt, wobei  $E_{\text{APB}} = 1.05 \pm 0.10$  eV. Die Übergänge bei  $415^\circ\text{C}$  und  $480^\circ\text{C}$  können bei dieser Bestimmung der Aktivierungsenergie nicht berücksichtigt werden, weil der Bereich mit Steigung  $\alpha \approx 1.5$  oberhalb der Übergänge dafür zu kurz ist (siehe Abb. II.F.4(c)).

Hier ist zu beachten, dass die im Sinne von Abb. II.F.2 ersten Übergänge zur Bestimmung der Geschwindigkeit der diffusiven Strukturveränderungen in der Probe herangezogen wurden, wozu Konstanz des Photonenrauschens vorauszusetzen ist. Da der erste Übergang nur in der DFA zu sehen ist aber nicht in der Autokorrelationsfunktion, kann man die Autokorrelationsanalyse hier grundsätzlich nicht zur Auswertung der Daten benutzen. Der zweite Übergang ist nur bei der höchsten Temperatur in der verfügbaren Messzeit deutlich zu erkennen. Allerdings ergibt sich auch aus diesem zweiten Übergang und aus den andeutungsweise in Abb. II.F.4(c) erkennbaren zweiten Übergängen in den Kurven für  $585^\circ\text{C}$  und  $680^\circ\text{C}$  in einer gänzlich vom Photonenrauschen unabhängigen Bestimmung ungefähr die gleiche Aktivierungsenergie, so dass man davon ausgehen kann, dass das Photonenrauschen nicht unterschiedlich war.

Mit etwas Aufwand lässt sich das Ergebnis für die Aktivierungsenergie in Beziehung zu Monte-Carlo-Simulationen setzen, bei denen das Verhältnis der Aktivierungsenergien von normaler Diffusion und Antiphasendomänen-Grenzen-Diffusion mit 3.5 bis 4.2 bestimmt worden war [WEINKAMERetal-98]; dieses Verhältnis ist so groß, weil sich die Leerstellen besonders an den Antiphasendomänen-Grenzen konzentrieren. Die Diffusionsenergie für Co beträgt  $E_D = 2.24$  eV [STOLWIJKetal-80], während die Diffusion von Ga vernachlässigbar ist. Von  $E_D$  muss die Energie für eine Leerstellen-Erzeugung subtrahiert werden, weil dieser Prozess in den Monte-Carlo-Simulationen nicht berücksichtigt wurde. Eine Extrapolation aus Messwerten bei anderen CoGa-Legierungen [VONOMMEN&DEMIRANDA-81] ergibt hierfür  $E^f = 0.66$  eV. Damit kommen wir mit unserer Aktivierungsenergie  $E_{APB}$  auf

$$\frac{E_D^m}{E_{APB}^m} = \frac{E_D - E^f}{E_{APB} - E^f} = 4.1 \quad (\text{II.F.2})$$

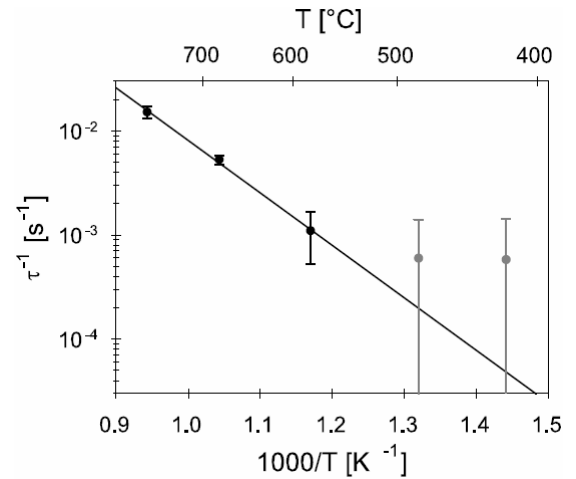
in guter Übereinstimmung mit 3.5 bis 4.2 der Monte-Carlo-Simulation [WEINKAMERetal-98].

#### d) Vergrößerungsmechanismen in Zweiphasen-Legierungen

Als zweite Anwendung der Röntgen-Photonen Korrelations-Spektroskopie (XPCS) mit Fluktuationsanalyse-Auswertung betrachte ich die Bestimmung von Vergrößerungsmechanismen in zweiphasigen Metall-Legierungen. Die beiden betrachteten Legierungen Al-6at.%Ag bei 140°C und Al-9at.%Zn bei 0°C gelten als Modellsysteme für das Wachstum von Ausscheidungen [OSAMURAetal-88, LANGMAYRetal-92]. Sie haben keine homogene Phase, sondern die Komponente mit dem geringeren Anteil (Ag bzw. Zn) bildet Ausscheidungen in dem Al, die zunächst klein sind, dann aber durch Diffusionsprozesse mit der Zeit wachsen. Dieser Vergrößerungsprozess soll untersucht werden. Die Temperaturen sind so gewählt, dass der Vergrößerungsprozess quasi-stationär ist, d.h. die Größe der Vergrößerungen ändert sich nicht wesentlich in der Messdauer von einigen Stunden.

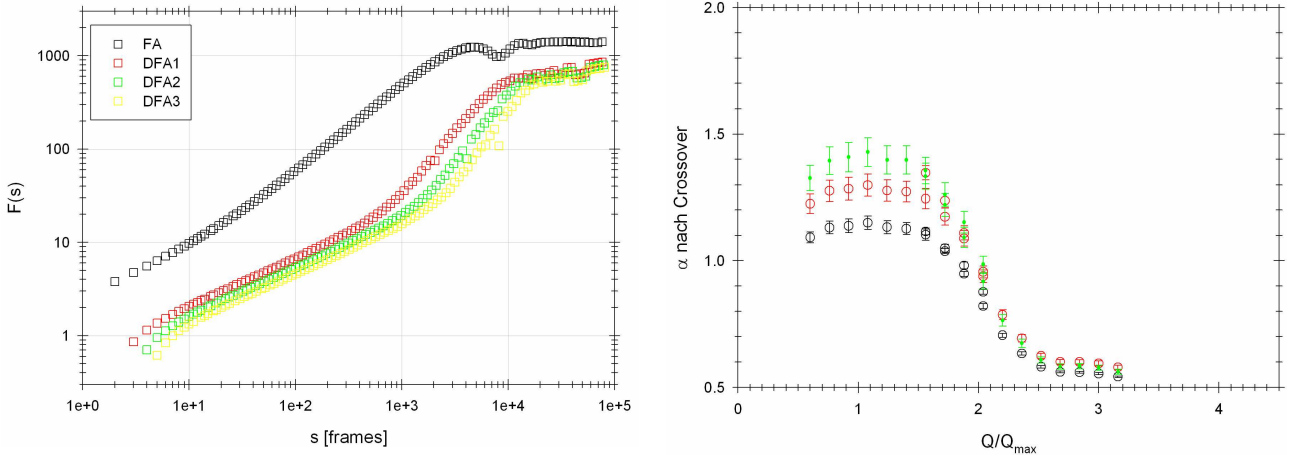
Theoretisch sind zwei verschiedene Arten von Vergrößerungsprozessen möglich, und es hängt von der bevorzugten Lage der Gitter-Leerstellen ab, welcher Mechanismus dominiert. In Monte-Carlo-Simulationen [ROUSSEL&BELLON-01, WEINKAMER&FRANTZL-03] wurde gezeigt, dass die Vergrößerung durch das Zusammenschließen mehrerer kleiner Ausscheidungen erfolgt (*Koagulations-Mechanismus* [BINDER&STAUFFER-74]), wenn sich die Leerstellen bevorzugt an den Grenzen der Ausscheidungen befinden, während die Vergrößerung durch ein Wachsen der Ausscheidungen durch die Diffusion einzelner Atome erfolgt, wenn sich die Leerstellen in der Matrix befinden. Letzteres ist der klassische Lifshitz-Slyozov-Wagner (*LSW*-) *Mechanismus*.

Durch die Vergrößerungen sind die polykristallinen Proben stark ungeordnet und die Beugungsringe in der Röntgen-Kleinwinkelstreuung sind sehr breit, wie Abb. II.F.7 zeigt. Die Speckle-Muster sind über weite Teile des Bildes ausgedehnt, so dass man seine Fluktuationen in Abhängigkeit vom Streuvektor  $Q$  untersuchen kann. Abbildung II.F.6 zeigt links typische Ergebnisse der FA und der DFA für die Speckle-Fluktuationen bei einem bestimmten Streuvektor  $Q$ . Zur Verbesserung der Statistik wurden die jeweils einige 1000 Zeitschritte umfassenden Reihen von 20 benachbarten



**Abb. II.F.5:** Arrhenius-Diagramm der (ersten) Übergangszeiten  $\tau$  aus den DFA3-Kurven in Abb. II.F.4(c) für die Speckle-Fluktuationen im Überstrukturreflex an  $\text{Co}_{60}\text{Ga}_{40}$ . Bei der Bestimmung der Aktivierungsenergie mit dem Ansatz  $\tau \sim \exp[E_{APB}/k_B T]$  (durchgezogene Linie mit  $E_{APB} = 1.05 \pm 0.10$  eV) wurden nur die drei höchsten Temperaturen berücksichtigt, weil bei den beiden niedrigen Temperaturen die Übergangszeiten in der Größenordnung der Messdauer liegen (aus [STADLERetal-04]).

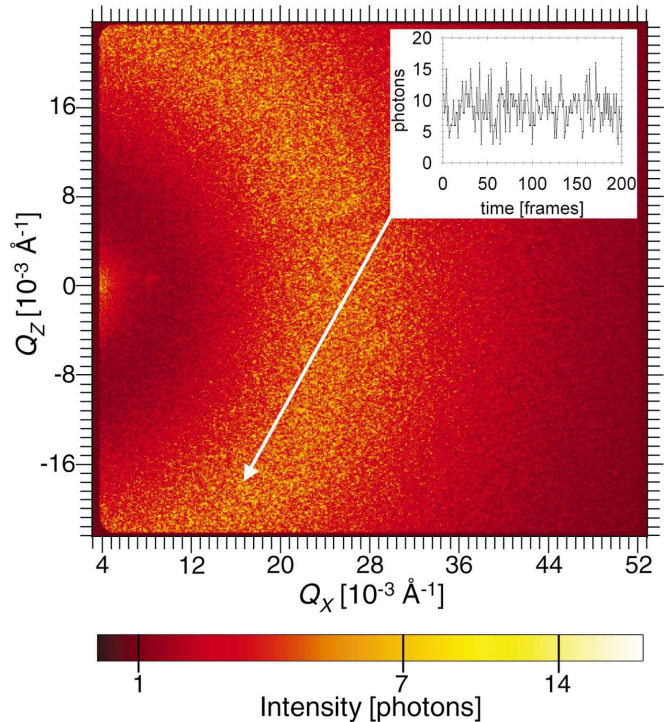




**Abb. II.F.6:** Ergebnisse der FA und der DFA für Speckle-Korrelationen bei kohärenter Röntgen-Kleinwinkelstreuung an Al-6at.%Ag. Links sind die FA- sowie die DFA1- bis DFA3-Fluktuationsfunktionen (von oben nach unten) für einen typischen Streuvektor  $Q$  gezeigt, wobei für die Analyse die Reihen von 20 benachbarten Punkten in den Speckle-Bildern normiert aneinander gehängt wurden. Außer bei der FA erkennt man deutlich den ersten Übergang zu diffusivem Verhalten ( $\alpha \approx 1.5$ ) auf mittleren Zeitskalen. Um bzw. oberhalb von  $s = 10^4$  Belichtungsschritten („frames“) setzten Artefakte vom Aneinanderhängen der Reihen ein. Rechts sind die in diesem mittleren Skalenbereich bestimmten Fluktuationsexponenten  $\alpha$  für die DFA1 (◻, unten), die DFA2 (◻, Mitte) und die DFA3 (◻, oben) mit Fehlerbalken gegen den relativen Betrag des Streuvektors  $Q/Q_{\max}$  aufgetragen. Die  $Q$ -Abhängigkeit des Korrelationsverhaltens ist charakteristisch für den Vergrößerungsmechanismus (Abbildungen von L. Stadler).

Punkten im Speckle-Muster normiert und aneinander gehängt. Aufgrund von Trends in der Synchrotron-Gesamtintensität kommt es auf Zeitskalen  $s \gtrsim 5000$  zu Oszillationen, die sich insbesondere in der FA-Kurve abzeichnen. Man erkennt klar das unkorrelierte Verhalten ( $\alpha = 0.5$ ) für kleine Zeiten und den Übergang zu diffusivem Verhalten ( $\alpha \approx 1.5$ ) auf mittleren Zeitskalen. Nur die FA-Kurve zeigt den Übergang weniger deutlich, und zwar unter anderem deshalb, weil  $\alpha = 1.0$  die Sättigungssteigung für die FA ist.

Im rechten Teil von Abb. II.F.6 sind die aus den DFA1- bis DFA3-Kurven im mittleren Skalenbereich bestimmten Steigungen  $\alpha$  gegen den relativen Betrag des Streuvektors  $Q/Q_{\max}$  aufgetragen. Der eigentliche Wert  $\alpha = 1.5$  für den diffusiven Bereich wird in der numerischen Auswertung der experimentellen Daten nur erreicht, wenn dieser Bereich hinreichend lang ist. Bei der DFA3 ist das effektive  $\alpha$  am größten, weil die Übergänge schärfer sind (siehe linken Teil von Abb. II.F.6). Die beobachtete Abhängigkeit von  $Q/Q_{\max}$  ist charakteristisch für den Vergrößerungsmechanismus, weil durch kleine bzw. große  $Q/Q_{\max}$  die Dynamik auf großen bzw. kleinen Längen-



**Abb. II.F.7:** Speckle-Muster von kohärenter Röntgen-Kleinwinkelstreuung an der Zweiphasen-Legierung Al-6at.%Ag. Die Photonenzählrate ist mit logarithmischer Farbkodierung für einen ausgewählten Bereich von Streuvektoren und eine Belichtungszeit von 1.65s aufgetragen. Das kleine Bild zeigt die Zeitabhängigkeit der Photonenzählrate in dem Punkt, auf den der Pfeil weist (aus [STADLERetal-03]).

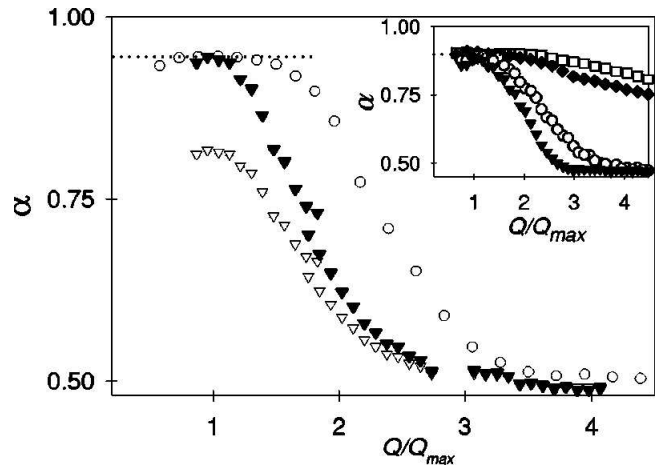


skalen gemessen wird. Der effektive Wert von  $\alpha$  ist allerdings eher ein Maß für die relative Stärke der diffusiven Dynamik und weniger ein Maß für die Art der auftretenden Korrelationen. Die Position des Übergangs wäre meiner Meinung nach besser zur Charakterisierung der Dynamik geeignet, aber sie ist technisch schwieriger zu ermitteln.

Außerdem waren die Argumente für den Übergang bei der Durchführung von Monte-Carlo-Simulationen der Dynamik und XPCS in dem betrachteten System [WEINKAMER&FRANTZL-03] noch nicht bekannt. Darum wurde zur Charakterisierung der Simulationsergebnisse die FA benutzt, bei der der Übergang zwischen dem ersten und zweiten Skalenbereich nicht scharf ist und die Position des Übergangs sich in einer graduellen Veränderung des effektiven Skalenexponenten  $\alpha$  zeigt. Um die experimentellen Resultate mit diesen Simulationsergebnissen vergleichen zu können, müssen auch an den experimentellen Daten die effektiven Skalenexponenten  $\alpha$  der FA-Kurven betrachtet werden.

Abbildung II.F.8 zeigt diese effektiven Skalenexponenten in Abhängigkeit von  $Q/Q_{\max}$  für die beiden Experimente an Al-6at.%Ag und Al-9at.%Zn (großes Bild) sowie für die Monte-Carlo-Simulationen (kleines Bild) [WEINKAMER&FRANTZL-03], bei denen einmal der Koagulations-Mechanismus und einmal der klassische LSW-Mechanismus für die Vergrößerungsdynamik verwendet wurde. Um einen Vergleich der Ergebnisse zu ermöglichen, wurden die simulierten Intensitäten und die experimentellen Intensitäten für Al-9at.%Zn auf das experimentelle Intensitätsmaxima für Al-6at.%Ag umskaliert und noch ein Hintergrund-Rauschen zu den Simulationen hinzugefügt. So findet man eine gute qualitative Übereinstimmung der Kurvenverläufe für Al-6at.%Ag und den LSW-Mechanismus einerseits sowie für Al-9at.%Zn und den Koagulation-Mechanismus andererseits. Demnach scheint in Al-6at.%Ag der LSW-Mechanismus und in Al-9at.%Zn der Koagulation-Mechanismus zu dominieren.

Eine Begründung für dieses Verhalten kann man in den Schmelztemperaturen der beteiligten Metalle finden. Sie beträgt 933 K für Al, 1234 K für Ag und 693 K für Zn. Daher sollten die Leerstellen in Al-9at.%Zn eher an den Grenzen der Zn-Ausscheidungen zu finden sein – was den Koagulation-Mechanismus begünstigt – und in Al-6at.%Ag eher in der Al-Matrix – was den LSW-Mechanismus begünstigt.



**Abb. II.F.8:** Vergleich der effektiven FA-Exponenten  $\alpha$  für Experiment (großes Bild) und Monte-Carlo-Simulation (kleines Bild) [WEINKAMER&FRANTZL-03] in Abhängigkeit vom relativen Betrag des Streuvektors  $Q/Q_{\max}$ . Die  $\alpha$ -Werte für Al-6at.%Ag ( $\circ$ ) und Al-9at.%Zn ( $\nabla$ ) sowie die auf das Maximum für Al-6at.%Ag umskalierten  $\alpha$ -Werte für Al-9at.%Zn ( $\blacktriangledown$ ) sollen mit den Simulationsergebnissen für den LSW-Mechanismus ( $\square$ , sowie  $\circ$  mit reskalierter Intensität und zusätzlichem Hintergrund) und für den Koagulations-Mechanismus ( $\blacklozenge$ , sowie  $\blacktriangledown$  reskaliert) verglichen werden (aus [STADLERetal-03]).



### III. Fluktuationen und Lokalisierung in elektronischen Systemen

In diesem zweiten Teil der Arbeit behandle ich komplexe elektronische Systeme, bei denen aufgrund von Unordnung im Kristallgitter Fluktuationen in den messbaren physikalischen Größen auftreten. Wie in der Einleitung angesprochen hat die Komplexität hier ihre Ursache in der inhomogenen Potenziallandschaft des ungeordneten Festkörpers und in der langreichweitigen (Coulomb-) Wechselwirkung zwischen den einzelnen Elektronen. Eine Separation in kleine Teilsysteme, z.B. in Einzelelektronen in wenigen Elementarzellen mit periodischen Randbedingungen, ist nicht möglich, ohne dass die Komplexität der Dynamik verändert wird. Wegen der Unordnung und starken Vielteilchen-Wechselwirkungen kann man sich nicht mit einer Näherungslösung begnügen, sondern muss ein Modellsystem aus vielen Teilchen simulieren, d.h. die Schrödinger-Gleichung dafür lösen. Hier sind die Fluktuationen quantenmechanischen Ursprungs. Während die meisten der im ersten Teil betrachteten Systeme makroskopischer Art waren und die charakteristischen Fluktuationen in der zeitlichen Dynamik mit Hilfe der Zeitreihenanalyse beobachtet wurden, geht es in diesem Teil vor allem um räumliche Fluktuationen. Die Grundidee ist ähnlich: Eine Charakterisierung der Elektronensysteme mit vielen Freiheitsgraden und wenigen Erhaltungsgrößen kann nicht allein durch den Mittelwert der elektrischen Leitfähigkeit oder die mittlere Einhüllende der Eigenzustände erfolgen, sondern man muss für eine vollständige Charakterisierung die Verteilung der Leitfähigkeiten und die räumlich fluktuierende Verteilung der Wellenfunktionsamplituden berücksichtigen.

Ein weiterer Unterschied zwischen den beiden Teilen der Arbeit ist die Art der analysierten Daten. Während ich im ersten Teil vor allem Messdaten realer komplexer Systeme in Form von Zeitreihen betrachtet habe, geht es hier hauptsächlich um Simulationsergebnisse. Das Ziel ist dabei, die komplexe Dynamik der Modellsysteme besser zu verstehen und zu klären, welche Phänomene die betrachteten Modelle beschreiben können und welche nicht. Damit kann indirekt auf die Ursachen der beobachteten Effekte geschlossen werden. Wenn ein bestimmter Effekt nicht mehr auftritt, sobald eine bestimmte Wechselwirkung vernachlässigt ist, kann das als Indiz für die Relevanz eben dieser Wechselwirkung für den betrachteten Effekt gewertet werden. Bei der Analyse von Simulationsergebnissen sind nicht gegebene Datensätze der Ausgangspunkt, sondern die Simulationen selbst müssen erst mit sinnvollen Ansätzen und Parameterwerten entwickelt und dann durchgeführt werden. Anschließend besteht die Aufgabe darin, die Simulationsergebnisse zu aussagefähigen Größen zusammenzufassen. Zum Teil, und zwar insbesondere bei den wechselwirkenden Elektronensystemen, ist es notwendig, geeignete Größen zum Vergleich der Simulationsergebnisse mit physikalisch messbaren Größen herzuleiten und zu motivieren, weil die etablierten Methoden oft nur auf Ein-Elektronen-Wellenfunktionen anwendbar sind. Der Erkenntnisgewinn erfolgt durch zweierlei Arten von Vergleichen: Einerseits werden die Ergebnisse der mikroskopischen Simulationen mit den Vorhersagen übergeordneter, eher abstrakter Theorien, wie der Ein-Parameter-Skalentheorie und der Zufallsmatrizen-Theorie, verglichen. Andererseits erfolgt ein Vergleich zwischen den Simulationsergebnissen und experimentellen Messergebnissen.

Fluktuationen spielen bei der Miniaturisierung von Bauelementen in der Nanotechnologie eine zunehmend größere Rolle, da beispielsweise beim Einelektronentransistor die einzelnen Energieniveaus und ihre Fluktuationen aufgelöst werden können. Sie zeigen sich insbesondere bei Bauelementen, die in mindestens einer Richtung nanoskopische Abmessungen haben, und bei tiefen Temperaturen, wenn eine quantenmechanische Beschreibung erforderlich ist. Ein grundlegendes Verständnis solcher Systeme ist Voraussetzung für die weitere Miniaturisierung elektronischer Bauelemente. Besonders im Blickpunkt des Interesses steht der Phasenübergang zwischen isolierenden und metallischen Zuständen.

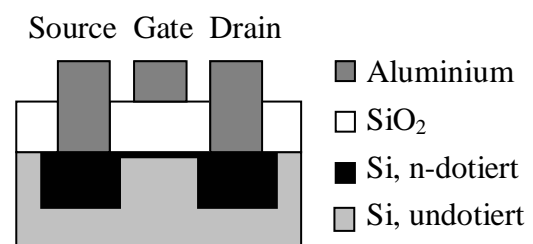
Nach einer kurzen Darstellung der experimentellen Resultate zur Motivation in Kapitel III.A handle ich in den Kapiteln III.B und III.C Modelle bzw. numerische Methoden zur Untersuchung von Lokalisierung und Fluktuationen in ungeordneten und wechselwirkenden Elektronensystemen; Teile dieser beiden einführenden Kapitel sind aus meiner Dissertation [KANTELHARDT-99] gekürzt und überarbeitet. Die Kapitel III.D bis III.G beschreiben und diskutieren die Ergebnisse meiner numerischen Simulationen für verschiedene niederdimensionale Modellsysteme.

## III.A. Motivation: Metall-Isolator-Übergang in zweidimensionalen Elektronensystemen

Das Hauptergebnis der Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung [ABRAHAMS-79] ist, dass es in zweidimensionalen Systemen ohne magnetisches Feld keine metallischen Zustände geben kann, für die der elektrische Widerstand mit abnehmender Temperatur konstant bleibt oder verschwindet. Der Grund ist die immer vorhandene Unordnung, die – auch wenn sie nur sehr gering ist – in hinreichend großen Systemen und bei hinreichend tiefen Temperaturen zu einer Streuung der Elektronen an den Störstellen und wegen destruktiver Interferenz der gestreuten Wellen zur (Anderson-) Lokalisierung führt [ANDERSON-58]. Dabei steigt der Widerstand mit abnehmender Temperatur logarithmisch (schwache Lokalisierung) oder exponentiell (starke Lokalisierung) an [ABRAHAMS-etal-01]. Obwohl diese Vorhersage nur für nicht wechselwirkende Teilchen bewiesen wurde, also quasi für Elektronen im Modell des freien Elektronengases mit einer ungeordneten Potenziallandschaft, war man fest von der allgemeinen Gültigkeit des Ergebnisses überzeugt. Experimente an dünnen metallischen Schichten und an Silizium Metall-Oxid-Halbleiter Feld-Effekt-Transistoren (MOSFETs) in den frühen 80er Jahren bestätigten die Vorhersagen für schwache Lokalisierung bei hoher Elektronendichte [DOLAN&OSHEROFF-79, BISHOPetal-80, URENetal-80] und für starke Lokalisierung bei niedriger Elektronendichte [URENetal-80]. Darum hat viele Jahre praktisch niemand an der Gültigkeit der Skalentheorie der Lokalisierung und dem Vorhandensein ausschließlich lokalisierter Zustände in zweidimensionalen Systemen gezweifelt.

### III.A.1. Experimentelle Ergebnisse zur elektrischen Leitfähigkeit

Es kam daher völlig überraschend, dass Mitte der 90er Jahre metallisches Verhalten bei tiefen Temperaturen in Silizium-MOSFETs mit sehr hoher Elektronenbeweglichkeit gefunden wurde [KRAVCHENKOetal-94, KRAVCHENKOetal-95, MASONetal-95, KRAVCHENKOetal-96, SARACHIK&KRAVCHENKO-99]. Die erste, von Phys. Rev. Lett. abgelehnte Publikation [KRAVCHENKOetal-94] kommt inzwischen auf ca. 270 Zitate; einen Überblick geben [ABRAHAMSetal-01, KRAVCHENKO&SARACHIK-04]. In diesen Bauelementen, deren Aufbau in Abb. III.A.1 skizziert ist, bildet sich an der Grenzfläche zwischen der Halbleiterschicht und der Oxidschicht ein zweidimensionales Elektronengas, wenn die Elektronen durch ein über die Metallelektrode („Gate“) angelegtes elektrisches Feld zur Grenzschicht gezogen werden. Die Dicke der Ladungsträgerschicht bzw. die Ladungsträgerdichte in der Schicht lassen sich durch die angelegte Gate-Spannung variieren, so dass man mit derselben Probe Messungen für unterschiedliche Ladungsträgerkonzentrationen durchführen kann. Die bei den neuen Experimenten verwendeten MOSFETs hatten eine um etwa eine Größenordnung höhere Beweglichkeit der Ladungsträger im Vergleich zu den Experimenten in den 80er Jahren, weil die Grenzfläche mit der modernen Halb-



**Abb. III.A.1:** Skizze eines MOSFETs. Das zweidimensionale Elektronengas entsteht an der Grenzschicht zwischen Si und SiO<sub>2</sub> unterhalb des Gates.

leitertechnologie schärfer hergestellt werden kann. Daher konnten Messungen bei geringerer Elektronenkonzentration  $n_s \approx 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  durchgeführt werden, bei der die typische Energie der Elektron-Elektron-Wechselwirkung (Coulomb-Wechselwirkung) mit  $E_{e-e} \approx e^2 n_s^{1/2} / (4\pi^{1/2} \epsilon \epsilon_0) \approx 10 \text{ meV}$  deutlich größer ist als die Fermi-Energie  $E_F \approx \pi \hbar^2 n_s / 2m^* \approx 0.58 \text{ meV}$  ( $e$  ist hier die Elementarladung,  $\epsilon \epsilon_0$  die gesamte Dielektrizitätskonstante,  $m^*$  die effektive Ladungsträgermasse und der Faktor 2 in  $E_F$  kommt von der Bandentartung). Das dimensionslose Verhältnis

$$r_s \equiv \frac{E_{e-e}}{E_F} = \frac{2\pi e^2 m^*}{\epsilon \epsilon_0 \hbar^2 \sqrt{\pi n_s}} = \frac{1}{a_B^* \sqrt{\pi n_s}} \quad (\text{III.A.1})$$

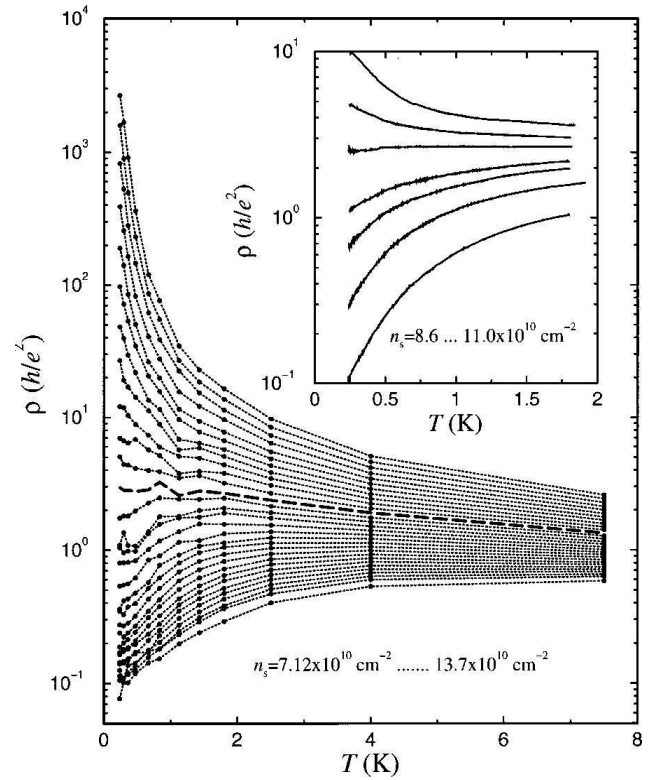
mit dem effektiven Bohrschen Radius  $a_B^*$ , der auch als dimensionsloser Wigner-Seitz-Radius bezeichnet wird, charakterisiert die relative Stärke der Elektron-Elektron-Wechselwirkungen.

Abbildung III.A.2 zeigt die experimentellen Ergebnisse für den spezifischen Widerstand  $\rho$  eines typischen Silizium-MOSFETs mit hoher Beweglichkeit in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$  bei verschiedenen Ladungsträgerdichten  $n_s$ , die Werten von  $r_s$  im Bereich zwischen 15 und 20 entsprechen [KRAVCHENKOetal-95, SARACHIK&KRAVCHENKO-99, ABRAHAMSetal-01].

Man erkennt bei kleinen Ladungsträgerdichten (oben) einen starken Anstieg des Widerstands auf der logarithmischen Skala mit abnehmender Temperatur, wie man es für isolierende Zustände erwartet. Oberhalb einer kritischen Ladungsträgerdichte von  $n_s = n_c = 9.02 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  hingegen (unten im Bild), ändert sich das Verhalten für tiefe Temperaturen. Dann steigt der Widerstand mit abnehmender Temperatur nur oberhalb von 2 bis 4K leicht an, fällt aber bei tieferen Temperaturen deutlich ab, was metallische Zustände anzeigt. Im kleinen Bild von Abb. III.A.2 ist der Übergangsbereich vergrößert für eine andere Probe gezeigt; auch hier sieht man den Übergang zwischen isolierendem Verhalten (oben) und metallischem Verhalten (unten) bei einer kritischen Ladungsträgerdichte von  $n_c \approx 9 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ , die  $r_s \approx 18$  entspricht. Ähnliche Ergebnisse mit einem Abfall des Widerstands um einen Faktor zwei bis drei für Ladungsträgerdichten  $n_s$  über der entsprechenden kritischen Dichte  $n_c$  wurden in SiGe- und GaAs/AlGaAs-Systemen mit Löcherleitung gefunden [COLERIDGEetal-97, YOONetal-99, SIMMONSetal-00] sowie auch in n-dotiertem AlAs [PAPADAKIS&SHAYEGAN-98]. In allen Fällen wurde ein Metall-Isolator-Übergang bei  $r_s$ -Werten zwischen 5 und 20 beobachtet, im Falle der III-V-Halbleiter allerdings erst unterhalb von 0.5K.

Wie man es für einen solchen Übergang erwartet, zeigen die gemessenen spezifischen Widerstände Skalenverhalten [KRAVCHENKOetal-95]. Für Si-MOSFETs lässt sich  $\rho(T, n_s)$  mit den beiden unabhängigen Variablen  $T$  und  $n_s$  im Bereich von  $T = 0.25$  bis 2K als Funktion nur einer Variablen  $T/T_0(n_s)$  schreiben,

$$\rho(T, n_s) = \rho_c f[T/T_0(n_s)], \quad (\text{III.A.2})$$



**Abb. III.A.2:** Temperaturabhängigkeit des spezifischen elektrischen Widerstands in einem Silizium MOSFET für 30 Elektronen-Dichten von  $n_s = 7.12 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  (oben) bis  $13.7 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  (unten); im kleinen Bild sind Ergebnisse für eine andere Probe gezeigt (aus [ABRAHAMSetal-01]).

### III.A. Motivation: Metall-Isolator-Übergang in zweidimensionalen Elektronensystemen

wobei  $\rho_c$  die kritische Dichte ist und die Skalenparameter  $T_0(n_s)$  geeignet gewählt werden müssen. Das Skalenverhalten ist in Abb. III.A.3 gezeigt. Man erkennt in dem kleinen Bild, dass  $T_0(n_s)$  ungefähr nach einem Potenzgesetz vom Abstand zur kritischen Dichte  $n_c$  abhängt,

$$T_0(n_s) \sim |n_s - n_c|^b. \quad (\text{III.A.3})$$

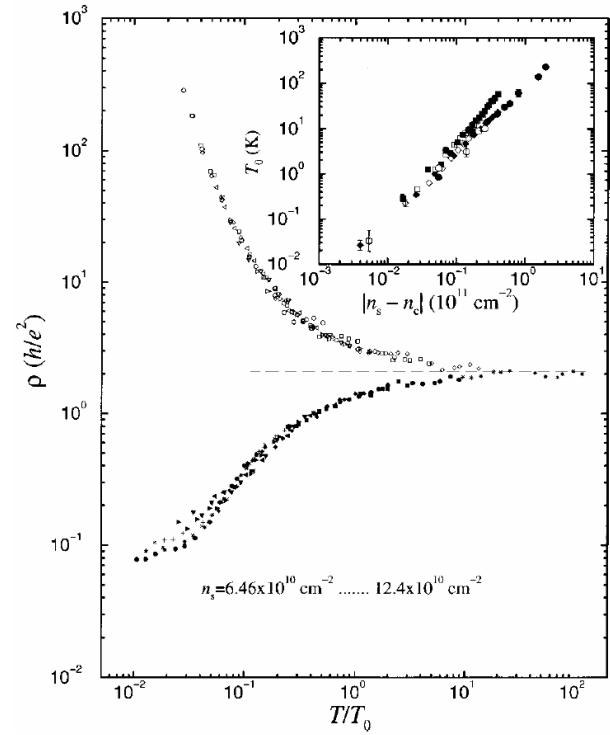
Der Exponent  $b$  beträgt auf beiden Seiten des Übergangs  $b \approx 1.6 \pm 0.1$  [KRAVCHENKOetal-95]; andere Autoren messen etwas kleinere Werte bis 1.25 [POPOVICetal-97]. Bei den III-V-Halbleitern ist der Skalenansatz (III.A.2) nicht erfolgreich [HANEINetal-98]. Die Güte der Skalenansätze wurde kürzlich mit einem Modell minimaler Annahmen systematisch überprüft mit dem Ergebnis, dass es für die Parameterwerte sehr auf den gewählten Temperaturbereich ankommt, obwohl die Skalenansätze an sich robust sind [LILLIEHÖÖK&FURNEAUX-02]. Weiterhin erfolgte eine unabhängige experimentelle Bestimmung des kritischen Punktes  $n_c$  [SHASHKINetal-01b, JAROSZYNSKIetal-02] über das Skalenverhalten der Aktivierungsenergie  $E_a$ , die sich aus dem Ansatz  $\rho(T) \sim \exp[E_a/k_B T]$  [PEPPERetal-74] für den lokalisierten Bereich ableiten lässt.

Experimentell weniger klar ist das Verhalten der zweidimensionalen Elektronensysteme bei noch höheren Ladungsträgerdichten  $n_s$ . Da sich in dieser Richtung der schon in den 80er Jahren untersuchte Parameterbereich ohne metallische Leitfähigkeit anschließt [DOLAN&OSHEROFF-79, BISHOPetal-80, URENetal-80], müsste es prinzipiell einen zweiten Übergang vom metallischen zu isolierendem Verhalten bei größeren Ladungsträgerdichten geben. Zwar wurde ein solcher Übergang für GaAs auch gefunden [HAMILTONetal-99], aber nicht von anderen Gruppen oder in anderen Materialien. Außerdem erscheint das Konzept eines doppelten Phasenübergangs in Abhängigkeit von der Ladungsträgerdichte nicht besonders attraktiv.

#### III.A.2. Experimentelle Ergebnisse zur Magnetoleitfähigkeit

Einen weiteren Einblick in die Natur der zweidimensionalen Elektronensysteme bei tiefen Temperaturen kann man durch Messung der Leitfähigkeit unter dem Einfluss eines Magnetfelds gewinnen; einen ausführlichen Überblick geben [KRAVCHENKO&SARACHIK-04]. In dünnen Schichten aus normalen Metallen hat ein paralleles Magnetfeld (Feldvektor in der Schichtebene) kaum Einfluss auf die elektronische Leitfähigkeit, denn Bahneffekte sind stark unterdrückt und das Feld koppelt praktisch nur an die Elektronenspins. Man erwartet nur schwache Veränderungen der Leitfähigkeit aufgrund von Elektron-Elektron-Wechselwirkungen [LEE&RAMAKRISHNAN-82, LEE&RAMAKRISHNAN-85]. Daher war es überraschend, dass in Silizium MOSFETs mit geringer Ladungsträgerdichte die elektrische Leitfähigkeit durch ein paralleles Magnetfeld stark unterdrückt wird [DOLGOPOLOVetal-92, SIMONIANetal-97, PUDALOVetal-97].

Abbildung III.A.4 zeigt die Abhängigkeit des spezifischen Widerstands vom Magnetfeld für Si-MOSFETs mit (vergleichsweise hohen) Ladungsträgerdichten, die ohne Magnetfeld im so genann-



**Abb. III.A.3:** Skalenverhalten des spezifischen Widerstands von Si-MOSFETs. Mit den im kleinen Bild gezeigten Skalenparametern  $T_0(n_s)$  lassen sich die Kurven von  $\rho(T, n_s)$  nach Gl. (III.A.2) aufeinander skalieren (aus [ABRAHAMSetal-01]).

ten metallischen Bereich liegen. Man erkennt auf der logarithmischen Skala einen drastischen Anstieg des spezifischen Widerstands über teilweise mehr als eine Größenordnung, also einen positiven Magnetowiderstand. Das entspricht einer negativen Magnetoleitfähigkeit, weil die elektrische Leitfähigkeit mit zunehmendem Feld abnimmt. Die Abnahme geht mit dem Auftreten einer Magnetisierung einher [OKAMOTOetal-99, VITKALOVetal-00]. Bei starken Magnetfeldern ist eine Sättigung zu erkennen, die umso eher erfolgt, je näher die Ladungsträgerdichte am Übergangspunkt zum lokalisierten Bereich liegt [SHASHKINETal-01a, VITKALOVetal-01]. Im Falle der vollständig polarisierten Elektronen ist der Metall-Isolator-Übergang unterdrückt, d.h. es existiert keine kritische Ladungsträgerdichte [MERTENSEtal-01, SHASHKINETal-01b, GAOetal-02]. Die Abnahme der Leitfähigkeit mit zunehmendem Magnetfeld erfolgt auch bei anderen Richtungen des Feldes in Bezug auf die Ladungsträger-Ebene oder die Stromrichtung [SIMONIANetal-97, KRAVCHENKOetal-98, PUDALOVetal-02].

Es gibt zwei etwas unterschiedliche Versuche, ein Skalenverhalten der Magnetoleitfähigkeit zu zeigen [SHASHKINETal-01a, VITKALOVetal-01]. Die erste Gruppe [SHASHKINETal-01a] hat sich an der Theorie von [DOLGOPOLOV&GOLD-00] orientiert und  $\rho(H)/\rho(0)$  für  $T \rightarrow 0$  gegen  $H/H_c(n_s)$  aufgetragen mit einem Skalenparameter  $H_c$ , der so normiert ist, dass er dem Sättigungsfeld entspricht. Das Ergebnis ist  $H_c(n_s) \sim n_s - n_c$ , d.h. der Skalenparameter geht linear gegen 0. Dieser Skalenansatz funktioniert allerdings nicht in der Nähe des Metall-Isolator-Übergangs bei der kritischen Dichte  $n_c$ . Die andere Gruppe [VITKALOVetal-01] hat in einem breiteren Bereich von Ladungsträgerdichten  $n_s$  und Temperaturen ein Ein-Parameter-Skalenverhalten gefunden, indem sie die spezifische Leitfähigkeit  $\sigma(H)$  anstelle des spezifischen Widerstands  $\rho(H)$  auftrug in normierter Form,

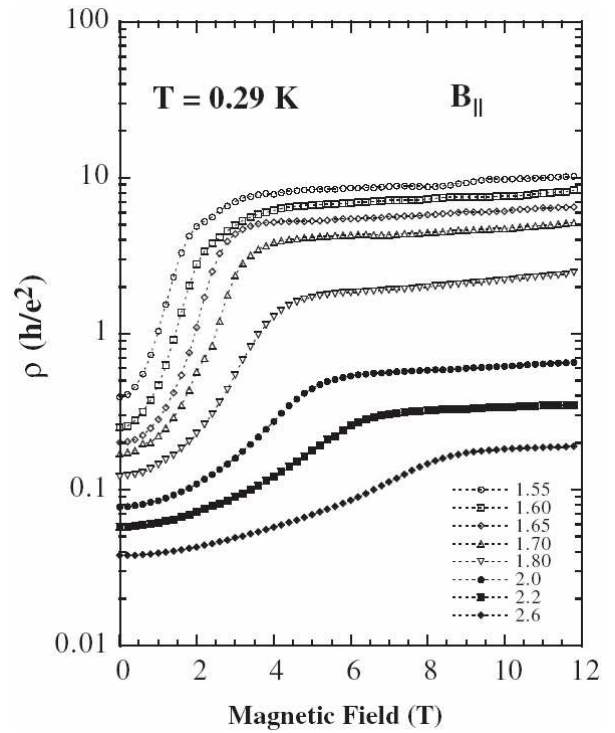
$$\frac{\sigma(0) - \sigma(H)}{\sigma(0) - \sigma(\infty)} = f\left(\frac{H}{H_\sigma(n_s, T)}\right), \quad (\text{III.A.4})$$

wobei hier  $H_\sigma(n_s, T)$  der Skalenparameter ist. Der rechte Teil von Abb. III.A.5 zeigt die gute Anwendbarkeit dieses empirischen Skalenansatzes für die experimentellen Daten. Sogar Kurven für verschiedene Temperaturen zwischen 0.3 und 1.5 K lassen sich auf diese Art übereinander skalieren. Wie Abb. III.A.5(a) zeigt, lässt sich der Skalenparameter  $H_\sigma(n_s, T)$  mit dem ebenfalls empirischen Ansatz

$$H_\sigma(n_s, T) = A(n_s) \left[ \Delta(n_s)^2 + T^2 \right]^{1/2}. \quad (\text{III.A.5})$$

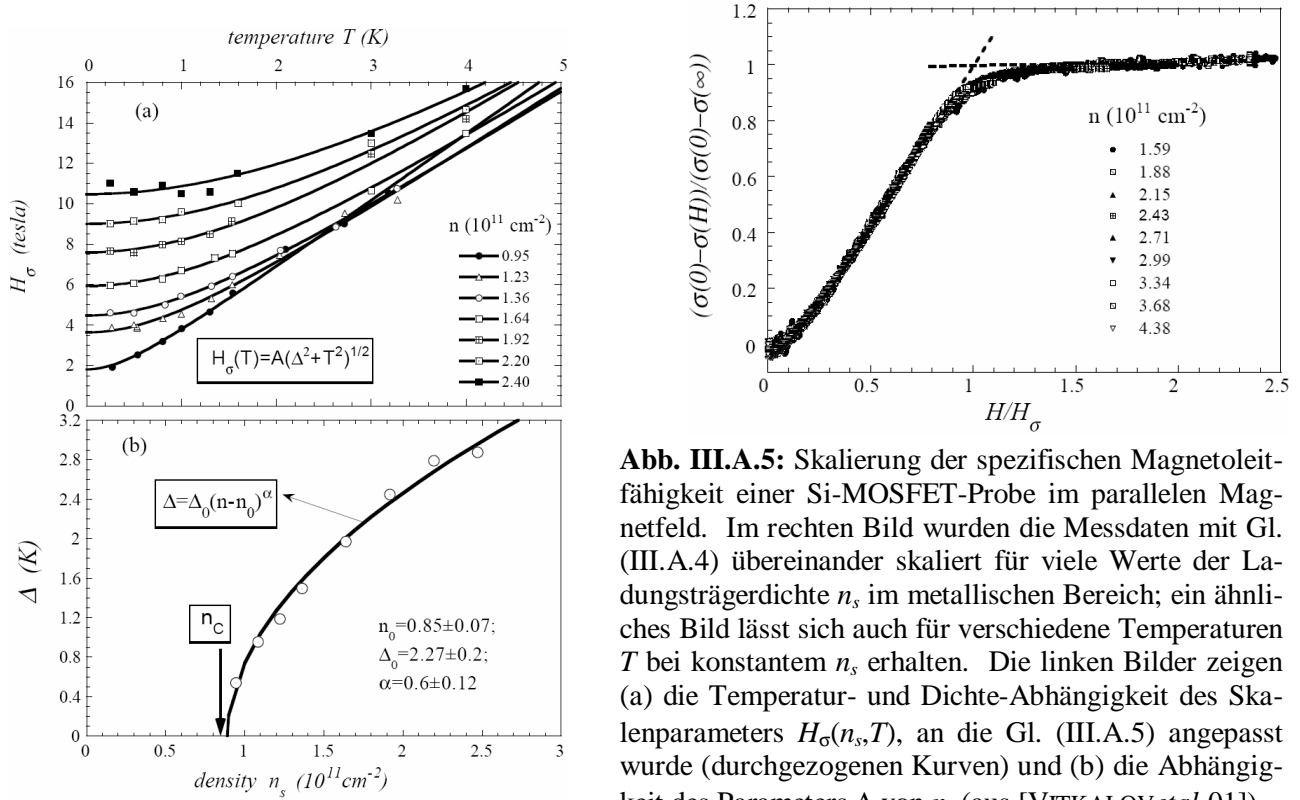
mit zwei anzupassenden, temperaturunabhängigen Parametern  $A$  und  $\Delta$  gut beschreiben. Während  $A$  weitgehend konstant ist, folgt die  $n_s$ -Abhängigkeit von  $\Delta$  näherungsweise einem Potenzgesetz, und  $\Delta$  verschwindet ungefähr am Metall-Isolator-Übergangspunkt bei  $n_c$ , siehe Abb. III.A.5(b).

Die Messungen legen die Vermutung nahe, dass der große Magnetowiderstand mit dem Elektrenspin in Zusammenhang steht und dass die Sättigung des spezifischen Widerstands auftritt, wenn



**Abb. III.A.4:** Spezifischer Magnetowiderstand einer Si-MOSFET-Probe im parallelen Feld bei 0.29 K. Die Elektronen-Dichte wurde von  $1.55 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (oben) bis  $2.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  (unten) variiert (aus [KRAVCHENKO&SARACHIK-04]).

### III.A. Motivation: Metall-Isolator-Übergang in zweidimensionalen Elektronensystemen



**Abb. III.A.5:** Skalierung der spezifischen Magnetoleitfähigkeit einer Si-MOSFET-Probe im parallelen Magnetfeld. Im rechten Bild wurden die Messdaten mit Gl. (III.A.4) übereinander skaliert für viele Werte der Ladungsträgerdichte  $n_s$  im metallischen Bereich; ein ähnliches Bild lässt sich auch für verschiedene Temperaturen  $T$  bei konstantem  $n_s$  erhalten. Die linken Bilder zeigen (a) die Temperatur- und Dichte-Abhängigkeit des Skalenparameters  $H_\sigma(n_s, T)$ , an die Gl. (III.A.5) angepasst wurde (durchgezogenen Kurven) und (b) die Abhängigkeit des Parameters  $\Delta$  von  $n_s$  (aus [VITKALOVetal-01]).

die Elektronen vollständig polarisiert sind. Ähnliche Ergebnisse wurden für GaAs/AlGaAs mit Löcherleitung erhalten; allerdings gibt es dabei kein Plateau für große Magnetfelder, sondern einen langsameren, linearen Anstieg [YOONetal-00], und das Verhalten hängt im Detail von den Richtungen von Strom und Magnetfeld ab [PAPADAKISetal-00]. Dies wird auf Bahneffekte wegen der größeren Schichtdicke und die Anisotropie der Kristalle zurückgeführt [DASSARMA&HWANG-00].

### III.A.3. Umstrittene Erklärungen

Das Problem mit den Messergebnissen zum Metall-Isolator-Übergang ist weniger eine unzureichende Qualität oder Unstimmigkeit der Messungen, sondern vielmehr die Tatsache, dass sie klar im Widerspruch zur bisher anerkannten Skalentheorie der Lokalisierung stehen, die – wie gesagt – einen Metall-Isolator-Übergang bei zweidimensionalen Systemen ausschließt. Das weist auf ein grundlegendes Problem im Verständnis der Quanteneffekte in den ungeordneten zweidimensionalen Systemen hin, das es zu klären gilt. Die Frage ist, ob die starken Elektron-Elektron-Wechselwirkungen in den jetzt betrachteten Systemen eine Revision der (Wechselwirkungen vernachlässigenden) Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung erforderlich machen oder ob das Grundprinzip einer Lokalisierung durch Unordnung erhalten bleibt und das beobachtete (scheinbar?) metallische Verhalten anders erklärt werden kann. Zusammenfassend heißt es in dem Überblick-Artikels [ABRAHAMSetal-01]: „*The physics behind these observations is at present not understood*“ (Die Physik hinter diesen Beobachtungen ist gegenwärtig unverstanden).

Es wurde eine Vielzahl von Vorschlägen zur Erklärung der experimentellen Befunde publiziert, aber keiner davon liefert ein umfassendes Bild [ABRAHAMSetal-01]. Der Hauptunterschied der Proben in den neuen Experimenten im Vergleich mit denen in den älteren Experimenten sind die (relativ zur Fermi-Energie) stärkeren Elektron-Elektron (Coulomb-) Wechselwirkungen, die sich in großen Werten von  $r_s \approx 4$  bis 20 für den Übergang zeigen. Da die Skalentheorie der Lokalisierung als Einteilchen-Theorie solche Wechselwirkungen nicht berücksichtigt, liegt es nahe, darin die Ursache für das neue Verhalten zu sehen. Das hat eine Vielzahl von analytischen [DOBROSAVLJEVICetal-97,



CASTELLANI*etal*-98, SI*etal*-98, CHAKRAVARTY*etal*-98, KIRKPATRICK&BELITZ-00, SPIVAK-01, PUNNOOSE&FINKELSTEIN-02, SPIVAK-03, ROSENSTEIN&MINHTIEN-03, GULÁCSI-04] und numerischen Arbeiten [PIKUS&EFROS-94, TALAMANTES*etal*-96, CUEVAS-99, BENENTI*etal*-99, WAINTA*etal*-99, DENTENEER*etal*-99, SHEPELYANSKY&SONG-99, SHEPELYANSKY-00, VOJTA*etal*-00, KOTLYAR&DASSARMA-01, BERKOVIT*etal*-01, BERKOVITS&KANTELHARDT-02, GOLDSTEIN&BERKOVITS-03, SRINIVASAN*etal*-03, DENTENEER&SCALETAR-03, NITA*etal*-04] zur Folge gehabt, in denen es darum geht, den Übergang zum metallischen Verhalten durch Elektron-Elektron-Wechselwirkungen zu erklären.

Andererseits kann man auch argumentieren, dass die beobachtete Temperaturabhängigkeit des spezifischen Widerstands nicht durch eine metallische Phase bei  $T = 0$  K verursacht wird, sondern vielmehr eine Auswirkung von niederenergetischen, thermisch angeregten Prozessen ist. So wurden Haftzentren im Band [ALTSHULER&MASLOV-99] oder in der benachbarten Isolatorschicht [NAKHMEDOV&MORAWETZ-02], eine spin-abhängige Streuung im Band [PAPADAKIS*etal*-99, YAISH*etal*-00], korrelierte Störstellen im Band [HILKE-03], eine Wechselwirkung mit Phononen [XIONG*etal*-03], eine temperaturabhängige Abschirmung [KLAPWIJK&DASSARMA-99, DASSARMA&HWANG-99, ZALA*etal*-01], ein klassischer Perkolationseffekt [HE&XIE-98] und Quantenperkolationseffekte [MEIR-99, MEIR-01, NAZARENO*etal*-02] im Zusammenhang mit solchen Prozessen vorgeschlagen. In diesem Fall wäre der Metall-Isolator-Übergang nur ein scheinbarer Phasenübergang in einem begrenzten Temperaturbereich, und bei noch tieferen Temperaturen würde sich wieder ein Bereich mit schwacher Lokalisierung anschließen. Für Letzteres gibt es auch experimentelle Hinweise [SIMMONS*etal*-00, SENZ*etal*-00, PROSKURYAKOV*etal*-02]. Experimentelle Hinweise auf temperaturabhängige Abschirmung und Perkolationseffekte finden beispielsweise [PUDALOV*etal*-03] bzw. [WIEBE*etal*-03, NOH*etal*-04]. Gegen diese Effekte spricht aber, dass der Widerstand stark von der Polarisierung der Elektronen durch ein äußeres Magnetfeld abhängt, denn die Effekte sind primär nicht vom Spin abhängig. Schließlich gibt es auch den Vorschlag, die lokalisierte Phase sei ein durch Temperatureffekte verursachter Zwischenbereich mit stärkerer Lokalisierung, während die so genannte metallische Phase in Wirklichkeit der normale Bereich mit schwacher Lokalisierung ist [DASSARMA&HWANG-03].

Da in den betrachteten Systemen sowohl die Unordnung als auch die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen eine wesentliche Rolle spielen, werde ich in dieser Arbeit zunächst die Auswirkungen von Unordnung verschiedener Art auf die Lokalisierung in niederdimensionalen Elektronensystemen untersuchen (Anderson-Modell) und dann das Wechselspiel von starker Unordnung und starken Elektron-Elektron-Wechselwirkungen (Anderson-Hubbard-Modell) auch mit einem zusätzlichen parallelen Magnetfeld betrachten. Damit gehe ich der Frage nach, ob bzw. inwieweit die beiden Komponenten Unordnung und Elektron-Elektron-Wechselwirkungen die experimentellen Befunde erklären können. Den Abschluss des zweiten Teils der Arbeit bilden Betrachtungen zu Lokalisierungsphänomenen in Quantenpunkten in Kontakt mit Drähten, wobei wiederum Unordnung und Elektron-Elektron-Wechselwirkungen im Mittelpunkt stehen.

### III.B. Das Anderson-Modell für ungeordnete Elektronensysteme

Das Anderson-Modell wurde 1958 als „einfaches Modell für solche Prozesse wie Spin-Diffusion oder Leitfähigkeit im Störstellen-Band“ oder allgemeiner „in bestimmten zufälligen Gittern“ von Philip Warren Anderson vorgeschlagen [ANDERSON-58]. Das wesentliche Ergebnis war, dass die Quanten-Diffusion unter gewissen Umständen durch Unordnung im System vollständig unterbunden wird. Damit wurde erstmals gezeigt, dass in hinreichend stark ungeordneten Systemen Lokalisierung auftreten kann. Das Modell basiert auf der Schrödinger-Gleichung in Tight-Binding-Näherung, und inzwischen wurden viele Erweiterungen untersucht. Es ist aufgrund des Umfangs nicht möglich, hier einen vollständigen Überblick über das eigentliche Anderson-Modell und seine Erweiterungen zu geben; selbst Übersichtsartikel [ECONOMOU-90, KRAMER&MACKINNON-93, JANSSEN-98] müssen sich auf ausgewählte Aspekte des ursprünglichen Modells beschränken. Bei dreidimensionalen Gittern zeigt das Modell einen Übergang von lokalisierten zu ausgedehnten Zuständen; deshalb wird es zur Beschreibung des Metall-Isolator-Übergangs in dreidimensionalen ungeordneten Systemen verwendet. Ein Problem ist das Fehlen eines Übergangs in zweidimensionalen Systemen (außer mit magnetischem Feld), das im Widerspruch zu den im vorhergehenden Abschnitt behandelten experimentellen Ergebnissen zu stehen scheint.

#### III.B.1. Die Schrödinger-Gleichung in Tight-Binding-Näherung

Zur Beschreibung von Elektronen im Festkörper gibt es zwei grundsätzlich verschiedene Ansätze. Der erste ist das *Modell des fast freien Elektrons*. Es ist besonders zur Beschreibung von Elektronen in Metallen geeignet. Dabei geht man davon aus, dass sich die Leitungselektronen im Wesentlichen frei im Festkörper bewegen können. Die Ionenrümpfe und die anderen Elektronen in dem periodischen Gitter verursachen ein effektives periodisches Potenzial  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{r}_n)$ , wobei  $\mathbf{r}_n$  ein beliebiger Vektor des Gitters ist. Dieses Potenzial wird angenommen oder selbstkonsistent bestimmt. Die Lösungen der Schrödinger-Gleichung haben dann nach dem Blochschen Theorem die Form  $\Psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$ , wobei  $\psi(\mathbf{r})$  die gleiche Periodizität wie das Gitter hat. Die Berechnung der elektronischen Eigenzustände im Festkörper erfolgt durch Lösen der kontinuierlichen Schrödinger-Gleichung  $[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$  für eine Einheitszelle mit Randbedingungen entsprechend dem Blochschen Theorem. Das Modell fast freier Elektronen kann aber nur bei nicht ungeordneten Festkörpern mit überschaubarer Einheitszelle verwendet werden, denn sonst müsste man wegen der fehlenden Symmetrie die kontinuierliche Schrödinger-Gleichung für den ganzen Festkörper lösen, und das wäre zu aufwendig.

Bei dem zweiten Ansatz zur Beschreibung von Elektronen im Festkörper, dem „*Tight-Binding*“-Modell (tight binding = feste Bindung), wählt man den umgekehrten Weg und geht von einzelnen Atomen aus. Für ein einzelnes Atom gibt es zahlreiche diskrete Elektronen-Eigenzustände, die alle um den Atomkern lokalisiert sind. Diese Eigenzustände sind Lösungen der Schrödinger-Gleichung mit dem atomaren Hamilton-Operator  $H_{\text{Atom}}$ ,  $H_{\text{Atom}} |\psi_k^{(A)}\rangle = \epsilon_k |\psi_k^{(A)}\rangle$ . Beim Tight-Binding-Modell nimmt man an, dass die atomaren Eigenfunktionen  $|\psi_k^{(A)}\rangle$  räumlich stark lokalisiert sind, so dass  $\psi_k^{(A)}(\mathbf{r})$  schon klein ist, wenn  $r = |\mathbf{r}|$  so groß wie die Gitterkonstante  $a$  wird. In diesem Idealfall beeinflussen sich benachbarte Atome im Festkörper nur wenig, und es gibt komplexe Koeffizienten  $\psi_n$  für alle Gitterplätze  $n$  so, dass  $\psi_n \psi_k^{(A)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$  in der Nähe des Gitterplatzes  $\mathbf{r}_n$  eine gute Näherung für die Gesamt-Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{r})$  ist. Für die elektronische Wellenfunktion im Festkörper macht man dann den Ansatz einer Linearkombination solcher atomarer Eigenfunktionen:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n \psi_n \psi_k^{(A)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) \quad \text{oder} \quad |\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle. \quad (\text{III.B.1})$$

In der zweiten Form steht schlicht  $|n\rangle$  für den atomaren Eigenzustand  $|\psi_k^{(A)}\rangle$  an der Gitterposition  $n$ , wodurch zusätzlich unterschiedliche Eigenzustände bzw. unterschiedliche Atome an den ver-

schiedenen Gitterpositionen berücksichtigt werden können. Bei dem Ansatz (III.B.1) wird davon ausgegangen, dass pro Atom immer nur *ein* atomarer Eigenzustand zu dem globalen Eigenzustand beiträgt; das Tight-Binding-Modell beschreibt dann nur ein Band. Die atomaren Eigenzustände sollen bei der Tight-Binding-Näherung räumlich so schnell abfallen, dass sie kaum überlappen und als orthogonal aufgefasst werden können,  $\langle n|m \rangle = \delta_{n,m}$ .

Zur Herleitung der Tight-Binding-Gleichung schreibt man den Hamilton-Operator für den Festkörper aus vielen Atomen als Summe aller atomaren Hamilton-Operatoren, die nur auf ihre atomaren Wellenfunktionen  $|n\rangle$  wirken, plus einem Operator für die Wechselwirkung der Atome,

$$H = \sum_n H_{\text{Atom } n} + H_{\text{Wechselwirkung}}. \quad (\text{III.B.2})$$

Da für jedes Atom nur ein Eigenzustand eingeht, nämlich  $|n\rangle$ , kann (III.B.2) unter Ausnutzung der atomaren Eigenwertgleichung  $H_{\text{Atom } n}|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle$  umgeschrieben werden zu

$$H = \sum_n |n\rangle \epsilon_n \langle n| - \sum_{n,m} |n\rangle t_{n,m} \langle m| \quad \text{mit} \quad t_{n,m} = -\langle n| H_{\text{Wechselwirkung}} |m\rangle. \quad (\text{III.B.3})$$

Setzt man den Ansatz (III.B.1) und den Hamilton-Operator (III.B.3) in die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  ein und multipliziert von links mit  $\langle n|$ , so ergibt sich unter Ausnutzung von  $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$  die „Tight-Binding“-Gleichung:

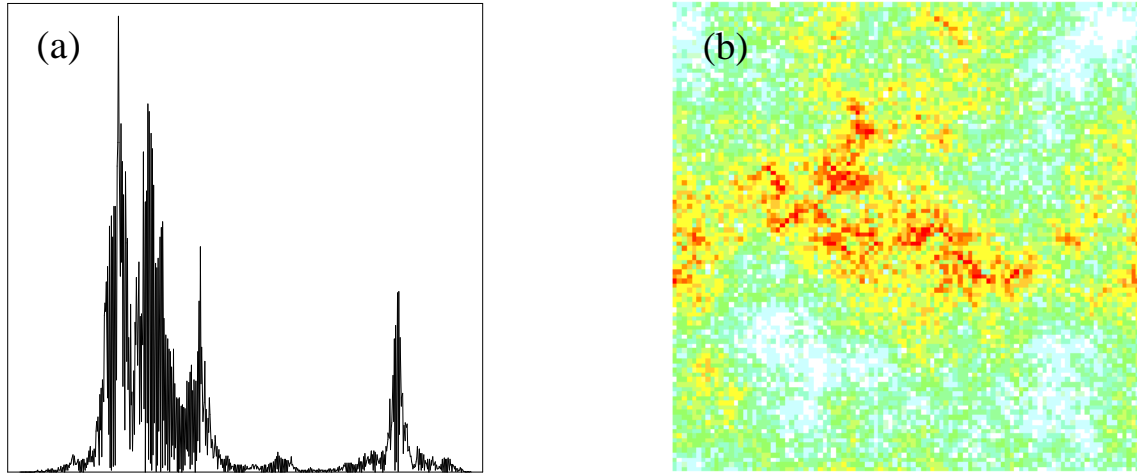
$$E \psi_n^{(E)} = \epsilon_n \psi_n^{(E)} - \sum_{\text{Nachbarn } m} t_{n,m} \psi_m^{(E)} \quad (\text{III.B.4})$$

In der Praxis beschränkt man sich bei der Summe auf nächste Nachbarn von Gitterplatz  $n$ , denn die atomaren Wellenfunktionen weiter entfernter Atome überlappen so wenig, dass man die Wechselwirkung zwischen ihnen vernachlässigen kann. Die „Tight-Binding“-Gleichung (III.B.4) ist eine Eigenwertgleichung;  $E$  ist der Eigenwert und die  $\psi_n^{(E)}$  sind die zugehörigen Eigenvektoren. Die Diagonalelemente  $\epsilon_n$  sind die Eigenenergien der atomaren Eigenzustände  $|\psi_k^{(A)}\rangle$ , und die Nichtdiagonalelemente  $t_{n,m}$  (aus (III.B.3)) beschreiben die Wechselwirkung der Atome untereinander. Die Wellenfunktionen werden auf  $\sum_n |\psi_n^{(E)}|^2 = 1$  normiert.

#### III.B.2. Das Standard-Anderson-Modell für Einteilchen-Zustände

Beim ursprünglichen Anderson-Modell [ANDERSON-58, ECONOMOU-90, KRAMER&MACKINNON-93] betrachtet man die „Tight-Binding“-Gleichung (III.B.4) für regelmäßige Gitter (lineare Kette, Quadratgitter oder kubisches Gitter), gibt aber den einzelnen Gitteratomen unterschiedliche Eigenschaften, beschrieben durch unterschiedliche Koeffizienten  $\epsilon_n$  und  $t_{n,m} = t_{m,n}$ . Diese Koeffizienten bilden eine dünn besetzte, orthogonale Zufallsmatrix. Praktisch wird das Standard-Anderson-Modell in zwei unterschiedlichen Varianten verwendet: Bei der so genannten „diagonalen Unordnung“ werden die Eigenenergien  $\epsilon_n$  der atomaren Eigenzustände (die Potenziale) für jeden Platz zufällig und unkorreliert z.B. entsprechend einer Gleichverteilung mit der Breite  $w$  gezogen,  $-w/2 < \epsilon_n < w/2$ . Die Wechselwirkungsenergien  $t_{n,m} = t_{m,n}$  sind für benachbarte Gitterplätze  $n$  und  $m$  gleich (und sonst 0), so dass man durch  $t = 1$  die Energieeinheit festlegen kann. Der Parameter  $w$  steuert die Stärke der Unordnung und bestimmt im Wesentlichen die Eigenschaften der Anderson-Wellenfunktionen. Bei der zweiten Modellvariante mit „nichtdiagonaler Unordnung“ werden die Diagonalelemente  $\epsilon_n$  alle 0 gesetzt (Energienullpunkt), und die Wechselwirkungsenergien  $t_{n,m}$  (die Nichtdiagonal-Terme) für benachbarte Gitterplätze  $n$  und  $m$  zufällig, meist aus einer Gleichverteilung um den Mittelwert 1 (Energieeinheit), gewählt:  $1 - \frac{w}{2} < t_{n,m} < 1 + \frac{w}{2}$ . Natürlich kann auch diagonale und nichtdiagonale Unordnung kombiniert werden.

Abbildung III.B.1 zeigt Beispiele für Anderson-Wellenfunktionen  $\psi_n^{(E)}$  mit diagonalen Unordnung auf einer linearen Kette und auf dem Quadratgitter, die ich durch Diagonalisierung der Hamilton-Operator-Matrix mit dem Lanczos-Algorithmus [LANCZOS-50, CULLUM&WILLOUGHBY-85] berechnet habe. Abgesehen von den starken Fluktuationen der Wellenfunktionen findet man, dass die



**Abb. III.B.1:** Eigenfunktionen des Anderson-Modells in der Bandmitte bei  $E \cong 0$  (a) für eine lineare Kette mit 600 Plätzen und (b) auf einem  $100 \times 100$  Quadratgitter mit periodischen Randbedingungen. Die Breitenparameter für die diagonale Unordnung sind (a)  $w = 1.0$  und (b)  $w = 7.0$ . In (a) ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $|\psi_n|^2$  linear über der Position aufgetragen und in (b) ist  $|\psi_{x,y}|^2$  farbkodiert mit logarithmischer Skalierung aufgetragen; die rote Farbe markiert die größten Intensitäten ( $|\psi_{x,y}|^2 > 10^{-2}$ ), Orange, Gelb, Grün und Hellblau signalisieren kleinere Intensitäten (in dieser Reihenfolge) und Weiß steht für  $|\psi_{x,y}|^2 < 10^{-15}$ . Neben der Lokalisierung sind die Fluktuationen der Eigenfunktionen gut zu erkennen (nach [KANTELHARDT-99]).

Eigenzustände im Mittel „exponentiell lokalisiert“ sind [KRAMER&MACKINNON-93]. Das bedeutet, dass asymptotisch für große Abstände  $r$  von dem Platz  $n_0$  mit der maximalen Amplitude  $|\psi_{n_0}^{(E)}|$  der Logarithmus der Amplituden  $|\psi_n^{(E)}|$  im Mittel linear abfällt:

$$\left\langle \ln \frac{|\psi_n^{(E)}|}{|\psi_{n_0}^{(E)}|} \right\rangle \equiv \left\langle \ln \frac{|\psi(r)|}{|\psi(0)|} \right\rangle = -\frac{r}{\lambda(w)} \quad \text{für } r \gg \lambda(w). \quad (\text{III.B.5})$$

Der Parameter  $\lambda(w)$  wird als „Lokalisierungslänge“ bezeichnet, denn er gibt an, auf welcher typischen Länge die Wellenfunktionen abfallen. In der Definition (III.B.5) wird der Logarithmus der Wellenfunktionsamplituden  $|\psi_n^{(E)}|$  gemittelt, um das typische Verhalten zu bekommen, das nicht von zufällig besonders großen oder besonders kleinen Amplituden dominiert wird. Daher heißt diese Mittelwertdefinition auch typischer Mittelwert. Die Lokalisierungslänge  $\lambda(w)$  ist für Eigenzustände in der Bandmitte,  $E \cong 0$ , für das Anderson-Modell auf einer linearen Kette analytisch zu bestimmen: Man kann  $\lambda(w)$  aus einer Rekursionsgleichung für die Wellenfunktion, die aus der „Tight-Binding“-Gleichung (III.B.4) folgt, mit Hilfe von Greenschen Funktionen berechnen,  $\lambda(w) \cong 105.045/w^2$  [KAPPUS&WEGNER-81, ECONOMOU-90]. Dieses theoretische Ergebnis wurde von mehreren Autoren auch numerisch getestet, siehe z.B. [PICHARD-86]. Es gibt auch Abschätzungen, die für  $E \neq 0$  gelten:  $\lambda(w) \approx 24(4 - E^2)/w^2$  [THOULESS-79], siehe auch [HOFFMANN&SCHREIBER-96]. An den Bandkanten gilt ein anderer Zusammenhang [RUBetal-98].

Auch beim klassischen zweidimensionalen Anderson-Modell wurden in numerischen Simulationen nur lokalisierte Eigenzustände gefunden [MACKINNON&KRAMER-83, KRAMER&MACKINNON-93, ZHAREKESHEVetal-96, BATSCHE-97, MARKOSetal-04], wenn man von der Bandmitte ( $E = 0$ ) bei nichtdiagonaler Unordnung absieht, wo das Lokalisierungsverhalten kritisch ist [EILMESetal-98]. Die Lokalisierungslänge  $\lambda(w)$  ist nicht analytisch bekannt. Es gibt zwar eine auf der Signaltheorie basierende analytische Rechnung, die auch Aussagen über die Lokalisierungslänge und insbesondere deren Divergieren bei bestimmten Energien für kleine Unordnungsstärken umfasst [KUZOVOVetal-02], aber die Vorhersagen dieser Rechnungen stimmen nicht mit numerischen Ergebnissen überein und sind möglicherweise auf eine unzulässige Symmetrieerweiterung zurückzuführen

[MARKOS*etal*-04]. In der Literatur stehen mehrere unterschiedliche Aussagen über die numerischen Werte der Lokalisierungslänge und die Abhängigkeit von der Unordnungsbreite  $w$  nebeneinander [MACKINNON&KRAMER-83, ZHAREKESHEV*etal*-96, BATSCH-97].

Kürzlich wurde für das Standard-Anderson-Modell die Lokalisierung in dünnen Filmen in Abhängigkeit vom Magnetfeld  $B$  und von der Filmdicke mit numerischen und mit zwei verschiedenen analytischen Methoden untersucht [BROJEN-SINGH&KUMAR-02, BROJEN-SINGH&KUMAR-04]. Während die numerischen Ergebnisse auf eine mögliche metallische Phase auch bei  $T = 0$  hindeuten, zeigt die eine analytische Betrachtung nur lokalisierte Zustände, aber gleichzeitig einen Übergang in Abhängigkeit von  $B$  bei endlichen Temperaturen (d.h. endlichen Phasenkohärenzlängen), während die andere analytische Betrachtung für  $B > 0$  ausgedehnte Zustände auch bei  $T = 0$  nicht ausschließt. Die Diskrepanz zwischen numerischen und analytischen Ergebnissen wird auf Unterschiede zwischen dem diskreten und kontinuierlichen Anderson-Modell zurückgeführt.

Beim dreidimensionalen Anderson-Modell, das meist auf dem kubisch primitiven Gitter mit diagonalen Unordnung verwendet wird, gibt es einen Delokalisierungs-Lokalisierungs-Übergang [MACKINNON&KRAMER-81], der physikalisch einem Metall-Isolator-Übergang entspricht [LEE&RAMAKRISHNAN-85, IMADA*etal*-98]. Bis zu einer kritischen Unordnungsbreite  $w_c \approx 16.5$  [MACKINNON&KRAMER-83, SCHREIBER&GRUSSBACH-91, HOFSTETTER&SCHREIBER-94, GRUSSBACH&SCHREIBER-95, SLEVIN&OHTSUKI-99], dem kritischen Punkt, sind die elektronischen Eigenzustände ausgedehnt, das heißt ihre Lokalisierungslänge  $\lambda$  ist unendlich, und man beobachtet keinen exponentiellen Abfall der Wellenfunktionsamplituden. Oberhalb des kritischen Punktes (für starke Unordnung  $w > w_c$ ) sind die Zustände wieder lokalisiert. Beim Anderson-Modell mit nichtdiagonaler Unordnung in  $d = 3$  sind die Zustände nur in der Nähe der Bandkanten lokalisiert, und sonst unabhängig von der Unordnungsbreite ausgedehnt [CAIN*etal*-99]. Direkt am kritischen Punkt sind die elektronischen Wellenfunktionen im Anderson-Modell in  $d = 3$  multifraktal [SOUKOULIS&ECONOMOU-84, EVANGELOU-90, SCHREIBER-90, SCHREIBER&GRUSSBACH-91, HUCKESTEIN&SCHWEITZER-94, GRUSSBACH&SCHREIBER-95, HUCKESTEIN&KLESSE-97]. Das heißt vereinfacht ausgedrückt, dass die verschiedenen Momente der Eigenfunktionsamplituden  $(\psi_n^{(E)})^q$  den Raum nicht in gleicher Weise, sondern mit unterschiedlichen fraktalen Dimensionen  $D(q)$  füllen. Aufgrund der stark voneinander abweichenden Multifraktalitätsexponenten  $D(q = 2)$  in den verschiedenen Arbeiten wurde postuliert, dass sogar für jede einzelne Eigenfunktion ein unterschiedlicher Satz multifraktaler Dimensionen  $D(q)$  zur Beschreibung notwendig ist [PARSHIN&SCHÖBER-99]. Auch in den neusten Arbeiten wurde in dieser Frage noch kein eindeutiges Bild erzielt [EVERS&MIRLIN-00, VARGA-02, MILDENBERGER*etal*-02, OBUSE&YAKUBO-04].

Während die Struktur der Eigenfunktionen am kritischen Punkt also intensiv untersucht wurde, hat man sich bei den lokalisierten Zuständen mit der Annahme eines einfach exponentiellen Abfalls und einer Angabe der Lokalisierungslänge nach (III.B.5) begnügt. Die – wie Abbildung III.B.1 zeigt – auch bei lokalisierten Zuständen sehr wesentlichen Fluktuationen der Amplituden wurden bisher kaum näher untersucht.

#### III.B.3. Die Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung

Die Existenz eines gewöhnlichen Lokalisierungs-Delokalisierungs-Übergangs nur für Raumdimensionen  $d > 2$  folgt allgemein aus der Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung [ABRAHAM*etal*-79], siehe auch [LEE&RAMAKRISHNAN-85, KRAMER&MACKINNON-93]. Die wesentliche Annahme dieser Skalentheorie ist, dass es nahe dem Übergang von lokalisierten zu ausgedehnten Zuständen nur eine einzige relevante Skalenvariable gibt, mit der sowohl die Leitfähigkeit (auf der metallischen Seite) als auch die Lokalisierungslänge (auf der isolierenden Seite) beschrieben werden können. Physikalisch bedeutet diese Annahme, dass nahe dem Übergang nicht verschiedene Lokalisierungsmechanismen unterschieden werden. Um die Leitfähigkeit  $g(L)$  eines Hyper-

Würfels mit dem Volumen  $L^d$  zu beschreiben, wird angenommen, dass der effektive Exponent  $\beta$  aus

$$g(L) \sim L^{\beta(g)} \Leftrightarrow \beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (\text{III.B.6})$$

nur von der Leitfähigkeit  $g$  selbst abhängt, aber *nicht explizit* von  $L$ , von der Unordnung oder von der Energie. Die Skalenfunktion  $\beta(g)$  ist für die Grenzfälle sehr kleiner und sehr großer Unordnung bekannt, die sehr großen bzw. sehr kleinen  $g$  entsprechen. Im metallischen Bereich gilt das Ohmsche Gesetz  $g(L) \sim \sigma L^{d-2}$  mit der spezifischen Leitfähigkeit  $\sigma$ , und daher  $\beta(g) = d - 2$ , siehe Abb. III.B.2. Im isolierenden Bereich nimmt die Leitfähigkeit exponentiell mit wachsender Systemgröße  $L$  ab,  $g(L) \sim \exp[-L/\lambda]$ , und daher  $\beta(g) = -\frac{1}{\lambda} \frac{dL}{d \ln L} = -\frac{L}{\lambda} = \ln g$ . Zwischen diesen Grenzfällen wird stetig interpoliert. Wegen  $g(L) \sim L^\beta$  bestimmt der Exponent  $\beta$  das Lokalisierungsverhalten im Grenzfall unendlicher Systemgröße: Für  $\beta < 0$  sind die Zustände lokalisiert, für  $\beta > 0$  ausgedehnt, und bei  $\beta = 0$  ist man am Übergangspunkt. Abbildung III.B.2 zeigt daher, dass es nur für  $d > 2$  einen Übergang zu ausgedehnten Zuständen geben kann, weil für  $d \leq 2$  die Kurven vollständig im Bereich nicht positiver  $\beta$  liegen. Der unordnungs-induzierte Metall-Isolator-Übergang in  $d = 3$  erfolgt außerdem immer bei der gleichen (systemgrößenunabhängigen) kritischen Leitfähigkeit  $g_c$ , wenn die Skalenfunktion  $\beta(g)$  universell ist, das heißt nur von der Raumdimension  $d$  abhängt. Diese Ergebnisse der Skalentheorie der Lokalisierung wurden sowohl numerisch für das Anderson-Modell als auch in zahlreichen Experimenten erfolgreich überprüft (siehe z.B. [LEE&RAMAKRISHNAN-85, KRAMER&MAC-KINNON-93]), wobei besonders wichtig war, dass  $g_c$  konstant ist.

Um zusätzlich zum Lokalisierungsverhalten auch das Fluktuationsverhalten untersuchen zu können, wurde die Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung schon früh erweitert [ANDERSON*et al.*-80]. Man betrachtete in der erweiterten Standard-Form im Rahmen der Zufalls-Phasen Hypothese (siehe [DEYCH*et al.*-00, DEYCH*et al.*-01]) den Parameter

$$\tilde{\gamma}(L) = \frac{1}{2L} \ln(1 + 1/g). \quad (\text{III.B.7})$$

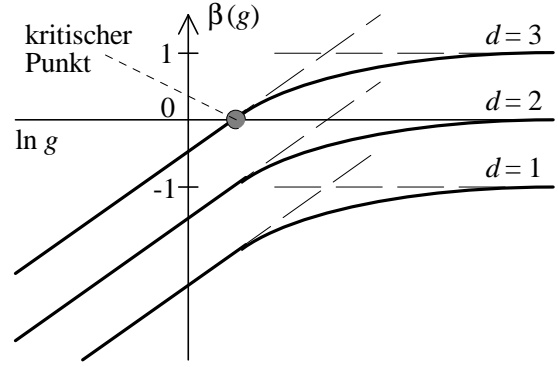
Es wurde gezeigt, dass der Mittelwert von  $\tilde{\gamma}(L)$  für große Systeme gegen die inverse Lokalisierungslänge, den Lyapunov-Exponenten  $\gamma$ , konvergiert,

$$\langle \tilde{\gamma}(L) \rangle = \lambda^{-1} = \gamma \quad \text{für } L \gg \lambda, \quad (\text{III.B.8})$$

während die Fluktuationen von  $\tilde{\gamma}(L)$  (die Varianz) wie  $1/L$  verschwinden,

$$\langle \tilde{\gamma}^2(L) \rangle - \langle \tilde{\gamma}(L) \rangle^2 = 1/\lambda L = \gamma/L \quad \text{für } L \gg \lambda. \quad (\text{III.B.9})$$

Daher charakterisieren der Lyapunov-Exponent  $\gamma$  oder die Lokalisierungslänge  $\lambda$  vollständig das asymptotische Skalenverhalten der Verteilung von  $\tilde{\gamma}(L)$ , d.h. ein einziger Parameter reicht aus zur Beschreibung der Lokalisierungstärke und der Fluktuationen. Bisher wurde in numerischen Simulationen anhand des Anderson-Modells hauptsächlich Gl. (III.B.8) getestet, aber nicht Gl. (III.B.9). In jüngster Zeit hat sich die Diskussion um die Gültigkeit der Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung wieder belebt, was unter anderem auf die experimentellen Ergebnisse zum Metall-



**Abb. III.B.2:** Zur Skalentheorie der Lokalisierung: Die  $\beta(g)$ -Funktion für die  $T = 0$  - Leitfähigkeit  $g$  ungeordneter Systeme mit der Dimension  $d = 1$  bis 3. Die Bedingung  $\beta = 0$  legt den kritischen Punkt in  $d = 3$  fest, der dem Anderson-Übergang entspricht; ein solcher Punkt existiert nur für  $d > 2$ . Für  $\beta < 0$  sind die Zustände lokalisiert.

Isolator-Übergang in zweidimensionalen Systemen zurückzuführen ist (siehe Abschnitt III.A), denn ein solcher Übergang wäre nach der Theorie nicht möglich. Die Skalentheorie wurde unter der Annahme von Korrekturen in der Skalenfunktion  $\beta(g) = d - 2 + A/g^\alpha + \dots$  für große Leitfähigkeiten  $g \rightarrow \infty$  mit  $A > 0$  auf die neuen Experimente angewendet [DOBROSAVLJEVICetal-97], siehe auch [SHENG&WENG-99].

Auf der Seite der Simulationen wurden vor allem eindimensionale Systeme betrachtet, um die Gültigkeit der Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung zu überprüfen. Für das Lloyd-Modell, das mit dem klassischen eindimensionalen Anderson-Modell übereinstimmt bis auf eine Cauchy-Verteilung der Diagonalelemente  $\epsilon_n$ , wurde gezeigt, dass die Zustände an der Bandkante kein Ein-Parameter-Skalenverhalten zeigen und dass eine neue Längenskala, die von der Anzahl der Zustände bis zur Bandkante abhängt, für die Abweichungen verantwortlich ist [DEYCHetal-00, DEYCHetal-01]. Außerdem zeigte sich, dass im Inneren des Bandes die Fluktuationen doppelt so groß sind wie Gl. (III.B.9) angibt, dass dort aber sonst keine Verletzungen der Skalentheorie vorliegen. Auch bei der Statistik der Wellenfunktionsamplituden, der Leitfähigkeiten und in der lokalen Zustandsdichte gibt es Anomalien [TITOV&SCHOMERUS-03].

Für das klassische eindimensionale Anderson-Modell selbst konnte nachgewiesen werden, dass es ebenfalls einen Bereich an den Bandkanten gibt, in dem die Ein-Parameter-Skalentheorie nicht gilt. Dort kann aber die Verteilung der Leitfähigkeiten wieder durch eine Skalentheorie beschrieben werden, in der das Verhältnis von Lokalisierungslänge und neuer, auf die Zustandsdichte bezogener Längenskala als Variable auftritt [DEYCHetal-02]. Auch in der Bandmitte ( $E = 0$ ) des klassischen eindimensionalen Anderson-Modells gibt es Abweichungen von der Ein-Parameter-Skalentheorie [SCHOMERUS&TITOV-03]. Dort bricht wie an der Bandkante die Zufalls-Phasen-Hypothese zusammen, die eine Grundlage der Ein-Parameter-Skalentheorie ist. In [DEYCHetal-03] wurden diese Ergebnisse erklärt, indem die Bandmitte als Berührungspunkt von eigentlich zwei Bändern aufgefasst wird, für den dann auch die Skalentheorie mit dem Verhältnis von Lokalisierungslänge und neuer, auf die Zustandsdichte bezogener Längenskala gilt. Weiterhin finden [VAGNERetal-03] für die Leitfähigkeiten eines eindimensionalen Drahtes Abweichungen von der Ein-Parameter-Skalentheorie, die vor allem die Schwänze der Leitfähigkeits-Verteilungen betreffen, aber sich auch im Zentrum der Verteilung bemerkbar machen. Solche Abweichungen wurden experimentell bei Messungen an quasi-eindimensionalen Golddrähten bestätigt, die eine klare Asymmetrie der Leitfähigkeitsverteilungen erbrachten im Widerspruch zur Ein-Parameter-Skalentheorie [MOHANTY&WEBB-02]. Für zweidimensionale Modelle wurden allerdings solche Abweichungen kaum untersucht, weder durch Simulationen, noch experimentell.

#### III.B.4. Verallgemeinerte Anderson-Modelle mit Korrelationen

Neben dem klassischen Anderson-Modell mit unkorrelierten zufälligen Potenzialen  $\epsilon_n$  oder Nichtdiagonalelementen  $t_{n,m}$  besteht besonderes Interesse an verschiedenen verallgemeinerten Modellen mit ungeordneten, aber räumlich korrelierten Potenzialen  $\epsilon_n$ . Korrelationen treten in vielen realen ungeordneten Festkörpern auf, wie z.B. in Polymeren, sowie in porösen und amorphen Materialien. Ein Grund dafür können z.B. chemische Bindungen sein, bei denen es nicht nur auf die unmittelbaren Bindungspartner ankommt, sondern auch auf die näheren Umgebungen, so dass bestimmte Anordnungen bevorzugt und kurzreichweitige Korrelationen hervorgerufen werden. Modelle mit räumlich korrelierten Potenzialen weisen zum Teil auch bei ein- und zweidimensionalen Systemen ausgedehnte Zustände auf, die nur durch die Korrelationen zustande kommen. Bei den eindimensionalen Systemen liegt ein besonderes Interesse auf der Folge der Basenpaare in der DNS, die die Erbinformation speichert; auch dort spielen Korrelationen eine Rolle (siehe Abschnitt II.C.1).

Das einfachste Modell mit zufälligem, kurzreichweitig korreliertem Potenzial ist das Dimer-Modell [DUNLAPetal-90]. Die Potenziale  $\epsilon_n$  haben eine binäre Verteilung,  $\epsilon_n \in \{\epsilon_A, \epsilon_B\}$ , und  $\epsilon_A$  (oder auch

$\epsilon_B$ ) tritt immer nur paarweise auf, z.B.  $\epsilon_A, \epsilon_A, \epsilon_B, \epsilon_A, \epsilon_A, \epsilon_A, \epsilon_A, \epsilon_B, \epsilon_B, \epsilon_A, \epsilon_A, \epsilon_B, \epsilon_A, \epsilon_A, \dots$ . Die Nichtdiagonal-Terme  $t_{n,m}$  in der Tight-Binding-Gleichung (III.B.4) werden für nächste Nachbarn alle gleich 1 gesetzt. Durch numerisches Lösen der zeitabhängigen Tight-Binding-Gleichung für ein lokalisiertes Wellenpaket als Anfangsbedingung konnte gezeigt werden, dass für  $-2 < \epsilon_A - \epsilon_B < 2$  das mittlere Verschiebungsquadrat des Wellenpakets proportional zu  $t^{3/2}$  ansteigt, und daher ausgedehnte Zustände existieren müssen. Für  $|\epsilon_A - \epsilon_B| = 2$  ist die Ausbreitung diffusiv, und sonst sind alle Zustände lokalisiert. Die lokalisierten Zustände weisen teilweise Abweichungen von einer exponentiellen Form der lokalisierten Eigenfunktionen auf [IZRAILEV*etal*-96, VARGA&PIPEK-98]. Die Anzahl der ausgedehnten Zustände ist nach [FLORES&HILKE-93, HUANG*etal*-97] proportional zu  $\sqrt{L}$ , wobei  $L$  die Länge der betrachteten linearen Kette ist. Daher wird der Anteil ausgedehnter Zustände an der Gesamtzahl  $L$  der Zustände für große Systeme ( $L \rightarrow \infty$ ) vernachlässigbar [HILKE&FLORES-97] und sollte in makroskopischen Systemen keine Rolle spielen. In einer analytischen Arbeit [SEDRAKYAN-04] wurde kürzlich allerdings berichtet, dass nur an den beiden Punkten  $E = \epsilon_A$  und  $E = \epsilon_B$  wirklich ausgedehnte Zustände auftreten (falls  $|\epsilon_A - \epsilon_B| \leq 2$ ), so dass man eigentlich nicht von einem Metall-Isolator-Übergang sprechen kann. In einer experimentellen Arbeit wurden an Halbleiter-Übergittern mit Dimer-Struktur erhöhte elektrische Leitfähigkeiten gegenüber einer unkorrelierten Vergleichsprobe gefunden und als experimenteller Nachweis der ausgedehnten Zustände präsentiert [BELLANI*etal*-99]. Halbleiter-Übergitter werden mit Molekularstrahl-Epitaxie hergestellt und bestehen aus bis zu 400 Schichten von abwechselnd GaAs und AlGaAs, die wenige Nanometer dick sind und wegen der unterschiedlichen Bandlücken der beiden Materialien Quantentöpfe bilden. Für die Dimer-Struktur wurde das lokale Potenzial über die Breite der Quantentöpfe eingestellt. Ein Beweis für ausgedehnte Zustände sind diese Experimente aber keineswegs.

Schon vor den zufälligen Dimer-Modellen wurden verallgemeinerte langreichweitig korrelierte Anderson-Modelle mit inkommensurablen bzw. quasiperiodischen Potenzialen untersucht; einen Überblick geben [HIRAMOTO&KOHMOTO-92]. In solchen Systemen sind die Platz-Energien  $\epsilon_n$  durch eine *nicht* zufällige, periodische Funktion gegeben,  $\epsilon_n = f(n\omega)$ , deren Periode  $2\pi/\omega$  inkommensurabel mit der Gitter-Periodizität ist, was bedeutet, dass  $\omega$  eine irrationale Zahl ist. Am häufigsten wird hier das Harper-Modell verwendet, bei dem  $f(n\omega) = \frac{w}{2} \cos(n\omega)$  gesetzt ist. In diesem Modell sind für  $w < 4$  alle Eigenzustände ausgedehnt, bei  $w_c = 4$  sind sie kritisch und darüber lokalisiert [AUBRY&ANDRE-80]. Interessant ist bei den quasiperiodischen Potenzialen das Auftreten multifraktaler Eigenzustände am kritischen Punkt [SIEBESMA&PIETRONERO-87]. Ebenfalls langreichweitige, räumlich nicht abklingende Korrelationen im Potenzial mit einer zusätzlichen Zufallskomponente wurden kürzlich von [HILKE-03] untersucht, der ein zweidimensionales Anderson-Modell betrachtet mit Störstellen, die zufällig auf einem (Über-) Gitter mit größerer Gitterkonstante verteilt sind. Dafür tritt ein Übergang zu ausgedehnten Zuständen in Abhängigkeit vom Anteil der korrelierten Störstellen auf. Auch das Fibonacci-Modell, bei dem die Potenziale nach der Fibonacci-Reihe gewählt sind,  $\epsilon_A \rightarrow \epsilon_A \epsilon_B \rightarrow \epsilon_A | \epsilon_A \epsilon_B \rightarrow \epsilon_A \epsilon_B | \epsilon_A \epsilon_A \epsilon_B \rightarrow \epsilon_A \epsilon_A \epsilon_B | \epsilon_A \epsilon_B \epsilon_A \epsilon_A \epsilon_B \rightarrow \dots$ , zählt zu den quasiperiodischen Anderson-Modellen und wurde vielfach untersucht [KOHMOTO-83, OSTLUND-83]. Es weist ausschließlich kritische Zustände auf. Experimentell realisiert wurde ein Halbleiter-Übergitter mit Schichten nach dem Fibonacci-Modell in der 13. Generation [MERLIN*etal*-85]. Dafür wurden mit Röntgenbeugung und Raman-Streuung potenzgesetzartige Singularitäten im Spektrum nachgewiesen.

Weiterhin wurde die inverse Lokalisierungslänge mit analytischer Störungstheorie für eindimensionale Systeme mit stationären langreichweitig korrelierten Potenzialen berechnet mit Energien nicht nahe an den Bandkanten oder der Bandmitte [IZRAILEV&KROKHIN-99, IZRAILEV*etal*-01]. Es wurde dabei gezeigt, wie sich Potenziale  $\epsilon_n$  konstruieren lassen, für die es einen Lokalisierungs-Delokalisierungs-Übergang gibt. Allerdings wurde das Ergebnis in der Nachfolgearbeit [IZRAILEV&MAKAROV-03] etwas relativiert, indem auch für den so genannten delokalisierten Bereich eine Lokalisie-



rungslänge eingeführt wird, die zwar größer als die Systemgröße, aber eben doch endlich ist. Daher würde ich eher von Übergängen zwischen starker und schwacher Lokalisierung sprechen, die nicht im Widerspruch zur Skalentheorie der Lokalisierung stehen, wie die Autoren auch einräumen. Die Übergänge wurden durch Mikrowellen-Transmissions-Experimente in Wellenleitern mit eingebauten, korrelierten Streuzentren nachgewiesen [KUHLetal-00].

Das Anderson-Modell mit zufälligen, langreichweitig korrelierten Potenzialen wurde auch gründlich untersucht [RUBetal-99, RUB-02]. Hier gibt es zwar keine ausgedehnten Zustände, aber die Lokalisierungslänge wird in der Nähe der Bandkante so groß, dass es schwierig ist, die Lokalisierung nachzuweisen. Weiterhin gilt in der Nähe der Bandkante eine andere Skalentheorie als in der Bandmitte, weil dort auch die Wellenlänge der Zustände als zweiter Parameter neben der Lokalisierungslänge berücksichtigt werden muss. In der Skalentheorie tritt dann das Verhältnis von Lokalisierungslänge und Wellenlänge auf, und zwar in ähnlicher Art wie das Verhältnis von Lokalisierungslänge und neuer, auf die Zustandsdichte bezogener Längenskala beim Anderson-Modell ohne Korrelationen [DEYCHetal-00, DEYCHetal-01, DEYCHetal-02].

Insgesamt scheinen auch die Anderson-Modelle mit korrelierten Potenzialen in eindimensionalen Systemen keine wirklich ausgedehnten, sondern eher schwach lokalisierte Zustände hervorzubringen, die der Ein-Parameter-Skalentheorie genügen, soweit die Modelle nicht deterministisch sind. Trotzdem tauchen immer wieder Publikationen auf, in denen von ausgedehnten Zuständen in solchen Modellen berichtet wird. Einen gewissen Schwerpunkt bilden dabei Arbeiten zu Anderson-Modellen mit selbst-affinen Potenzialen [DEMOURAetal-98, DEMOURAetal-99, CARPENAetal-02, YAMADA-04], bei denen die Korrelationen so stark sind, dass die Autokorrelationsfunktion  $C(s)$  nicht definiert werden kann, weil die Bedingung der Stationarität nicht erfüllt ist. Das Potenzial  $\varepsilon_n$  am Platz  $n$  ergibt sich bei selbst-affinen Systemen aus dem vorhergehenden Potenzial  $\varepsilon_{n-1}$  in der Kette plus einem Inkrement  $\delta_m$  mit Mittelwert  $\langle \delta_n \rangle = 0$ ,

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} + \delta_n \quad \text{oder} \quad \varepsilon_n = \varepsilon_0 + \sum_{m=1}^n \delta_m. \quad (\text{III.B.10})$$

Bei unkorrelierten Inkrementen  $\delta_m$  ist das entsprechende selbst-affine Potenzial die Spur eines Irrläufers (Random Walker), und es gilt für das mittlere Verschiebungsquadrat  $\langle (\varepsilon_{n+s} - \varepsilon_n)^2 \rangle \sim s$ . Allgemein, d.h. auch für langreichweitig korrelierte oder antikorrelierte  $\delta_m$ , lässt sich ein selbst-affines Potenzial wie bei den Profilen in der Zeitreihenanalyse (siehe Abschnitt II.A) durch die Exponenten  $\alpha$  und  $\beta$  charakterisieren, wobei (vgl. Glgn. (II.A.5), (II.A.14), (II.A.15) und (II.A.18))

$$\langle (\varepsilon_{n+s} - \varepsilon_n)^2 \rangle \sim s^{2\alpha}, \quad P_\delta(f) \sim f^{-\beta} \quad \text{und} \quad P_\varepsilon(f) \sim f^{-\beta-2} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{1+\beta}{2}. \quad (\text{III.B.11})$$

$P_\varepsilon(f)$  bezeichnet hier das Frequenzspektrum der Potenziallandschaft und  $P_\delta(f)$  das Frequenzspektrum der Inkremente. Eine solche Potenziallandschaft lässt sich am besten mit der Fourier-Filter-Methode erzeugen (siehe Abschnitt II.A.1.c), und zwar entweder für die  $\delta_m$  oder direkt für die  $\varepsilon_n$ . Ein Problem ist, dass die Potenziale nach Gl. (III.B.11) nichtstationär sind, d.h. mit wachsender Systemgröße  $L$  wie  $\langle \varepsilon_n^2 \rangle \sim L^{2\alpha}$  divergieren. Um das zu umgehen, haben [DEMOURAetal-98, DEMOURAetal-99] die Potenziale für jede Systemgröße auf  $\langle \varepsilon_n^2 \rangle = 1$  normiert, [CARPENAetal-02] haben sie auf die Vorzeichen reduziert,  $\varepsilon_n \rightarrow \text{sign}(\varepsilon_n)$ , und [YAMADA-04] hat einen chaotischen Generator mit von vornherein beschränktem Wertebereich verwendet. Die Schlussfolgerungen dieser Autoren in Bezug auf ausgedehnte Zustände diskutiere ich im Zusammenhang mit eigenen Ergebnissen in Abschnitt III.D.

Eine weitere Möglichkeit der Verallgemeinerung des Anderson-Modells, die nun wirkliche ausgedehnte Zustände hervorbringt, besteht darin, die Nichtdiagonalterme  $t_{n,m}$  der Tight-Binding-Gleichung (III.B.4) nicht mehr auf nächste Nachbarn zu beschränken, sondern weitere Sprünge der Elektronen zu erlauben; einen Überblick gibt [MIRLIN-00]. Eine Möglichkeit ist dabei die Ver-

wendung von Potenzgesetz-artig mit dem Abstand der Gitterplätze abfallenden Werten von  $t_{n,m} \sim |\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|^{-\beta}$ , was zu einem Lokalisierungs-Delokalisierungs-Übergang für  $\beta_c = d$  (hier = 2) führt [LEVITOV-89, LEVITOV-90, POTEPA&SCHWEITZER-02]. Es wurde am kritischen Punkt auch eine multifraktale Analyse der Eigenzustände durchgeführt. Weiterhin kann man die Nichtdiagonalelemente  $t_{n,m}$  der Hamilton-Operator-Matrix zufällig aus einer Verteilung wählen mit  $\langle |t_{n,m}| \rangle = 0$  und  $\langle |t_{n,m}|^2 \rangle \sim 1/[1 + (|n - m|/b)^\beta]$ , was ebenfalls kritische Zustände für  $\beta_c = 2$  zur Folge hat [MIRLIN-etal-96, KRAVTSOV&MUTTALIB-97, CUEVAS-02, CUEVAS-03a, CUEVAS-03b], die auch mit einer multifraktalen Analyse charakterisiert wurden.

### III.B.5. Erweitertes Anderson-Modell mit Coulomb-Wechselwirkung

Da in den Messungen der elektrischen Leitfähigkeit von zweidimensionalen Elektronensystemen die Stärke der Elektron-Elektron-Wechselwirkungen groß ist im Vergleich zur Fermi-Energie, ist es sinnvoll auch ein erweitertes Anderson-Modell zu betrachten, bei dem die Coulomb-Wechselwirkungen explizit berücksichtigt sind. Das bedeutet einen wesentlich erhöhten numerischen Aufwand im Vergleich zum Einteilchenmodell, denn jetzt müssen quantenmechanische Vielteilchen-Wellenfunktionen berechnet werden. Um den Aufwand etwas zu begrenzen, wird zunächst ein Modell ohne Spin-Freiheitsgrad betrachtet, in dem alle Elektronen polarisiert sind, d.h. alle Spin-Komponenten senkrecht zur Schicht ( $s_z$ ) in dieselbe feste Richtung ausgerichtet bleiben.

Die Basis der Zustände für das zweidimensionale System kann nun nicht mehr  $|k, j\rangle$  sein und es reicht nicht mehr ein Koeffizient  $\psi_{k,j}$  für jeden Gitterplatz  $(k, j)$  mit den Koordinaten  $k$  und  $j$ . Stattdessen wird die Basis gebildet aus allen möglichen Anordnungen der Elektronen. Da es sich um Fermionen handelt, können in dem zunächst betrachteten Modell ohne Spin-Freiheitsgrad keine zwei Elektronen auf demselben Gitterplatz sein. Trotzdem sind der Rang der Basis und damit auch die lineare Dimension der entsprechenden Hamilton-Operator-Matrix sehr groß. Für ein System aus  $n \times m$  Gitterplätzen (Atomen) und  $N$  Elektronen ( $N \leq nm$  wegen des Fermi-Prinzips, weil jedes Atom nur einen Zustand beiträgt) besteht die Basis aus

$$\binom{nm}{N} = \frac{(nm)!}{(nm - N)! N!} \quad (\text{III.B.12})$$

statt nur  $nm$  Zuständen. Darum ist es geschickter, die Tight-Binding-Näherung der Schrödinger-Gleichung mit Erzeuger- und Vernichter-Operatoren zu schreiben. Aus dem Hamilton-Operator (III.B.3) wird dann

$$H_{\text{non-WW}} = \sum_{k,j} \epsilon_{k,j} \hat{a}_{k,j}^\dagger \hat{a}_{k,j} - t \sum_{k,j} \left[ \hat{a}_{k,j+1}^\dagger \hat{a}_{k,j} + \hat{a}_{k+1,j}^\dagger \hat{a}_{k,j} + \hat{a}_{k,j}^\dagger \hat{a}_{k,j+1} + \hat{a}_{k,j}^\dagger \hat{a}_{k+1,j} \right], \quad (\text{III.B.13})$$

wobei der Operator  $\hat{a}_{k,j}^\dagger$  ein Elektron am Platz  $(k, j)$  erzeugt und  $\hat{a}_{k,j}$  ein solches vernichtet. Hier wurde gleich eine Beschränkung der Nichtdiagonalterme auf nächste Nachbarn und nur diagonale Unordnung vorgenommen;  $t$  kann wieder als Energieeinheit verwendet werden. Hinzu kommt der Term der Coulomb-Wechselwirkung, die alle Elektronenpaare verknüpft und invers proportional zum Abstand der Plätze  $(k, j)$  und  $(l, p)$  ist,

$$H_{\text{WW}} = U \sum_{k,j < l,p} \frac{\hat{a}_{k,j}^\dagger \hat{a}_{k,j} \hat{a}_{l,p}^\dagger \hat{a}_{l,p}}{|\vec{\mathbf{r}}_{k,j} - \vec{\mathbf{r}}_{l,p}|/s} \quad \text{mit} \quad U/t = 2 r_s \sqrt{\frac{\pi N}{nm}}, \quad (\text{III.B.14})$$

wobei  $s$  die Gitterkonstante bezeichnet und  $U$  die (relative) Stärke der Coulomb-Wechselwirkung ist. In der Matrix-Darstellung des Hamiltonoperators  $H = H_{\text{non-WW}} + H_{\text{WW}}$  geht die Coulomb-Wechselwirkung nur in die Diagonalterme ein, weil dadurch keine Elektronen verschoben werden. Die Nichtdiagonalterme sind  $\neq 0$  für alle die Elektronen-Anordnungen, die sich durch die Verschiebung von genau einem Elektron auf einen benachbarten Platz unterscheiden. Damit ist die Matrix trotz

der exakt berücksichtigten Coulomb-Wechselwirkung noch dünn besetzt, und es ist für kleine Systeme möglich, die Vielteilchen-Eigenwerte für  $N$  Elektronen,  $E_\alpha^N$ , und die entsprechenden Eigenfunktionen  $|\alpha^N\rangle$  mit dem Lanczos-Algorithmus [LANCZOS-50, CULLUM&WILLOUGHBY-85] zu berechnen.

In den Experimenten wird meist die Ladungsträgerdichte  $n_s \sim N/nm$  variiert, um den Metall-Isolator-Übergang zu erreichen bzw. zu durchfahren. Das ist in der Simulation mit dem erweiterten Anderson-Modell nicht möglich, weil die Anzahl  $N$  der Elektronen, die mit der derzeit verfügbaren Rechenkapazität für die Vielteilchen-Wellenfunktionen berücksichtigt werden können, zu gering ist. Die Dichte  $N/nm$  könnte nur in viel zu großen Sprüngen geändert werden, und die Simulationen wären dann nicht vergleichbar. Stattdessen wird in den Simulationen die Wechselwirkungsstärke  $U$  verändert (was experimentell natürlich nicht möglich ist) während die anderen Parameter konstant gelassen werden. Da das entscheidende Verhältnis  $r_s$  von Coulomb- und Fermi-Energie nach Gl. (III.B.14) sowohl zu  $(n_s)^{-1/2}$  als auch zu  $U$  proportional ist, sind beide Möglichkeiten physikalisch äquivalent.

Zusätzlich kann in dem erweiterten Anderson-Modell mit Coulomb-Wechselwirkung noch ein senkrecht zu dem zweidimensionalen Elektronensystem stehendes Magnetfeld  $H$  berücksichtigt werden. In der Landau-Eichung wird ein solches Feld durch ein in einer Ebenenrichtung linear anwachsendes Vektorpotenzial beschrieben, das in die Schrödinger-Gleichung über den Quasi-Impuls eingeht und damit in die Nichtdiagonalterme der Tight-Binding-Näherung. Der Nichtdiagonalterm in  $H_{\text{non-WW}}$  aus Gl. (III.B.13) wird dann zu

$$-t \sum_{k,j} \left[ \exp(i\Phi\tilde{n}(k)) \hat{a}_{k,j+1}^\dagger \hat{a}_{k,j} + \hat{a}_{k+1,j}^\dagger \hat{a}_{k,j} + \exp(-i\Phi\tilde{n}(k)) \hat{a}_{k,j}^\dagger \hat{a}_{k,j+1} + \hat{a}_{k,j}^\dagger \hat{a}_{k+1,j} \right], \quad (\text{III.B.15})$$

wobei  $\Phi = 2\pi H s^2 / \Phi_0$  mit dem Flussquantum  $\Phi_0$  und  $\tilde{n}(k) = k$  für  $k \leq n/2$  sowie  $\tilde{n}(k) = n - k$  für  $k > n/2$ . Das entspricht einem Magnetfeld von  $-H$  in der unteren und  $+H$  in der oberen Hälfte des betrachteten Systems. Der Grund für dieses Feld ist, dass bei periodischen Randbedingungen (Torusgeometrie) sonst ein Sprung im Vektorpotenzial auftreten würde.

### III.B.6. Erweitertes Anderson-Modell mit Spin-Freiheitsgrad und Hubbard-Wechselwirkung

Bei der Betrachtung von zweidimensionalen wechselwirkenden Elektronensystemen mit einem Magnetfeld parallel zur Systemebene ist es nötig, den Spin-Freiheitsgrad der Elektronen zu berücksichtigen. Dieses Feld koppelt bei hinreichend dünnen Schichten nur an die  $z$ -Komponente des Elektronenspins, während Bahneffekte vernachlässigbar sind. Da die Elektronen Spin- $1/2$  Teilchen sind, können sich auf jedem Platz ein Teilchen mit Spin  $\sigma = +1/2$  und ein Teilchen mit Spin  $\sigma = -1/2$  aufhalten. Daher muss für jeden Gitterplatz  $(k, j)$  der zusätzliche Index  $\sigma$  eingeführt werden, der den Spin bezeichnet, und der Standard-Anderson-Teil des Hamilton-Operators wird

$$H_{\text{non-WW}} = \sum_{k,j,\sigma} \epsilon_{k,j} \hat{a}_{k,j;\sigma}^\dagger \hat{a}_{k,j;\sigma} - t \sum_{k,j,\sigma} \left[ \hat{a}_{k,j+1;\sigma}^\dagger \hat{a}_{k,j;\sigma} + \hat{a}_{k+1,j;\sigma}^\dagger \hat{a}_{k,j;\sigma} + \hat{a}_{k,j;\sigma}^\dagger \hat{a}_{k,j+1;\sigma} + \hat{a}_{k,j;\sigma}^\dagger \hat{a}_{k+1,j;\sigma} \right]. \quad (\text{III.B.16})$$

Als Einheit für die Energie wird wieder die (hier nicht ungeordnete) Stärke der Nichtdiagonalterme  $t = 1$  verwendet. Elektronen mit entgegen gesetztem Spin können sich nun auf dem gleichen Gitterplatz  $(k, j)$  aufhalten. Dann verursacht deren Abstoßung einen zusätzlichen Energiebeitrag, die so genannte Hubbard-Energie,

$$H_{\text{Hubbard}} = U \sum_{k,j} \hat{a}_{k,j;+1/2}^\dagger \hat{a}_{k,j;+1/2} \hat{a}_{k,j;-1/2}^\dagger \hat{a}_{k,j;-1/2}. \quad (\text{III.B.17})$$

### III.B. Das Anderson-Modell für ungeordnete Elektronensysteme

Für das Hubbard-Modell ist der Hamilton-Operator mit dieser extrem kurzreichweitigen Wechselwirkung schon vollständig. Hier soll aber zusätzlich auch die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung berücksichtigt werden, weil diese Wechselwirkungseffekte für die zweidimensionalen Proben stark sind. Bei dem Gl. (III.B.14) entsprechenden Ausdruck

$$H_{\text{Coulomb}} = U \sum_{k,j < l,p;\sigma,\sigma'} \frac{(\hat{a}_{k,j;\sigma}^\dagger \hat{a}_{k,j;\sigma} - K)(\hat{a}_{l,p;\sigma'}^\dagger \hat{a}_{l,p;\sigma'} - K)}{|\vec{r}_{k,j} - \vec{r}_{l,p}|/s} \quad \text{mit} \quad U/t = 2r_s \sqrt{\frac{\pi N}{nm}}, \quad (\text{III.B.18})$$

muss jetzt eine Hintergrund-Ladung  $K = N/nm$  berücksichtigt werden, damit auch Systeme mit den Randbedingungen einer harten Wand betrachtet werden können, ohne dass die Elektronen alle von den Coulomb-Kräften an die Wände gedrückt werden. Der Grund für das Weggehen von periodischen Randbedingungen ist, dass sich so unphysikalische, stark ausgedehnte Zustände bei der niedrigsten und höchsten Energie im Band vermeiden lassen [BERKOVITS&KANTELHARDT-02].

Das Verhältnis der beiden Vorfaktoren  $U_H$  und  $U$  für die Stärken der Hubbard- und der Coulomb-Wechselwirkungen ist nicht exakt bekannt. Es hängt davon ab, wie nahe sich die Elektronen mit entgegen gesetztem Spin auf einem Gitterplatz kommen im Vergleich mit der Nähe von zwei Elektronen auf benachbarten Gitterplätzen. Der im Hubbard-Modell meist betrachtete Extremfall  $U = 0$  entspricht einem Vernachlässigen der Wechselwirkung mit benachbarten Elektronen. Das andere Extrem mit besonderer Betonung der langreichweitigen Wechselwirkungen ist  $U = U_H$ , denn es ist nicht vorstellbar, dass  $U$  größer als  $U_H$  werden kann. In Hubbards Originalarbeit [HUBBARD-63] wird  $U = 0.3 U_H$  für schwach überlappende wasserstoffartige Wellenfunktionen abgeschätzt, aber für typische Halbleiter-Materialien existiert keine Abschätzung. Daher sollen hier auch Zwischenwerte betrachtet werden.

Schließlich kommt für den Hamilton-Operator noch das parallele Magnetfeld  $B$  hinzu, das nur mit dem Gesamtspin aller Elektronen im System wechselwirkt und daher mit  $S_z = \sum \sigma$  lautet

$$H_{\text{Magnetfeld}} = -g\mu_B B S_z \quad (\text{III.B.19})$$

mit dem  $g$ -Faktor für Elektronen und dem Bohrschen Magneton  $\mu_B$ .

Da Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren in allen Termen von

$$H = H_{\text{non-WW}} + H_{\text{Hubbard}} + H_{\text{Coulomb}} + H_{\text{Magnetfeld}} \quad (\text{III.B.20})$$

nur mit gleichem  $\sigma$  hintereinander auftreten, d.h. das Modell keinen Mechanismus zum Umlappen der Spins besitzt, wechselwirken nur die Elektronenkonfigurationen mit konstantem  $S_z$ . Aus diesem Grund kann für die Berechnung der Eigenzustände eine Block-Matrix-Diagonalisierung eingesetzt werden, die den Rechenaufwand merklich verringert. Damit erhält man die Vielteilchen-Eigenwerte für  $N$  Elektronen,  $E_\alpha^{N,S_z}$ , und die entsprechenden Eigenfunktionen  $|\alpha^{N,S_z}\rangle$ . Bei  $B = 0$  gelten wegen der Spin-Symmetrie  $E_\alpha^{N,-S_z} = E_\alpha^{N,+S_z}$  und  $|\alpha^{N,-S_z}\rangle = |\alpha^{N,+S_z}\rangle$ . Das Magnetfeld verursacht bei den Energieeigenwerten nur eine Verschiebung um den durch Gl. (III.B.19) angegebenen Wert  $g\mu_B B S_z$ , während die Eigenvektoren unverändert bleiben. Daher kann die Abhängigkeit vom Magnetfeld in diesem Modell ohne neue Berechnung der Eigenwerte und -funktionen analysiert werden.

### III.C. Methoden zur Untersuchung von Lokalisierung und Fluktuationen in elektronischen Systemen

Die Charakterisierung der Lokalisierungseigenschaften erfolgt am häufigsten durch die Angabe einer Lokalisierungslänge  $\lambda$ , siehe Gl. (III.B.5). Die effektivste Methode zur numerischen Bestimmung von Lokalisierungslängen ist die Transfer-Matrix-Methode, bei der allerdings keine echten Eigenfunktionen berechnet werden, weil die betrachteten Energien  $E$  im Allgemeinen keine Eigenwerte sind. Darum können auch die Fluktuationen damit nicht vollständig charakterisiert werden. Um Eigenfunktionen zu erhalten, muss die Matrix-Darstellung des Hamilton-Operators diagonalisiert werden. Bei einer großen, dünn besetzten Matrix geschieht das am besten mit dem Lanczos-Algorithmus. Damit erhält man Eigenwerte  $E$  und Eigenfunktionen ( $\Psi_n^{(E)}$ ); mit beiden können die Lokalisierungseigenschaften charakterisiert werden. Hier gehe ich nach einer kurzen Beschreibung der Transfer-Matrix-Methode und ihrer Voraussetzungen zuerst kurz auf die Eigenwerte und dann auf die Eigenfunktionen ein. Im letzten Teil stelle ich eine Verallgemeinerung der Lokalisierungsdefinitionen für Vielteilchen-Eigenfunktionen vor.

#### III.C.1. Die Transfer-Matrix-Methode und ihre Grenzen

Die Transfer-Matrix-Methode wird schon seit langem für numerische Simulationen verwendet [ISHII-73, MACKINNON&KRAMER-83, DERRIDAetal-87, MUTALIBetal-87, KRAMER&MACKINNON-93]. Dabei wird eine Energie  $E$  vorgegeben und die Lokalisierungslänge  $\lambda$  abgeschätzt, die eine Eigenfunktion für diesen Eigenwert haben würde, wenn es sie gäbe. Es wird immer ein System mit quasi-eindimensionaler Geometrie betrachtet; für ein dreidimensionales Modell ein balkenförmiges Gitter mit den Abmessungen  $M \times M \times L$  (mit  $L \gg M$ ) und für ein zweidimensionales Modell ein streifenförmiges  $M \times L$ -Gitter. Alle Wellenfunktionsamplituden  $\psi_n$  in einer  $M \times M$ -Schicht bzw. auf einer Linie mit  $M$  Amplituden werden zu Vektoren  $\Psi_\ell$  zusammengefasst, wobei der Index  $\ell$  die Nummer der Schicht bzw. der Linie bezeichnet. Für die lineare Kette gilt  $M=1$  und  $\Psi_\ell \equiv \psi_\ell$ . Die Tight-Binding-Gleichungen (III.B.4) für alle Amplituden im Vektor  $\Psi_\ell$  werden dann in Vektorform umgeschrieben,

$$E \Psi_\ell = \mathfrak{E}_\ell \Psi_\ell + T_{\ell-1} \Psi_{\ell-1} + T_\ell \Psi_{\ell+1}. \quad (\text{III.C.1})$$

Dies ist möglich, wenn die Wechselwirkung auf nächste Nachbarn beschränkt wird, und somit alle Amplituden  $\psi_m$  von Nachbarplätzen in den benachbarten Vektoren  $\Psi_{\ell-1}$  und  $\Psi_{\ell+1}$  oder in  $\Psi_\ell$  selbst liegen. Die  $\mathfrak{E}_\ell$  und die  $T_\ell$  sind  $M^{d-1} \times M^{d-1}$ -Matrizen.  $\mathfrak{E}_\ell$  enthält die Diagonalelemente  $\varepsilon_n$  und die Nichtdiagonalelemente  $t_{n,m}$  aus (III.B.4) für alle Plätze  $n$  und  $m$  in  $\Psi_\ell$ , während  $T_\ell$  die Nichtdiagonalelemente  $t_{n,m}$  für die Plätze  $n$  in  $\Psi_\ell$  und  $m$  in  $\Psi_{\ell-1}$  umfasst. Gleichung (III.C.1) lässt sich nach  $\Psi_{\ell+1}$  auflösen,

$$\Psi_{\ell+1} = T_\ell^{-1} (E - \mathfrak{E}_\ell) \Psi_\ell - T_\ell^{-1} T_{\ell-1} \Psi_{\ell-1}, \quad (\text{III.C.2})$$

was auch als Blockmatrix-Rekursionsgleichung geschrieben werden kann,

$$\begin{pmatrix} \Psi_{\ell+1} \\ \Psi_\ell \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_\ell^{-1} (E - \mathfrak{E}_\ell) & -T_\ell^{-1} T_{\ell-1} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_\ell \\ \Psi_{\ell-1} \end{pmatrix} \equiv \mathfrak{M}_\ell \begin{pmatrix} \Psi_\ell \\ \Psi_{\ell-1} \end{pmatrix}. \quad (\text{III.C.3})$$

Unter Ausnutzung der Rekursion kann  $\Psi_\ell$  aus den beiden Anfangsvektoren  $\Psi_0$  und  $\Psi_1$  und der Produktmatrix  $\mathfrak{P}_\ell$  berechnet werden,

$$\begin{pmatrix} \Psi_{\ell+1} \\ \Psi_\ell \end{pmatrix} = \mathfrak{P}_\ell \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \mathfrak{P}_\ell = \prod_{l=1}^{\ell} \mathfrak{M}_l. \quad (\text{III.C.4})$$

$\mathfrak{P}_\ell$  erfüllt das Theorem von Oseledec [OSELEDEC-68], d.h. es existiert die Grenzmatrix

$$\mathfrak{G} = \lim_{\ell \rightarrow \infty} \left( \mathfrak{P}_\ell \mathfrak{P}_\ell^+ \right)^{1/(2\ell)}, \quad (\text{III.C.5})$$

deren kleinster Eigenwert  $\Gamma$  durch Logarithmieren in den so genannten Lyapunov-Exponenten  $\gamma = \ln \Gamma$  umgerechnet werden kann. Die Lokalisierungslänge ist der Kehrwert des Lyapunov-Exponenten,  $\lambda = 1/\gamma$ . Diese Definition der Lokalisierungslänge entspricht (vgl. Gl. (III.B.5))

$$\gamma = \frac{1}{\lambda} = -\lim_{\ell \rightarrow \infty} \frac{1}{\ell} \ln |\psi_\ell / \psi_0|. \quad (\text{III.C.6})$$

In der Praxis berechnet man das Matrizenprodukt  $\mathfrak{P}_\ell \mathfrak{P}_\ell^+$  für das quasi-eindimensionale System mit der (hinreichend großen) Länge  $L$  und der Breite 1,  $M$  oder  $M \times M$ , bestimmt seinen kleinsten Eigenwert  $\Gamma_M$  und rechnet diesen in eine Näherung für den Lyapunov-Exponenten  $\gamma_M$  bzw. die Lokalisierungslänge  $\lambda_M$  um,

$$\gamma_M = \frac{1}{\lambda_M} = \frac{1}{2L} \ln \left\{ \min \left[ \text{Spektrum} \left( \mathfrak{P}_L \mathfrak{P}_L^+ \right) \right] \right\}. \quad (\text{III.C.7})$$

Durch den Vergleich der Resultate  $\gamma_M$  für verschiedene Breiten  $M$  (verschiedene Balken- bzw. Streifenquerschnitte) wird auf den Lyapunov-Exponenten  $\gamma$  für  $M \rightarrow \infty$  extrapoliert („Finite-Size-Scaling“). Für die lineare Kette kann dieser letzte Schritt entfallen, weil  $M = 1$  fest ist.

Bei der Transfer-Matrix-Methode wird vorausgesetzt, dass dieses Finite-Size-Scaling funktioniert und dass die Grenzwerte  $L \rightarrow \infty$  und  $M \rightarrow \infty$  wie beschrieben nacheinander ausgeführt werden können. Das ist allerdings nicht trivial, denn man betrachtet so immer nur eine quasi-eindimensionale Geometrie. So werden möglicherweise Effekte in der kritischen Dimension  $d = 2$  nicht korrekt erfasst, die nur auftreten, wenn die Systeme wirklich zweidimensional sind.

Weiterhin ermittelt die Methode nur einen Wert für  $\gamma$  bzw. für die Lokalisierungslänge  $\lambda$  und ist darum für eine Untersuchung von Fluktuationen eher ungeeignet. Natürlich besteht die Möglichkeit, die Fluktuationen von  $\gamma_M$  oder  $\lambda_M$  für viele Systeme einer gegebenen Länge  $L$  zu untersuchen, die ich in Abschnitt III.D aufgreife. Eine andere Möglichkeit zur Untersuchung der Fluktuationen im Rahmen der Transfer-Matrix-Methode wurde kürzlich publiziert [DEQUEIROZ-02], siehe die Diskussion in Abschnitt III.E. Auch dabei wird aber vorausgesetzt, dass die Verteilung der  $\gamma_M$  oder  $\lambda_M$  nicht sehr breit wird, so dass die Logarithmen in den Gleichungen (III.C.6) und (III.C.7) selbstmittelnde Größen bleiben. Damit gibt es Probleme bei deutlichen Abweichungen von einfach exponentiell abfallenden Wellenfunktionen oder wenn die Ein-Parameter-Skalentheorie nicht gilt. Für die Mittelung von  $\gamma_M$  oder  $\lambda_M$  über mehrere Konfigurationen muss dann eine besonders angepasste Mittelungsprozedur verwendet werden. Insgesamt ist die Transfer-Matrix-Methode zur Untersuchung von anomaler Lokalisierung, Fluktuationen und Abweichungen von der Ein-Parameter-Skalentheorie nicht optimal. Ihren Hauptnutzen sehe ich eher darin, mit geringem Aufwand einen schnellen Überblick über die Lokalisierungseigenschaften zu bekommen.

### III.C.2. Niveau-Statistik und die Zufallsmatrix-Theorie

Die Eigenwert-Statistik ist eine elegante, erst in jüngster Zeit etablierte Methode zur Bestimmung der Lokalisierungseigenschaften von Eigenzuständen in Modellen für ungeordnete Festkörper. Der wesentliche Vorteil ist, dass man dabei ganz auf die aufwendige Berechnung der Eigenzustände ( $\psi_n^{(E)}$ ) verzichten kann, weil die Lokalisierungseigenschaften aus den statistischen Eigenschaften des Eigenwert-Spektrums gefolgert werden. Allerdings lässt sich damit nur feststellen, ob die Zustände im betrachteten Spektralbereich (Energie-Intervall) alle lokalisiert oder alle ausgedehnt sind. Man kann weder zwischen einzelnen Zuständen differenzieren, noch Abweichungen von der Ein-Parameter-Skalentheorie erkennen, die die Form der einzelnen Zustände oder ihre Fluktuationen betreffen.

Eigenwertspektren wurden erstmals in der Kernphysik statistisch diskutiert [WIGNER-51]. Man wollte die komplexen Anregungsspektren schwerer Atomkerne verstehen. Dies gelang im Rahmen der Theorie der Zufallsmatrizen [DYSON-62]. Zu einer Anwendung dieser Theorie auf die chaotischen Eigenwertspektren ungeordneter Festkörper kam es in den achtziger Jahren [EFETOV-83, ALTSHULER&SHKLOVSKII-86], und schließlich wurde der Zusammenhang mit Metall-Isolator-Übergängen erkannt und zur numerischen Bestimmung des Übergangspunktes durch Eigenwert-Statistik verwendet [ALTSHULERetal-88, SHKLOVSKIIetal-93, HOFSTETTER&SCHREIBER-93]. Übersichtsartikel zur Zufallsmatrix-Theorie und zur Eigenwert-Statistik in ungeordneten Festkörpern sind [METHA-91, GUHRetal-98, MIRLIN-00].

Unter dem so genannten „*Gaußschen orthogonalen Ensemble*“ (GOE) von Zufallsmatrizen versteht man die Menge von symmetrischen  $2 \times 2$ -Matrizen  $(A_{n,m})$  mit statistisch unabhängigen, reellen Matrixelementen  $A_{1,1}$ ,  $A_{1,2} = A_{2,1}$  und  $A_{2,2}$ , die sich durch orthogonale Transformationen ineinander überführen lassen. Mit Hilfe infinitesimaler Transformationen lässt sich herleiten, dass die Verteilungen der Matrixelemente  $A_{n,m}$  unterschiedlich breite Gauß-Verteilungen für die Nichtdiagonal- und die Diagonalelemente sein müssen. Der Mittelwert  $E_0$  und die Standardabweichung  $\sigma$  der Diagonalelemente sind dabei freie Parameter. Statt durch die Matrixelemente kann man die Zufallsmatrizen auch durch ihre beiden Eigenwerte  $E_\alpha$  und  $E_\beta$  oder – damit der freie Parameter  $E_0$  heraus fällt – durch den Eigenwertabstand  $s \equiv |E_\alpha - E_\beta|$  charakterisieren. Normiert man die Verteilung  $P(s)$  der Eigenwertabstände auf  $\langle s \rangle = 1$ , so lautet sie

$$P_{\text{Wigner}}(s) = \frac{\pi s}{2} \exp\left[-\frac{\pi}{4} s^2\right]. \quad (\text{III.C.8})$$

Das ist die so genannte Wigner-Verteilung, die nach dem Pionier der Zufallsmatrix-Theorie, E. P. Wigner, benannt ist. Sie schließt eine Entartung der Eigenwerte (Niveaus) aus, und eng benachbarte Eigenwerte sind stark unterdrückt: Wegen  $P_{\text{Wigner}}(s) \rightarrow 0$  für  $s \rightarrow 0$  stoßen sich die Niveaus  $E_\alpha$  und  $E_\beta$  ab. Außerdem ist der schnelle (Gauß-artige) Abfall für große Niveauabstände  $s$  charakteristisch.

Zufallsmatrizen mit komplexen Matrixelementen und hermitescher Symmetrie, die durch unitäre Transformationen ineinander überführt werden, bilden das „*Gaußsche unitäre Ensemble*“ (GUE) und entsprechen einer gebrochenen Zeitumkehrinvarianz, z.B. durch ein magnetisches Feld. Das „*Gaußsche symplektische Ensemble*“ (GSE) schließlich wird durch Zufallsmatrizen mit Quaternionen-Matrixelementen gebildet, bei denen die Transformationen symplektisch sein müssen, und entspricht einer gebrochenen Rotationsinvarianz, z.B. durch Spin-Bahn-Wechselwirkung. Für GUE und GSE gelten ähnliche Eigenwert-Abstandsverteilungen wie Gl. (III.C.8), aber mit  $P(s) \sim s^\beta$  und  $\beta = 2$  bzw.  $4$  für  $s \rightarrow 0$ .

Numerische Untersuchungen zeigen, dass die Wigner-Verteilung (III.C.8) nicht nur die Abstände der Eigenwerte von zufälligen symmetrischen  $2 \times 2$ -Matrizen beschreibt, sondern auch eine sehr gute Näherung für die Verteilung der Abstände benachbarter Eigenwerte großer symmetrischer Matrizen mit zufälligen Matrixelementen ist, sogar für dünn besetzte symmetrische Matrizen. Daher können auch die normierten Abstände benachbarter Eigenwerte der Tight-Binding-Gleichung unter gewissen Voraussetzungen durch die Wigner-Verteilung beschrieben werden. Diese Voraussetzungen können nicht direkt quantitativ abgeleitet werden, sondern zeigen sich in numerischen Experimenten. Es können zwei Fälle formuliert werden, in denen die Wigner-Verteilung (III.C.8) sicher nicht stimmen kann: (i) Die Matrizen sind nicht ungeordnet. Die Eigenwerte eines geordneten oder fast geordneten physikalischen Systems liegen fast äquidistant und einige sind entartet oder fast entartet. (ii) Die Eigenzustände sind lokalisiert. Eigenzustände, die an verschiedenen Orten in einem ungeordneten System lokalisiert sind, überlappen nicht und sind deshalb unabhängig. Daher können sich die Eigenwerte solcher Zustände nicht abstoßen und sind unabhängig voneinander.

Es zeigt sich, dass dies die beiden einzigen wesentlichen Fälle sind, bei denen Abweichungen von der Wigner-Verteilung auftreten. Die Verteilung der Abstände unabhängiger (Eigen-)Werte ist die Poisson-Verteilung,

$$P_{\text{Poisson}}(s) = \exp[-s]. \quad (\text{III.C.9})$$

Die Poisson-Verteilung hat keine Niveauabstoßung, sondern mit  $P_{\text{Poisson}}(0) = 1$  sogar ein Maximum für Entartung  $s = 0$ . Außerdem fällt sie für große  $s$  nur exponentiell ab, und damit wesentlich langsamer als die Wigner-Verteilung (III.C.8).

Für eine unendliche Systemgröße würde die Bestimmung der Niveauabstandsverteilung  $P(s)$  direkt Rückschlüsse auf die Lokalisierung der Eigenzustände erlauben. Aber selbstverständlich können bei numerischen Experimenten nur endlich große Systeme untersucht werden, und daher findet man für die Niveauabstandsverteilung  $P(s)$  praktisch immer eine Zwischenform. Entscheidend ist daher die Systemgrößenabhängigkeit. Es muss getestet werden, wie sich  $P(s)$  mit zunehmender Systemgröße  $L$  ändert. Wenn sich  $P(s)$  monoton in Richtung auf eine Wigner-Verteilung ändert, sind ausgedehnte Zustände für das unendlich große System zu erwarten. Ändert sich  $P(s)$  monoton in Richtung auf eine Poisson-Verteilung, muss man von lokalisierten Zuständen ausgehen.

Der erste Schritt für die praktische Anwendung der Niveau-Statistik ist die Entfaltung des Eigenwertspektrums, wobei die echten Eigenwerte  $E_n$  umgerechnet werden in „entfaltete“ Eigenwerte  $\varepsilon_n$ , deren mittlerer Abstand  $\langle \varepsilon_n - \varepsilon_{n-1} \rangle$  auf Eins normiert ist. Aus den Abständen  $s_n = \varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}$  benachbarter Eigenwerte wird dann die Niveauabstandsverteilung  $P(s)$  konstruiert.  $P(s) ds$  bezeichnet die Wahrscheinlichkeit, dass ein Eigenwertabstand im Intervall  $[s, s+ds]$  liegt; die beiden Normierungsbedingungen lauten  $\langle 1 \rangle \equiv \int_0^\infty P(s) ds = 1$  und  $\langle s \rangle \equiv \int_0^\infty s P(s) ds = 1$ . Aus praktischen Gründen untersucht man nicht die Form der Niveauabstandsverteilung  $P(s)$  selbst, sondern betrachtet die Systemgrößenabhängigkeit daraus abgeleiteter Größen. In letzter Zeit wurde häufig das zweite Moment von  $P(s)$  betrachtet, was die Vorteile hat, dass schon eine einzige Zahl zur Charakterisierung von  $P(s)$  ausreicht und dass nicht bestimmte Bereiche der Verteilung willkürlich weggelassen werden. Die Größe

$$I_0(L) \equiv \frac{1}{2} \langle s^2 \rangle \equiv \frac{1}{2} \int_0^\infty s^2 P(s) ds \quad (\text{III.C.10})$$

hat für die beiden Grenzfälle (III.C.8) und (III.C.9) die Werte  $I_{0,\text{Wigner}} \cong 0.6366$  und  $I_{0,\text{Poisson}} = 1$ ; bei unitärer Symmetrie gilt  $I_{0,\text{Wigner}} \cong 0.5890$ . In numerischen Simulationen für Systeme mit einem Lokalisierungs-Delokalisierungs-Übergang zeigt sich, dass  $I_0(L) \rightarrow I_{0,\text{Wigner}}$  gilt für Unordnung unter dem kritischen Wert und  $I_0(L) \rightarrow I_{0,\text{Poisson}}$  für Unordnung über dem kritischen Wert.

### III.C.3. Eigenfunktions-Analyse

#### a) Anteils-Verhältnis (Participation Ratio)

Zur Charakterisierung des Lokalisierungs- und Fluktuationsverhaltens von echten Eigenfunktionen ( $\psi_n^{(E)}$ ) gibt es verschiedene Ansätze, die sich wesentlich in ihrer Zielsetzung unterscheiden. Die einfachste Größe, das Anteils-Verhältnis („Participation Ratio“) berücksichtigt vor allem die Regionen, in denen die Amplitude der Wellenfunktionen groß ist. Dabei geht man von einer normierten Eigenfunktion aus ( $\sum_n |\psi_n^{(E)}|^2 = 1$ ) und betrachtet die Größe

$$P = \left[ \sum_n |\psi_n^{(E)}|^4 \right]^{-1}. \quad (\text{III.C.11})$$

Wenn die Wellenfunktion über  $N$  Gitterplätze gleichmäßig ausgedehnt ist, gilt wegen der Normierung  $|\psi_n|^2 \approx 1/\sqrt{N}$ , so dass  $P \approx N$ ; für eine Delta-Funktion (stärkste mögliche Lokalisierung) ist  $P = 1$ . Daher gibt der Participation Ratio an, über wie viele Gitterplätze die Wellenfunktion etwa



gleichmäßig ausgebreitet ist. Es spielt praktisch keine Rolle, ob die Amplitude auf Randplätzen exakt 0 oder sehr klein ist. Der Participation Ratio hängt bei ausgedehnten Wellenfunktionen linear von der Anzahl der Plätze im System ab, während er bei lokalisierten Zuständen unabhängig von der Systemgröße ist. Charakterisiert wird der *Kernbereich* der Wellenfunktionen, nicht das asymptotische Lokalisierungsverhalten.

### b) Lyapunov-Exponent und Lokalisierungslänge

Auch aus den Eigenfunktionen können ein Lyapunov-Exponent  $\gamma$  und eine Lokalisierungslänge  $\lambda$  bestimmt werden, indem über die Amplituden auf allen Plätzen  $n$  in einem gegebenen, großen Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum  $n_0$  gemittelt wird. Diese Definition der Lokalisierungslänge wurde bereits in Gl. (III.B.5) angegeben,

$$\left\langle \ln \frac{|\psi_n^{(E)}|}{|\psi_{n_0}^{(E)}|} \right\rangle \equiv \left\langle \ln \frac{|\psi(r)|}{|\psi(0)|} \right\rangle = -\frac{r}{\lambda} = -r\gamma \quad \text{für } r \gg \lambda, \quad (\text{III.C.12})$$

und charakterisiert das *asymptotische* Lokalisierungsverhalten, nämlich den Abfall der Wellenfunktion in den Bereichen mit kleiner Amplitude, weit weg vom Lokalisierungszentrum. Auch  $\lambda$  und  $\gamma$  hängen nur bei ausgedehnten Wellenfunktionen von der Systemgröße ab und sind konstant bei lokalisierten Zuständen. Allerdings müssen für eine zuverlässige Bestimmung wesentlich größere Systeme betrachtet werden als beim Participation Ratio.

Zur Definition des Lokalisierungszentrums  $n_0$  kann entweder das Maximum herangezogen werden,

$$|\psi_{n_0}^{(E)}| = \max_n \{|\psi_n^{(E)}|\}, \quad (\text{III.C.13})$$

oder – eine geeignete (nicht fraktale) Struktur vorausgesetzt – der Schwerpunkt der Wellenfunktion. Der Schwerpunkt ist dabei der Platz  $n_0$ , für den das „Massenträgheitsmoment“ minimal ist,

$$\sum_n |\psi_n^{(E)}|^2 [(x_n - x_{n_0})^2 + (y_n - y_{n_0})^2] = \min_m \left\{ \sum_n |\psi_n^{(E)}|^2 [(x_n - x_m)^2 + (y_n - y_m)^2] \right\}. \quad (\text{III.C.14})$$

Das Amplitudenquadrat  $|\psi_n^{(E)}|^2$  kann hierfür als Masse auf dem Platz  $(x_n, y_n)$  interpretiert werden.

### c) Verteilung der Eigenzustandsamplituden für (quasi-) ausgedehnte und kritische Zustände

Grundsätzlich gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten, die Verteilung der Amplitudenquadrate  $|\psi_n^{(E)}|^2$  von Eigenfunktionen in der Nähe einer vorgegebenen Energie  $E$  zu untersuchen. Entweder man betrachtet die Verteilung aller Amplitudenquadrate in dem ganzen System gemeinsam, entsprechend einer Mittelung über alle Plätze. Oder man betrachtet zunächst nur die Amplituden auf den Plätzen in einem gegebenen Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum. Für jeden Abstand  $r$  ergibt sich dann eine andere Verteilung.

Bei der ersten Möglichkeit schenkt man dem Zentrum der Lokalisierung keine Beachtung und betrachtet alle  $N$  Gitterplätze im System in gleicher Weise. Die Methode ist daher besonders zur Untersuchung und Beschreibung kritischer und ausgedehnter Eigenzustände geeignet, bei denen sowieso kein Lokalisierungszentrum definiert werden kann. Die Verteilungsfunktion  $f(t)$  für alle skalierten Amplitudenquadrate  $t = |\psi_n^{(E)}|^2 N$  wird so definiert, dass  $f(t) dt$  die Wahrscheinlichkeit ist, auf einem gegebenen Platz  $n$  einen Wert zwischen  $t$  und  $t + dt$  zu finden [MÜLLERetal-97],

$$f(t) \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta(t - |\psi_n^{(E)}|^2 N) \right\rangle_E. \quad (\text{III.C.15})$$

### III.C. Methoden zur Untersuchung von Lokalisierung und Fluktuationen

Die Summe läuft über alle Gitterplätze,  $\delta(x)$  ist die Delta-Funktion, und die Mittelung erfolgt über mehrere Eigenfunktionen mit Eigenenergie  $E' \approx E$  und über verschiedene Konfigurationen des ungeordneten Systems. Der Faktor  $N$ , die Anzahl der Plätze im betrachteten System, wurde in die Definition aufgenommen, damit  $f(t)$  bei ausgedehnten Eigenzuständen nicht systemgrößenabhängig ist, obwohl die Eigenfunktionen auf  $\sum_n |\psi_n|^2 = 1$  normiert sind. Mit Hilfe der Theorie der Zufallsmatrizen (siehe z.B. [METHA-91, GUHREtal-98] und Abschnitt III.C.2) lässt sich die Form der Verteilung  $f(t)$  im Grenzfall unendlicher Systemgröße bei ausgedehnten Eigenfunktionen (GOE) ableiten. Dies ist die so genannte Porter-Thomas-Verteilung [PORTER&THOMAS-56, BRODYetal-81],

$$f_{\text{PT}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp(-t/2). \quad (\text{III.C.16})$$

Die Gültigkeit der schon lange bekannten Näherung (III.C.16) wurde für das zwei- und dreidimensionale Anderson-Modell mit schwacher Unordnung auch numerisch bestätigt [MÜLLERetal-97, USKIetal-98, NIKOLIC-01]. Dabei wurden ausgedehnte bzw. schwach lokalisierte (quasi ausgedehnte) Eigenzustände betrachtet.

Sollen allerdings stark lokalisierte Eigenzustände untersucht werden, deren Lokalisierungslänge deutlich kleiner als die Systemgröße ist,  $\lambda \ll L$ , so wird die Amplitudenverteilung (III.C.15) systemgrößenabhängig und gibt keine praktische Beschreibung mehr [KANTELHARDT&BUNDE-02]. Die analytische Form von  $f(t)$ , die man durch Einsetzen einer einfachen Exponentialfunktion ohne Amplitudenfluktuationen für  $\psi$  in Gl. (III.C.15) erhält, erwies sich als konsistent mit numerischen Ergebnissen für echte fluktuierende Anderson-Eigenzustände [MÜLLERetal-97]. Daher kann die Definition (III.C.15) nicht zu einer Charakterisierung der Amplituden-Fluktuationen verwendet werden, denn die Fluktuationen beeinflussen  $f(t)$  nicht. Weiterhin kann  $f(t)$  auch keine Abweichungen vom einfach exponentiellen Abfall zeigen und keine Abweichungen von der Ein-Parameter Skalentheorie.

Eine weitere Möglichkeit zur Untersuchung der Fluktuationen von Eigenfunktionen besteht in einer multifraktalen Analyse der (räumlichen) Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P(\mathbf{r}_n) = |\psi_n^{(E)}|^2$  [SOUKOLIS&ECONOMOU-84, SCHREIBER&GRUSSBACH-91], siehe [JANSSEN-98] für einen Überblick. Dazu muss wieder  $\sum_n |\psi_n|^2 = 1$  normiert sein. Da es keine Trends oder Nichtstationaritäten gibt, wird immer der Standard-Formalismus, die Kästchen-Zähl-Methode („box counting method“) angewandt, bei der die so genannte verallgemeinerte Zustandssumme („partition function“)  $Z_q(s)$  zu berechnen ist; siehe Abschnitt II.A.3.d und insbesondere Gl. (II.A.36). Hier wird die Definition aber nicht auf eine Dimension beschränkt. Für eine gegebene Skala  $s$  teilt man das System in Kästchen der Kantenlänge  $s$ . Je nach Raumdimension werden  $[L/s]$ ,  $[L/s]^2$  oder  $[L/s]^3$  nicht-überlappende Kästchen hineinpassen, wenn  $L$  die lineare Systemgröße ist. Um die Statistik zu verbessern, kann – insbesondere bei Systemen mit periodischen Randbedingungen – statt dessen auch jeder Gitterplatz Mittelpunkt eines solchen Kästchens mit Kantenlänge  $s$  sein, was dann insgesamt  $L^d$  Kästchen ergibt. Dann wird für jedes Kästchen  $v$  mit Mittelpunkt  $\mathbf{r}_v = (x_v, y_v, z_v)$  die Aufenthalts-Wahrscheinlichkeit  $p(v, s)$  berechnet (vgl. Gl. (II.A.38)),

$$p(v, s) = \sum_{-s/2 \leq x-x_v < s/2} \sum_{-s/2 \leq y-y_v < s/2} \sum_{-s/2 \leq z-z_v < s/2} P(\mathbf{r}) \quad (\text{III.C.17})$$

mit  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  und natürlich mit weniger Summen für Raumdimensionen unter drei. Dann kann man die multifraktalen Skalenexponenten (Renyi-Exponenten)  $\tau(q)$  für verschiedene reelle Momente  $q$  aus dem Skalenverhalten der verallgemeinerten Zustandssumme (siehe Gl. (II.A.36)) ermitteln,

$$Z_q(s) = \sum_v [p(v, s)]^q \sim s^{\tau(q)}, \quad (\text{III.C.18})$$

wobei die Summe über alle Kästchen  $v$  läuft. Anstelle von  $\tau(q)$  wird für die elektronischen Systeme meistens die „verallgemeinerte Dimension“

$$D(q) \equiv \tau(q)/(q-1) \quad (\text{III.C.19})$$

angegeben, siehe z.B. [SCHREIBER&GRUSSBACH-91], wo die Schreibweise  $D_q$  verwendet wird.

Die multifraktale Analyse erlaubt eine gute Beschreibung der Fluktuationen bei ausgedehnten, kritischen und quasi-ausgedehnten Zuständen; letztere sind lokalisiert mit einer Lokalisierungslänge, die größer als die Systemgröße ist. Die Methode wurde vielfach zur Charakterisierung von Anderson-Eigenfunktionen am kritischen Punkt für dreidimensionale Systeme der orthogonalen Symmetrieklasse (nach Gl. (III.B.4)) [SOUKOULIS&ECONOMOU-84, EVANGELOU-90, SCHREIBER-90, SCHREIBER&GRUSSBACH-91, GRUSSBACH&SCHREIBER-95, TERA0-97] und der symplektischen Symmetrieklasse (zusätzlich mit Spin-Bahn-Wechselwirkung) [YAKUBO&ONO-98] sowie für zweidimensionale Systeme der unitären Symmetrieklasse (zusätzlich mit Magnetfeld) [HUCKESTEIN&SCHWEITZER-94, HUCKESTEIN&KLESSE-97, TERA0-97, EVERSetal-01, MIRLINetal-03] eingesetzt. Es wurde gezeigt, dass diese Zustände eine multifraktale Charakterisierung erfordern (siehe auch Abschnitt III.B.2). Die multifraktale Analyse der Verteilung  $P(\mathbf{r}_n)$  ist allerdings für eine Beschreibung von lokalisierten Zuständen nicht optimal, weil der ungefähr exponentielle Abfall immer eine starke Multifraktalität vortäuscht, ohne dass es auf die Fluktuationen ankommt. Für lokalisierte Zustände charakterisiert die Multifraktalitätsanalyse daher – wie die Amplituden-Verteilung (III.C.15) – im Limes großer Systeme nicht die Fluktuationen, sondern den exponentiellen Abfall, wie wir früher für ein- und zweidimensionale Systeme gezeigt haben [KANTELHARDTetal-95].

#### d) Verteilung der Eigenzustandsamplituden für lokalisierte Zustände

Um das Verhalten lokalisierter Eigenzustände zu charakterisieren, ist es besser, die Amplitudenverteilungen in Bezug auf das Lokalisierungszentrum zu betrachten [KANTELHARDT&BUNDE-02]. Dazu muss zunächst der Platz  $n_0$  mit dem Lokalisierungszentrum nach Gl. (III.C.13) oder (III.C.14) bestimmt werden. Um die Ergebnisse unabhängig von der Systemgröße zu machen, ist es sinnvoll, die Eigenzustände nicht durch  $\sum_n |\psi_n^{(E)}|^2 = 1$  zu normieren, sondern  $|\psi_n^{(E)}|^2$  durch seinen maximalen Wert zu dividieren. Für jede Eigenfunktion und jeden Gitterplatz  $n$  wird der Abstand  $r_n$  zum Lokalisierungszentrum und der Logarithmus der normierten Amplitude  $A_n$  berechnet,

$$r_n \equiv \sqrt{(x_n - x_{n_0})^2 + (y_n - y_{n_0})^2} \quad \text{und} \quad A_n \equiv -\ln \left( \left| \psi_n^{(E)} \right| / \left| \psi_{n_0}^{(E)} \right| \right). \quad (\text{III.C.20})$$

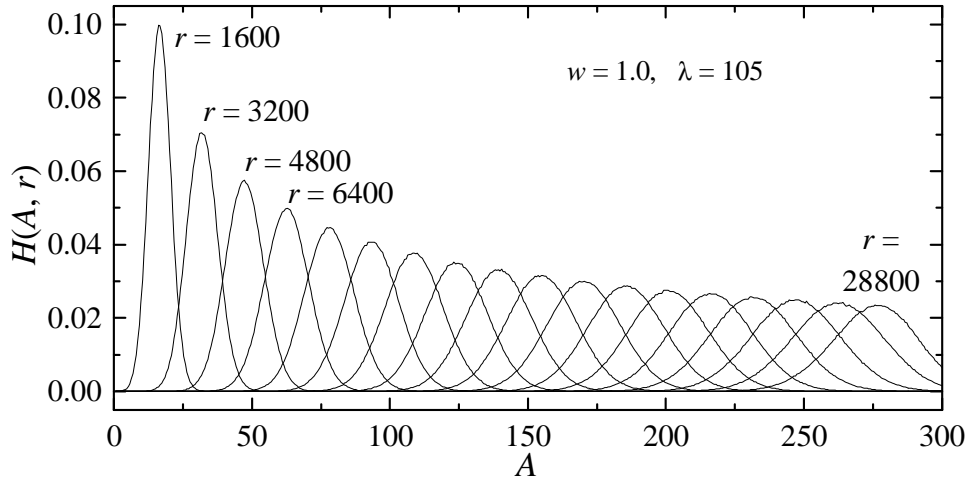
Mit diesen Werten lassen sich dann für gegebene Abstände  $r$  vom Lokalisierungszentrum die Histogramm-Verteilungsfunktionen definieren,

$$H(A, r) = \left\langle \frac{1}{N(r)} \sum_{n=1}^N \delta(r - r_n) \delta(A - A_n) \right\rangle_E, \quad (\text{III.C.21})$$

wobei  $N(r) = \sum_n \delta(r - r_n)$  die Anzahl der Gitterplätze im Abstand  $r$  bezeichnet und die Mittelung wieder über mehrere Eigenfunktionen mit Eigenenergie  $E' \approx E$  und über verschiedene Konfigurationen des ungeordneten Systems erfolgt.

Ein zusätzlicher Vorteil bei der Betrachtung der Verteilung von  $A$  (Definition (III.C.21)) anstelle der Verteilung von  $t$  (Definition (III.C.15)) liegt darin, dass sich jetzt leicht eine Verbindung zu den Vorhersagen der Ein-Parameter Skalentheorie (siehe Abschnitt III.B.3) herstellen lässt. Nach den Gleichungen (III.B.5), (III.C.20) und (III.C.21) gilt

$$\langle A(r) \rangle \equiv \int_0^\infty A H(A, r) dA = - \left\langle \ln \frac{|\psi_n^{(E)}|}{|\psi_{n_0}^{(E)}|} \right\rangle = - \left\langle \ln \frac{|\psi(r)|}{|\psi(0)|} \right\rangle = \frac{r}{\lambda} = r\gamma \quad \text{für } r \gg \lambda. \quad (\text{III.C.22})$$



**Abb. III.C.1:** Unskalierte Amplituden-Histogramm-Verteilungen  $H(A, r)$  für das eindimensionale Einteilchen-Anderson-Modell mit diagonalen Unordnung  $w = 1.0$ .  $H(A, r)$  ist für feste Abstände  $r$  zum Lokalisierungszentrum (von  $r = 1600$  bis  $r = 28800$  mit Schrittweite 1600) über dem negativen Logarithmus der Amplitude,  $A = -\ln|\psi(r)|/|\psi(0)|$ , aufgetragen. Die Kurven sind in guter Näherung Normalverteilungen, deren Position und Varianz proportional zu  $r$  sind. Es wurden mehr als  $10^6$  Eigenfunktionen auf Ketten der Länge  $L = 30000$  nahe der Bandmitte  $E \approx 0$  analysiert, die mit der Iterations-Methode [ROMAN&WIECKO-86] berechnet wurden (nach [KANTELHARDT&BUNDE-02]).

Identifiziert man nun  $r$  mit der Systemlänge  $L$  der Skalentheorie, so entspricht  $A(r)$  für  $r \gg \lambda$  nach Gl. (III.B.8) dem Produkt  $r \tilde{\gamma}(r)$ , und nach Gl. (III.B.9) gilt

$$\langle A^2(r) \rangle - \langle A(r) \rangle^2 = \left[ \langle \tilde{\gamma}^2(r) \rangle - \langle \tilde{\gamma}(r) \rangle^2 \right] r^2 = \frac{r}{\lambda} = r \gamma = \langle A(r) \rangle \quad \text{für } r \gg \lambda. \quad (\text{III.C.23})$$

Diese Vorhersage der Standard-Ein-Parameter-Skalentheorie mit Zufalls-Phasen-Hypothese bedeutet, dass die Varianz der logarithmischen Amplituden  $A(r)$  im Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum genauso skaliert wie der Mittelwert. Um Abweichungen davon zu testen, soll hier der „Fluktuations-Parameter“

$$\sigma(r) = 2 \left[ \frac{\langle A^2(r) \rangle - \langle A(r) \rangle^2}{\langle A(r) \rangle} \right] = 2 \left[ \langle A^2(r) \rangle - \langle A(r) \rangle^2 \right] \frac{\lambda(r)}{r} \quad (\text{III.C.24})$$

betrachtet werden, der asymptotisch für  $r \gg \lambda$  gegen 2 konvergieren sollte. Für das Lloyd-Modell (siehe Abschnitt III.B.3) wurde die Konvergenz von  $\sigma(r)$  bestätigt, allerdings nicht mit dem Standard-Wert 2, sondern mit  $\sigma(r) \rightarrow 4$  [DEYCHetal-00, DEYCHetal-01].

### e) Standard-Lokalisierung beim eindimensionalen Anderson-Modell

Als einfaches Beispiel für die Histogramm-Verteilungsfunktion (III.C.21) betrachte ich hier das gewöhnliche Einteilchen-Anderson-Modell mit unkorrelierter, diagonalen Unordnung auf der linearen Kette; siehe Abschnitt III.B.2 zur Einführung in das Modell. Jede Eigenfunktion ( $\psi_n^{(E)}$ ) hat genau zwei Plätze in einem gegebenen Abstand  $r$  vom Zentrum der Lokalisierung. Abbildung III.C.1 zeigt beispielhaft die Form der Amplituden-Verteilungen  $H(A, r)$  für verschiedene Abstände  $r$ , die deutlich größer als die Lokalisierungslänge  $\lambda$  (siehe Definition (III.B.5)) sind. In größeren Abständen  $r$  vom Lokalisierungszentrum sind die Amplituden kleiner und entsprechen größeren  $A$ -Werten. Zusätzlich wachsen die Amplitudenfluktuationen mit  $r$  an, so dass die Histogramm-Verteilungen auch breiter werden. Die Form legt die Vermutung nahe, dass es sich um Normalverteilungen handelt. Nach der Standard-Skalentheorie (Gln. (III.C.22) und (III.C.23)), sollten außerdem die Position des Zentrums der Verteilungen und ihre Varianz proportional zu  $r$  sein, was

eine entsprechende (logarithmische) Normalverteilung als Ansatz für die Amplituden im Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum nahe legt,

$$H(A, r) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi \sigma r}} \exp \left[ -\frac{(A - r/\lambda)^2}{\sigma r/\lambda} \right]. \quad (\text{III.C.25})$$

Der Vorfaktor ergibt sich aus der Normierung, und  $\lambda$  bezeichnet wieder die Lokalisierungslänge, weil die wahrscheinlichste Amplitude im Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum  $|\psi(r)|/|\psi(0)| = \exp(-A) = \exp(-r/\lambda)$  ist. Der Breite-Parameter  $\sigma$ , der die Stärke der Amplitudenfluktuationen charakterisiert, wurde bereits in Gl. (III.C.24) eingeführt.

Um den Ansatz (III.C.25) zu überprüfen, habe ich in Abb. III.C.2 die reskalierte Histogramm-Verteilung

$$H_s(A_s, r) = H(A, r) \sqrt{\pi \sigma r / \lambda}. \quad (\text{III.C.26})$$

gegen die reskalierten logarithmischen Amplituden

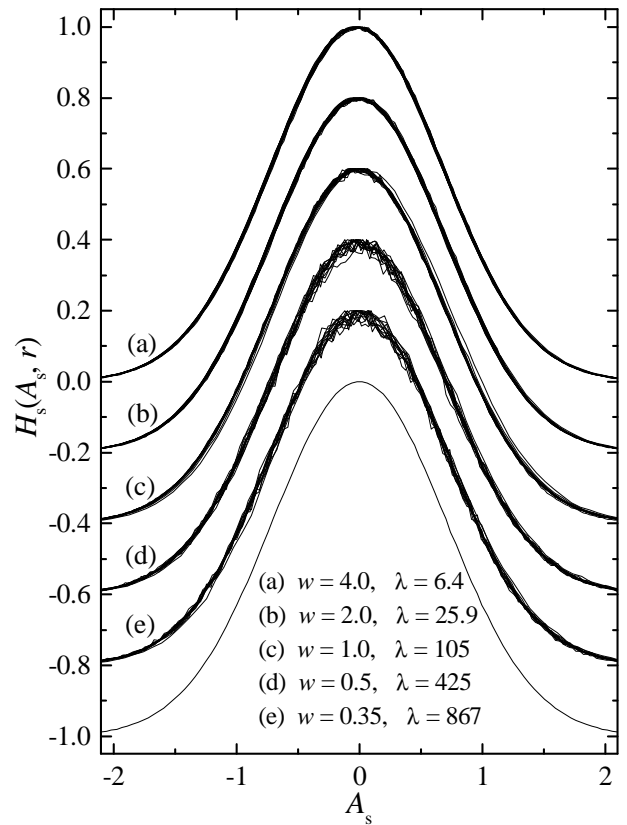
$$A_s = (A - r/\lambda) / \sqrt{\sigma r / \lambda}. \quad (\text{III.C.27})$$

aufgetragen. Die nötigen Lokalisierungslängen  $\lambda$ , die in der Abbildung angegeben sind, stimmen gut mit der analytischen, in Störungstheorie gewonnen Vorhersage  $\lambda(w) = 105.045/w^2$  [KAPUS&WEGNER-81, ECONOMOU-90] überein. Selbst bei der stärksten Unordnung  $w = 4.0$ , bei der die Störungstheorie problematisch ist, betragen die Korrekturen weniger als 3%. Im Rahmen der numerischen Genauigkeit ist auch der für den Daten-Kollaps notwendige Wert der Fluktuationsbreite  $\sigma = 2.1 \pm 0.15$  konsistent mit der Standard-Ein-Parameter-Skalentheorie ( $\sigma = 2$ ). Die logarithmische Normalverteilung (III.C.25) der Amplituden  $\exp(-A) = |\psi_n|/|\psi_{n0}|$  kann mit Hilfe der Transfer-Matrix-Methode (siehe Abschnitt III.C.1) motiviert werden. Nach den Glgn. (III.C.3) und (III.C.4) ergibt sich  $\psi_n$  aus  $\psi_0$  und  $\psi_1$  durch Multiplikation mit  $n - 1$  Matrizen  $\mathfrak{M}_\ell$ ,

$$\begin{pmatrix} \psi_\ell \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = \prod_{\ell=1}^{n-1} \mathfrak{M}_\ell \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \mathfrak{M}_\ell = \begin{pmatrix} E - \varepsilon_\ell & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.C.28})$$

für das diagonale Anderson-Modell. Das Matrizenprodukt enthält viele Produkte der potenziellen Energien  $\varepsilon_n$ , und solche Produkte von unabhängigen, gleichverteilten Zufallsvariablen folgen asymptotisch einer logarithmischen Normalverteilung aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes; die genauen Bedingungen sind hier nicht relevant. Daher ist es plausibel, dass  $|\psi_n|$  asymptotisch für große  $n$  einer logarithmischen Normalverteilung folgt.

Der sehr gute Daten-Kollaps der numerischen Daten für 5 verschiedene Unordnungsstärken  $w$  und 15 bis 17 verschiedene Abstände  $r$  vom Lokalisierungszentrum in Abb. III.C.2 zeigt, dass die Ein-Parameter-Skalentheorie für das betrachtete Modell ohne Abweichungen bei den Fluktuationen gilt.



**Abb. III.C.2:** Skalierte Amplitudenverteilungen  $H_s(A_s, r)$  für das eindimensionale Standard-Anderson-Modell bei fünf verschiedenen Unordnungsstärken  $w = 4.0$  bis  $0.35$  für (a) bis (e) (von oben nach unten) und für  $r \approx 20\lambda$  bis  $250\lambda$ . Die Kurven für verschiedene  $w$  sind vertikal um Vielfache von  $0.2$  verschoben. Die untere durchgezogene Linie entspricht dem Ansatz (III.C.25). Zur Berechnung der Verteilungen wurden (a) 4200000, (b) 340000, (c) 1100000 (d) 200000 und (e) 170000 Eingenzustände auf Ketten mit Längen  $L > 250 \lambda(w)$  berechnet (nach [KANTELHARDT&BUNDE-02]).

Dabei stimmen nicht nur die Formen der Verteilungen überein, sondern auch die Werte der beiden Parameter  $\lambda$  und  $\sigma$  entsprechen sehr weitgehend den Vorhersagen.

### III.C.4. Die Tunnelamplitude für Mehrelektronensysteme

Für Ein-Elektronen-Zustände gibt es viele, gut etablierte Methoden zur Charakterisierung des Lokalisierungs- und Transportverhaltens, wie in den vorhergehenden Abschnitten beschrieben. Bei wechselwirkenden quantenmechanischen Mehrelektronensystemen ist dies viel schwieriger. Der Grund ist, dass ein ausgedehnter Mehrelektronen-Zustand keineswegs elektronischen Transport ermöglichen, d.h. einem metallischen Verhalten entsprechen, muss. Diese Zustände werden aus mehreren ununterscheidbaren Teilchen gebildet, und selbst wenn diese Teilchen überall im System verteilt sind, können sie – jedes an seinem Platz – unbeweglich („lokalisiert“) sein. Im Allgemeinen werden Mehrelektronen-Zustände sogar immer ausgedehnt sein, schon weil sich die Elektronen abstoßen und daher über das gesamte System verteilen. Die Unterscheidung zwischen „lokalisiert“ und „ausgedehnt“ taugt daher nicht zu einer Charakterisierung von isolierendem oder metallischem Verhalten. Obwohl die Zustände über das ganze System ausgebreitet sind, ist die Eigenwertabstands-Verteilung sowohl im metallischen als auch im isolierenden Bereich die Poisson-Verteilung (III.C.9) [BERKOVITS-94]. Der Grund ist, dass es keine Niveauabstoßung gibt, weil mit mehreren Elektronen (mit mehreren Freiheitsgraden) zu viele Kombinationsmöglichkeiten vorhanden sind. Dementsprechend sind weder die in Abschnitt III.C.2 beschriebene Eigenwertstatistik noch die in Abschnitt III.C.3 beschriebenen Methoden zur Charakterisierung von Eigenfunktionen für Mehrelektronensysteme direkt anwendbar.

Es wurde zwar gezeigt, dass sich für polarisierte Elektronen durch die Elektron-Elektron-Wechselwirkung eine qualitative Änderung in mehreren Eigenschaften des Systems ergibt, wie z.B. in der Eigenwertstatistik von zwei (oder mehreren) Teilchen [TALAMANTES*etal*-96, CUEVAS-99, SHEPELYANSKY&SONG-99, SHEPELYANSKY-00, TALAMANTES&POLLAK-00, WAINTA*etal*-00, BENENTI&SHEPELYANSKY-01], in den Mustern des persistenten Stromflusses ohne Feld [BERKOVITS&AVISHAI-98, BENENTI*etal*-99, SELVA&WEINMANN-00, BENENTI*etal*-00], sowie in der Veränderung der Ladungsträgerdichten als Antwort auf eine externe Störung [WAINTA*etal*-99]. Aber trotzdem wurde keine erhöhte elektrische Leitfähigkeit beobachtet [BERKOVITS&AVISHAI-96, VOJTA*etal*-98, BERKOVITS*etal*-01]. Das zeigt, dass die betrachteten Eigenschaften nicht direkt mit dem Transportverhalten in Verbindung stehen. Persistente Stromflüsse ohne Feld wurden auch für wechselwirkende Elektronen mit Spin betrachtet [RAMINE*etal*-95, KAMAL*etal*-95, RÖMER&PUNNOOSE-95, WANG*etal*-96, KOTLYAR&DASSARMA-01, SELVA&PICHARD-01].

Hier will ich zur Untersuchung der Transporteigenschaften in wechselwirkenden Elektronensystemen ohne und mit Spinfreiheitsgrad den Participation Ratio der Tunnelamplitude  $\langle 0^N | \hat{a}_r^+ | 0^{N-1} \rangle$  betrachten, was im Folgenden motiviert und erklärt werden soll.

#### a) Motivation: Ein- und Vielteilchen-Zustandsdichte und -Leitfähigkeit

Wie in Abschnitt III.B.5 und 6 beschrieben führen die Anderson-Modelle für  $N$  wechselwirkende Elektronen auf Vielteilchen-Eigenwerte  $E_\alpha^N$  bzw.  $E_\alpha^{N,S_z}$  und die entsprechenden Eigenzustände  $|\alpha^N\rangle$  bzw.  $|\alpha^{N,S_z}\rangle$  anstelle von Einteilchen-Eigenwerten  $E_n$  und Einteilchen-Wellenfunktionen  $\psi_n(\mathbf{r})$ . Die Indizes  $\alpha$  bzw.  $n$  sollen hier die Eigenzustände durchnummerieren, während die Ortsabhängigkeit durch Vektoren  $\mathbf{r}$  ausgedrückt wird. In der Rechnung werden die Zustände  $|\alpha^N\rangle$  bzw.  $|\alpha^{N,S_z}\rangle$  dargestellt als Linearkombination in der Basis aller möglichen Anordnungen der Elektronen im Gitter, d.h. man bekommt einen Koeffizienten dafür, dass die  $N$  Elektronen auf den Plätzen 1 bis  $N$  sind, einen dafür dass sie auf den Plätzen 1 bis  $N-1$  und  $N+1$  sind, usw. Bei einer einfachen Projektion der Eigenzustände in den Ortsraum geht die Information über die einzelnen Teilchen

verloren, und alle Zustände erscheinen ausgedehnt, weil überall im System Elektronen vorkommen. Die Ortsinformation muss also extrahiert werden, ohne alle Teilchen zu mischen. Durch Analogiebetrachtungen soll nun motiviert werden, warum für Vielteilchen-Systeme die Tunnelamplitude  $\langle 0^N | \hat{a}_r^+ | 0^{N-1} \rangle$  zwischen dem Grundzustand  $|0^{N-1}\rangle$  mit  $N-1$  Elektronen und dem Grundzustand  $|0^N\rangle$  mit  $N$  Elektronen, bei der auf dem Platz  $\mathbf{r}$  ein Elektron hinzugefügt wird, die Rolle der Einteilchen-Wellenfunktionen  $\psi_n(\mathbf{r})$  einnimmt.

Um mit der Energie  $E$  einen Elektronentransport durch das System durchzuführen, muss auf einem beliebigen Gitterplatz  $\mathbf{r}$  ein Elektron hinzugeführt werden, und dann auf einem anderen Gitterplatz  $\mathbf{r}'$  ein Elektron abgeführt werden, wobei die Elektronen ununterscheidbar sind. Wenn keine Elektron-Elektron-Wechselwirkungen berücksichtigt werden, kommt es für die Wahrscheinlichkeit beider Prozesse auf die Amplitudenquadrate der Einteilchen-Wellenfunktionen,  $|\psi_n(\mathbf{r})|^2$  und  $|\psi_n(\mathbf{r}')|^2$ , an. Wenn hingegen  $N$  Elektronen im Spiel sind, muss das eine zusätzliche Elektron zunächst auf dem Platz  $\mathbf{r}$  erzeugt werden,  $\hat{a}_r^+ |0^{N-1}\rangle$ . Wenn sich dieser (angeregte) Zustand mit  $N$  Elektronen sehr vom Grundzustand  $|0^N\rangle$  unterscheidet, ist der Prozess eher unwahrscheinlich. Das Betragsquadrat des entsprechenden Matrixelements  $\langle 0^N | \hat{a}_r^+ | 0^{N-1} \rangle$  gibt daher die Wahrscheinlichkeit des ersten Teilprozesses an. Dementsprechend ist das Betragsquadrat von  $\langle 0^{N-1} | \hat{a}_{r'} | 0^N \rangle$ , dem komplex Konjugierten von  $\langle 0^N | \hat{a}_r^+ | 0^{N-1} \rangle$ , ein sinnvolles Maß für die Wahrscheinlichkeit des zweiten Teilprozesses. Man sieht, wie  $\langle 0^N | \hat{a}_r^+ | 0^{N-1} \rangle$  hier die Funktion von  $|\psi_n(\mathbf{r})|^2$  übernimmt.

Eine eher formale Motivation lässt sich aus dem Vergleich der Formeln für die Zustandsdichte und die Transmission gewinnen. In der Einteilchen-Näherung ist die Zustandsdichte gegeben durch

$$v(E) = \sum_n \delta(E - E_n) = \sum_n \int |\psi_n(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \delta(E - E_n). \quad (\text{III.C.29})$$

Für Vielteilchensysteme lautet sie hingegen [EFROS&PIKUS-95]

$$v(E) = \sum_\alpha \left| \left\langle \alpha^N \left| \sum_{\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{r}}^+ \right| 0^{N-1} \right\rangle \right|^2 \delta \left[ E - (E_\alpha^N - E_0^{N-1}) \right]. \quad (\text{III.C.30})$$

Ähnliches gilt für die Transmission  $t(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$  eines Elektrons mit Energie  $E$  zwischen den Plätzen  $\mathbf{r}$  und  $\mathbf{r}'$ , die in der Einteilchen-Näherung

$$t(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}') \delta(E - E_n) \quad (\text{III.C.31})$$

lautet, während für wechselwirkende Systeme

$$t(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \sum_\alpha \langle 0^N | \hat{a}_{\mathbf{r}}^+ | 0^{N-1} \rangle \langle 0^{N-1} | \hat{a}_{\mathbf{r}'} | 0^N \rangle \delta \left[ E - (E_\alpha^N - E_0^{N-1}) \right] \quad (\text{III.C.32})$$

angesetzt werden muss [MEIR&WINGREEN-92]; vgl. obige Erklärung dieses Ausdrucks in Worten. Die Transmission geht direkt ein in die Landauer Formel für die elektrische Leitfähigkeit des gesamten Systems [LANDAUER-57, BÜTTIKER-86],

$$\sigma(E) = \frac{e^2}{h} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} |t(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)|^2, \quad (\text{III.C.33})$$

bei der die Summe über alle Punkte auf den Kontaktflächen der Probe läuft. Ohne Wechselwirkung reduziert sich Gl. (III.C.30) zu (III.C.29) und Gl. (III.C.32) zu (III.C.31). Diese Motivation legt es nahe, dass die Tunnelamplitude  $\langle 0^N | \hat{a}_r^+ | 0^{N-1} \rangle$  geeignet ist, die Rolle der Einteilchen-Wellenfunktionen  $\psi_n(\mathbf{r})$  einzunehmen. Ein verwandtes Konzept wurde von [JEON*et al.*-99] vorgeschlagen.

### b) Definition und Normierung der Tunnelamplitude

Wenn nun die Tunnelamplituden  $\langle 0^N | \hat{a}_r^+ | 0^{N-1} \rangle$  die Einteilchen-Wellenfunktionen  $\psi_n(\mathbf{r})$  ersetzen sollen, fällt als erstes auf, dass sie nicht normiert sind. Ein Vielteilchen-Eigenzustand ist bei einer

### III.C. Methoden zur Untersuchung von Lokalisierung und Fluktuationen

Störungstheorie eine Überlagerung vieler unterschiedlicher Slater-Determinanten, und es dominieren die Matrixelemente von Zuständen, die Quasiteilchen entsprechen [MAHAN-90]. Die Quasiteilchen (anstelle von normalen Teilchen) als Basisobjekte haben aufgrund der Wechselwirkung eine endliche Lebensdauer, was zur Verletzung der Normierung führt. Hier wird zwar keine Störungstheorie aufgestellt, aber die Ursache für die Verletzung der Normierung ist ähnlich. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen haben zwei unterschiedliche Auswirkungen auf die Eigenschaften des Systems. Die erste Auswirkung, die unabhängig von der Quanten-Lokalisierung ist, besteht in der Variation der Zustandsdichte bei einer gegebenen Energie, während die zweite Auswirkung, die den Kern der Quanten-Lokalisierung betrifft, sich durch eine Veränderung der Korrelationseigenschaften der Tunnelamplitude zwischen zwei Punkten äußert. Daher ist es für eine Untersuchung des Einflusses der Wechselwirkung auf die Quanten-Lokalisierung sinnvoll, eine normierte (effektive) Tunnelamplitude zu definieren,

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{\langle 0^N | \hat{a}_{\mathbf{r}}^+ | 0^{N-1} \rangle}{\left[ \sum_{\mathbf{r}} \langle 0^N | \hat{a}_{\mathbf{r}}^+ | 0^{N-1} \rangle^2 \right]^{1/2}}. \quad (\text{III.C.34})$$

Diese verwende ich in Abschnitt III.F zur Untersuchung der Transporteigenschaften des wechselwirkenden Systems. Da aufgrund der Wechselwirkungen nur kleine Systeme betrachtet, und keine asymptotischen Lokalisierungslängen berechnet werden können, bietet es sich an, die Lokalisierungseigenschaften der normierten Tunnelamplitude durch das Anteils-Verhältnis (Participation Ratio) zu charakterisieren (vgl. Gl. (III.C.11)),

$$P = \left[ \sum_{\mathbf{r}} |\phi(\mathbf{r})|^4 \right]^{-1}. \quad (\text{III.C.35})$$

Dabei muss natürlich die normierte (effektive) Tunnelamplitude  $\phi(\mathbf{r})$  nach Gl. (III.C.34) verwendet werden. Zur numerischen Berechnung der Tunnelamplitude werden die Grundzustände von Systemen mit  $N-1$  und mit  $N$  Elektronen benötigt, aber keine angeregten Zustände, was den Rechenaufwand in Grenzen hält. Solange die Rechnung ohne Berücksichtigung des Elektronenspins durchgeführt wird (polarisierte Elektronen), sind die Grundzustände einfach die Zustände mit den tiefsten Energien  $E_{\alpha}^{N-1}$  und  $E_{\alpha}^N$ .



### III.D. Anomale Fluktuationen und Lokalisierung in selbst-affinen eindimensionalen Potenzialen

In Abschnitt III.B.4 wurden bereits Einteilchen-Anderson-Modelle mit korrelierten Potenziallandschaften angesprochen. Ein besonderes Interesse an diesen Modellen besteht, weil einige Autoren dafür ausgedehnte Zustände fanden und auch weiterhin finden [DUNLAP*etal*-90, HIRAMOTO&KOHMOTO-92, IZRAILEV&KROKHIN-99, IZRAILEV*etal*-01, HILKE-03, SEDRAKYAN-04], was nicht in die Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung passt, nach der die Zustände von ein- und zweidimensionalen Systemen lokalisiert sind (siehe Abschnitt III.B.3). Inzwischen ist zwar sicher, dass einige Systeme nicht im gesamten Energiespektrum der Skalentheorie folgen, weil insbesondere in der Nähe der Bandkanten weitere Längenskalen relevant sind [RUß*etal*-99, DEYCH*etal*-00, DEYCH*etal*-01, RUß-02, DEYCH*etal*-02]. Das bedeutet aber keineswegs, dass es einen echten Übergang zu metallischen Zuständen gibt. Bei den wirklich ungeordneten Systemen ohne Periodizität oder Quasi-periodizität scheint es sich vielmehr um einen Übergang zwischen stark und schwach lokalisierten Zuständen zu handeln [IZRAILEV&MAKAROV-03], wobei „schwach lokalisiert“ bedeutet, dass die Lokalisierungslänge die Systemgröße übersteigt und man dadurch fast metallisches Verhalten mit gewissen Korrekturen sieht. Aus diesem Grund wird in der Literatur leider oft nicht klar zwischen ausgedehnten und schwach lokalisierten Zuständen unterschieden; obwohl nur erstere im Konflikt mit der Skalentheorie der Lokalisierung stehen.

Der mittlerweile weitgehend geklärten Situation bei stationären korrelierten Potenzialen steht eine Kontroverse bei selbst-affinen Potenzialen gegenüber, die ungeordnet und besonders stark fluktuierend sind. In mehreren Arbeiten wird dafür die Existenz eines Metall-Isolator-Übergangs behauptet [DEMOURA*etal*-98, DEMOURA*etal*-99, CARPENA*etal*-02, YAMADA-04]. In diesem Abschnitt untersuche ich das Lokalisierungs- und Fluktuationsverhalten der Zustände in solchen Potenzialen und beleuchte kritisch die in den genannten Arbeiten gemachten Annahmen. Die Anfänge der Arbeiten finden sich in meiner Dissertation [KANTELHARDT-99] (und müssen hier wegen des Zusammenhangs wiederholt werden), die Theorie dazu haben wir später aufgestellt. Wesentliche Teile von Abschnitt 1 sind in [BUNDE*etal*-00, RUß*etal*-01] publiziert und wesentliche Teile von Abschnitt 2 in [KANTELHARDT*etal*-00, BUNDE*etal*-00].

#### III.D.1. Nichtstationäre selbst-affine Potenziale

Selbst-affine Signale sind sehr stark korreliert, weil sich ein Wert aus dem vorhergehenden Wert plus einer kleinen Veränderung ergibt,  $\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} + \delta_n$  mit  $\langle \delta_n \rangle = 0$  und  $\langle \delta_n^2 \rangle = \Delta^2$  (siehe Gl. (III.B.10)). Wie die Spur eines Irrläufers (das Profil eines Random Walks) sind sie nichtstationär und können durch den Exponenten  $\alpha$  charakterisiert werden, der angibt, wie die Varianz mit der Systemgröße  $L$  ansteigt (vgl. Gl. (III.B.11)),

$$\left\langle (\varepsilon_L - \varepsilon_0)^2 \right\rangle \sim \left\langle (\varepsilon_n - \langle \varepsilon_n \rangle_L)^2 \right\rangle_L = \langle \varepsilon_n^2 \rangle_L - \langle \varepsilon_n \rangle_L^2 \equiv \sigma_L^2(\varepsilon_n) \sim L^{2\alpha} \quad \text{mit } \alpha > 0. \quad (\text{III.D.1})$$

Dabei ist die Mittelung  $\langle \dots \rangle_L$  über viele Konfigurationen der Länge  $L$  gemeint. Die Schwankungsbreite der Potenziallandschaft lässt sich unabhängig von der Systemgröße am besten durch  $\Delta = \langle \delta_n^2 \rangle^{1/2}$  charakterisieren. Der Anstieg der Standardabweichung  $\sigma_L(\varepsilon_n)$  mit zunehmendem  $L$  nach Gl. (III.D.1) führt – selbst wenn  $\Delta$  klein ist – für hinreichend große Systeme (große  $L$ ) stets zu einer Schwankungsbreite der  $\varepsilon_n$ , die die Breite des Bandes im Anderson-Modell übersteigt. Diese Breite ist  $E_{\max} - E_{\min} = 2dt$  mit dem Nichtdiagonalelement  $t$  (Energieeinheit) und der Raumdimension  $d$ . Wenn mehrere hintereinander folgende Potenzialwerte  $\varepsilon_n$  außerhalb des Bandes auftreten, ist das System in diesem Bereich nicht mehr transparent, und alle Eigenzustände klingen schnell exponentiell ab. Dadurch kommt es ab einer von  $\Delta$  und  $E$  abhängigen Systemgröße  $L$  zu einer Veränderung des Lokalisierungsverhaltens von normaler (starker) Lokalisierung zu extrem starker Lokalisierung.

### III.D. Anomale Fluktuationen und Lokalisierung in selbst-affinen eindimensionalen Potenzialen

Diese Veränderung ist mit starken Fluktuationen der Lokalisierungslänge  $\lambda$  im Vergleich unterschiedlicher Konfigurationen  $v$  verbunden. Daher ist es nicht sinnvoll, nur eine Lokalisierungslänge  $\lambda = \langle \lambda^{(v)} \rangle$  anzugeben, denn dadurch wird die breite Verteilung der Lokalisierungslängen nicht vollständig charakterisiert. Die Verteilung wird so breit, dass unterschiedliche Mittelwerte verschiedenes Verhalten aufweisen. Konkret werden hier die drei Mittelwerte

$$\lambda_{\text{arith}} \equiv \frac{1}{N} \sum_{v=1}^N \lambda^{(v)}, \quad \lambda_{\text{typ}} \equiv \exp \left[ \frac{1}{N} \sum_{v=1}^N \ln \lambda^{(v)} \right] \quad \text{und} \quad \lambda_{\text{Lyapunov}} \equiv \left[ \frac{1}{N} \sum_{v=1}^N (\lambda^{(v)})^{-1} \right]^{-1} \quad (\text{III.D.2})$$

betrachtet, wobei  $N$  die Anzahl der Konfigurationen ist. Der arithmetische Mittelwert  $\lambda_{\text{arith}}$  wird besonders von den Konfigurationen  $v$  mit großer Lokalisierungslänge  $\lambda^{(v)}$  dominiert und im Lyapunov-Mittelwert  $\lambda_{\text{Lyapunov}}$  (Bezeichnung wegen des Lyapunov-Exponenten  $\gamma = 1/\lambda$ ) dominieren die Konfigurationen  $v$  mit kleiner Lokalisierungslänge  $\lambda^{(v)}$ . Der typische Mittelwert  $\lambda_{\text{typ}}$  zeigt das typische Verhalten ähnlich wie ein Median und liegt zwischen den anderen beiden Fällen. Da er kaum von extremen  $\lambda^{(v)}$  beeinflusst wird, sind die numerischen Ergebnisse für den typischen Mittelwert stabiler. Im Sinne der Multifraktalitätsanalyse wäre prinzipiell eine Betrachtung von beliebigen Momenten der Lokalisierungslänge vorstellbar, aber hier genügt es, sich auf die drei in Gl. (III.D.2) angegebenen Fälle zu beschränken. Zusätzlich beschreibe ich die zugehörigen Fluktuationen der Lokalisierungslängen  $\lambda^{(v)}$  der einzelnen Konfigurationen  $v$  durch

$$\begin{aligned} \delta \lambda_{\text{arith}} &\equiv \left[ \frac{1}{N} \sum_{v=1}^N (\lambda^{(v)})^2 - \lambda_{\text{arith}}^2 \right]^{1/2} \frac{1}{\lambda_{\text{arith}}}, \quad \delta \lambda_{\text{typ}} \equiv \exp \left\{ \left[ \frac{1}{N} \sum_{v=1}^N \ln^2 \lambda^{(v)} - (\ln \lambda_{\text{typ}})^2 \right]^{1/2} \right\} \\ \text{und} \quad \delta \lambda_{\text{Lyapunov}} &\equiv \left[ \frac{1}{N} \sum_{v=1}^N (\lambda^{(v)})^{-2} - \lambda_{\text{Lyapunov}}^{-2} \right]^{1/2} \lambda_{\text{Lyapunov}}. \end{aligned} \quad (\text{III.D.3})$$

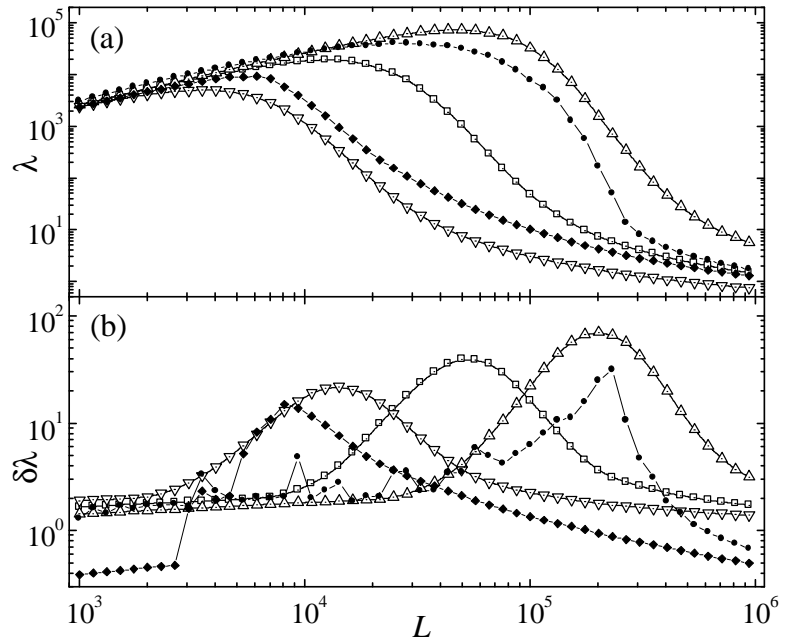
Abbildung III.D.1 zeigt die numerischen Ergebnisse der Transfer-Matrix-Methode (siehe Abschnitt III.C.1) für die Systemgrößenabhängigkeit der Mittelwerte und der Fluktuationen der Lokalisierungslängen in nichtstationären selbst-affinen Potenzialen. Für schwach lokalisierte (quasi-ausgedehnte) Zustände, deren Lokalisierungslänge eigentlich größer als die Systemgröße sein müsste,  $\lambda \equiv \lambda(\infty) \gg L$ , steigt die effektive Lokalisierungslänge  $\lambda(L)$  als Funktion der Systemgröße linear an, während bei normal lokalisierten Zuständen  $\lambda(L)$  für  $L \rightarrow \infty$  gegen einen konstanten Wert konvergiert. Abbildung III.D.1(a) zeigt, dass die Zustände für kleine  $L$  zunächst schwach lokalisiert sind. Entgegen dem Verhalten für normale lokalisierte Zustände im Anderson-Modell geht  $\lambda(L)$  für größere Systeme nicht in einen konstanten Verlauf über, sondern es gibt einen scharfen Abfall über mehrere Größenordnungen, teilweise wie  $\lambda(L) \sim L^{-4}$ . Die Systemgröße  $\ell$ , bei der der Abfall erfolgt, hängt empfindlich von  $\Delta$ ,  $\alpha$  und  $E$  ab und auch von der verwendeten Mittelungsprozedur;  $\ell$  wird unten analytisch hergeleitet aus der Bedingung dass die Schwankungsbreite des Potenzials die Bandbreite übersteigt. Für noch größere Systeme stabilisiert sich der Wert der Lokalisierungslänge dann auf sehr niedrigem Niveau,  $\lambda(L \rightarrow \infty) < 10$ . Ein solches Verhalten lässt sich nicht durch die Ein-Parameter-Skalentheorie beschreiben, weil man mindestens zwei Lokalisierungslängen (eine große und eine kleine) und Übergangsbereiche benötigt. Man kann das Verhalten vielmehr als einen Übergang zwischen einem schwach lokalisierten Bereich für kleine  $\Delta$  und  $L$  und einem extrem stark lokalisierten Bereich für große  $\Delta$  und  $L$  verstehen.

Abbildung III.D.1(b) zeigt, dass es in dem Übergangsbereich, in dem die Mittelwerte der Lokalisierungslänge schnell fallen, starke Fluktuationen zwischen den einzelnen Konfigurationen gibt, die im Wendepunkt der  $\lambda(L)$ -Kurven maximal sind. Die Ergebnisse für die Fluktuationen in arithmetischer oder Lyapunov-Mittelung sind numerisch instabil, weil sie von einzelnen extrem großen oder extrem kleinen Einzelwerte  $\lambda^{(v)}$  wesentlich beeinflusst werden, aber die typischen Fluktuationen zeigen einen glatten Verlauf. Für sehr kleine oder sehr große Werte von  $L$  werden die Fluktuationen

nen gering, und dann stimmen auch die verschiedenen Mittelwerte ungefähr überein. Sowohl in Abhängigkeit von der Systemgröße als auch in Abhängigkeit von der Energie lässt sich der Übergang von schwach lokalisierten zu extrem lokalisierten Zuständen am einfachsten anhand des Maximums in den Fluktuationen  $\delta\lambda_{\text{typ}}$  erkennen; siehe auch [DEYCHetal-98], wo eine ähnliche Prozedur für ein anderes Problem wohl erstmals verwendet wurde.

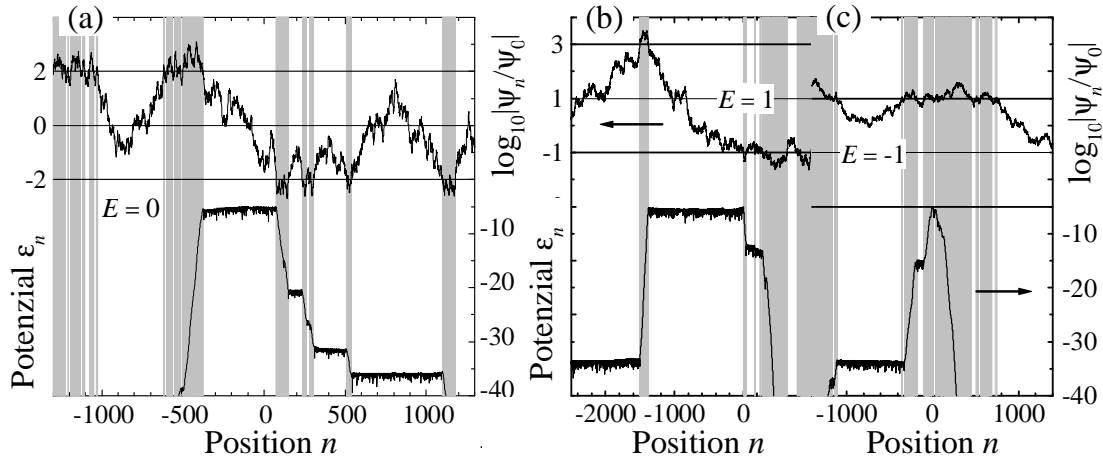
Um die Ursache für das Auftreten der extrem starken Lokalisierung zu ergründen, die im normalen Anderson-Modell nicht vorkommt, ist es sinnvoll, explizit die Form von Eigenzuständen zu betrachten. Abbildung III.D.2 zeigt drei Beispiele für Eigenfunktionen bei unterschiedlichen Energien zusammen mit den Potenziallandschaften. Bei  $E \approx 0$  (Abb.

III.D.2(a)) sieht man, dass starke Abfälle der Amplitude genau dort auftreten, wo das lokale Potenzial  $\epsilon_n$  den Wert 2 übersteigt oder unter den Wert  $-2$  fällt. Die Stärke des Abfalls ist direkt proportional zur Breite des Bereichs, in dem das Potenzial außerhalb dieser Grenzen liegt. Es ist klar, dass der Anteil solcher Bereiche wegen Gl. (III.B.11) für größere Systeme zunimmt, so dass die mittlere Lokalisierungslänge  $\lambda_{\text{typ}}$  abnimmt. Hier ist anzumerken, dass die für die Bestimmung der Lokalisierungslängen verwendete Transfer-Matrix-Methode (siehe Abschnitt III.C.1) immer einen Mittelwert der Lokalisierungslänge über die gesamte Systemgröße ermittelt. Schon ein Blick auf Abb. III.D.2(a) genügt aber, um zu erkennen, dass solche Eigenzustände nicht durch einen exponentiellen Ansatz mit einer einzigen Lokalisierungslänge charakterisiert werden können. Vielmehr muss man zwischen Bereichen unterscheiden, in denen die Potenziallandschaft innerhalb der Grenzen  $|\epsilon_n| < 2$  bleibt und Bereichen, in denen diese Grenzen überschritten sind. Die tatsächlichen Lokalisierungslängen in beiden Bereichen unterscheiden sich drastisch, so dass die Zustände eher aus praktisch konstanten Bereichen und fast schlagartig abfallenden Bereichen bestehen, im Gegensatz zu normalen Anderson-Eigenfunktionen, die einen gleichmäßigen Abfall mit gleichmäßigen Fluktuationen aufweisen. Das ist auch der Grund für die starken Fluktuationen der Lokalisierungslängen in der Region des Übergangs, in der beide Bereichstypen etwa gleich häufig vorkommen. Die Abbildungen III.D.2(b) und (c) zeigen, dass für Eigenzustände mit  $E \neq 0$  die Grenzen des Potenzialbereichs, außerhalb von dem extreme Lokalisierung eintritt, verschoben sind auf  $|\epsilon_n - E| = 2$  (siehe horizontale Linien). Dort treten die starken Abfälle auf, sobald das lokale Potenzial größer als  $2 + E$  oder kleiner als  $2 - E$  wird. Dieses Verhalten lässt sich dadurch verstehen, dass in der Tight-Binding-



**Abb. III.D.1:** Systemgrößenabhängigkeit (a) der Lokalisierungslänge  $\lambda$  und (b) ihrer Fluktuationen  $\delta\lambda$  für selbst-affine Potenzial-Landschaften mit  $\alpha = 3/2$ , die durch Aufsummieren von unkorrelierten Zufallszahlen mit verschiedenen Varianzen  $\Delta^2$  generiert wurden. Die Rechnungen erfolgten mit der Transfer-Matrix-Methode bei  $E = 0.5$  (nahe bei aber nicht exakt an der Bandmitte) für  $10^4$  Konfigurationen. Die Symbole entsprechen verschiedenen Mittelwerten nach Gl. (III.D.2) bzw. den entsprechenden Fluktuationen nach Gl. (III.D.3) und verschiedenen  $\Delta$ : Mittelwert  $\lambda_{\text{typ}}$  und  $\Delta = 0.005$  ( $\triangle$ ),  $0.01$  ( $\square$ ),  $0.02$  ( $\nabla$ ), Mittelwert  $\lambda_{\text{arith}}$  und  $\Delta = 0.01$  ( $\bullet$ ) und Mittelwert  $\lambda_{\text{Lyapunov}}$  und  $\Delta = 0.01$  ( $\blacklozenge$ ) (nach [RUbeta1-01]).

### III.D. Anomale Fluktuationen und Lokalisierung in selbst-affinen eindimensionalen Potenzialen



**Abb. III.D.2:** Drei Beispiele von extrem lokalisierten Eigenzuständen (untere Kurven, rechte Skalen) mit Eigenwerten (a)  $E \approx 0$ , (b)  $E \approx 1$  und (c)  $E \approx -1$  in Potenzial-Landschaften (obere Kurven, linke Skalen) mit  $\alpha = 1/2$ , wobei einige Platzenergien  $\varepsilon_n$  größer als  $E + 2$  oder kleiner als  $E - 2$  sind (in den grau unterlegten Regionen). Man sieht, dass diese Regionen einen starken Abfall der Eigenfunktionsamplituden auslösen (nach [RUBetal-01]).

Gleichung (III.B.4) eine Verschiebung der Energie  $E$  und aller Potenziale (Diagonalelemente)  $\varepsilon_n$  um denselben konstanten Wert nichts ändert.

Für  $H < 1$  lässt sich die Systemgröße  $\ell$  abschätzen, bei der der Übergang von schwacher zu extremer Lokalisierung erfolgt. Das mittlere Verschiebungsquadrat  $\hat{\varepsilon}^2$  des Potenzials nach  $\ell$  Schritten mit der mittleren Weite  $\Delta$  beträgt nach der Random-Walk-Theorie [BUNDE&HAVLIN-94]

$$\hat{\varepsilon} \sim \Delta \ell^\alpha \quad \text{oder} \quad \ell(\hat{\varepsilon}) = A_1 \left( \frac{A_2 \hat{\varepsilon}}{\Delta} \right)^{1/\alpha} \quad (\text{III.D.4})$$

mit nicht universellen Konstanten  $A_1$  und  $A_2$ . Die Zustände werden extrem lokalisiert, sobald  $|\varepsilon_n - E|$  größer als 2 wird innerhalb des Systems der Länge  $L$ . Darum muss hier  $\hat{\varepsilon}$  mit dem Minimum von  $2 - E$  und  $2 + E$  identifiziert werden, d.h. mit  $2 - |E|$ , so dass wir

$$\ell(E, \Delta, \alpha) = A_1 \left( A_2 \frac{2 - |E|}{\Delta} \right)^{1/\alpha} \quad (\text{III.D.5})$$

als charakteristische Längenskala in dem selbst-affinen System erhalten. Der Übergang von schwacher zu extremer Lokalisierung erfolgt, wenn  $\ell(E_c, \Delta, \alpha)$  mit der Systemgröße  $L$  übereinstimmt. Darum kann aus  $\ell(E_c, \Delta, \alpha) = L$  die kritische Energie  $E_c$  für den Übergang bestimmt werden,

$$E_c = \pm \left[ 2 - \frac{\Delta}{A_2} \left( \frac{L}{A_1} \right)^\alpha \right]. \quad (\text{III.D.6})$$

Abbildung III.D.3 zeigt das daraus resultierende Phasendiagramm in der  $E$ - $\alpha$ -Ebene für verschiedene Werte von  $\Delta$  und  $L$ . Die durchgezogenen Linien entsprechen Gl. (III.D.6). Die Konstanten  $A_1 = 15.2 \pm 1.0$  und  $A_2 = 0.58 \pm 0.03$  wurden aus Random-Walk-Simulationen mit Gl. (III.D.4) bestimmt, wie in dem kleinen Bild in Abb. III.D.3 zu sehen. Die kritischen Linien sind symmetrisch,  $\alpha(E) = \alpha(-E)$ , und der Bereich extrem lokalisierter Zustände (oben im Bild) wächst mit zunehmendem  $L$  und zunehmendem  $\Delta$ . Unabhängig von Gl. (III.D.6) wurden die Übergangspunkte zwischen schwach und extrem lokalisierten Zuständen aus Transfer-Matrix-Rechnungen bestimmt, wobei die Lage des Maximums der Fluktuationen  $\delta\lambda_{\text{typ}}$  als Übergangspunkt betrachtet wurde. Man erkennt eine sehr gute Übereinstimmung der analytischen und numerischen Ergebnisse für den Übergang.

### III.D.2. Reskalierte selbst-affine Potenziale

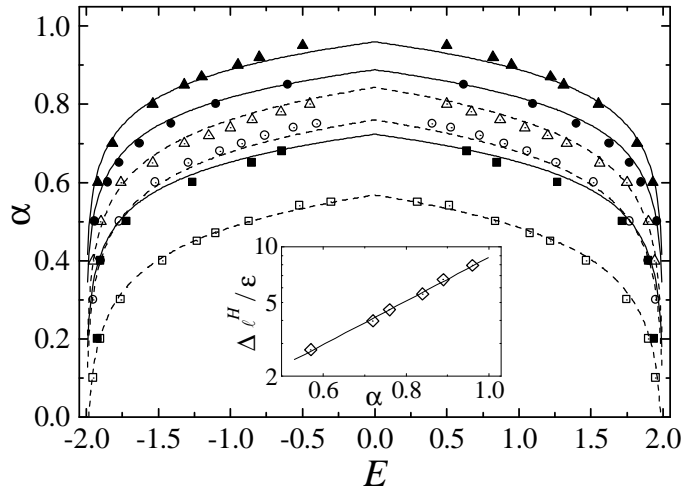
Wie eben gezeigt treten bei nichtstationären, selbst-affinen Potenzialen zwar anomal stark lokalisierte aber keine ausgedehnten Zustände auf. Trotzdem wurde in mehreren Arbeiten von ausgedehnten Zuständen und einem Metall-Isolator-Übergang dafür berichtet [DEMOURAetal-98, DEMOURAetal-99, CARPENAetal-02]. Der Grund ist, dass dabei die Potenziallandschaften künstlich stationär gemacht wurden.

Bei der brasilianischen Gruppe [DEMOURAetal-98, DEMOURAetal-99] geschah das durch eine neue Normierung für jede Systemgröße. Durch die Transformation  $\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon_n/L^\alpha$  wurde die Standardabweichung  $\sigma_L(\varepsilon_n)$  aus Gl. (III.B.11) für alle betrachteten Systemgrößen  $L$  konstant gehalten,  $\sigma_L(\varepsilon_n) = 1$ . Praktisch erfolgte dieser Schritt implizit bei der Erzeugung der Potenziallandschaften mittels der Fourier-Filter-Methode (siehe Abschnitt II.A.1.c). Hier ist anzumerken, dass [DEMOURAetal-98] den spektralen Exponenten des Potenzials  $\varepsilon_n$  (des Profils  $Y(n)$  in der Sprache der Zeitreihenanalyse) mit  $\alpha$  bezeichnen, den ich in

dieser Arbeit, wie bei der Zeitreihenanalyse üblich,  $\beta + 2$  nenne, weil  $\beta$  der spektrale Exponent der Inkrementreihe  $\delta_n$  ist (siehe Gl. (III.B.11)). Der Exponent  $\alpha_{\text{deMoura}}$  von [DEMOURAetal-98] ist mit dem Fluktuationsexponenten  $\alpha$  dieser Arbeit durch  $\alpha = (1 + \beta)/2 = (\alpha_{\text{deMoura}} - 1)/2$  verknüpft, so dass insbesondere  $\alpha_{\text{deMoura}} = 1$  hier  $\alpha = 0$  und  $\alpha_{\text{deMoura}} = 2$  hier  $\alpha = 1/2$  entspricht.

Abbildung III.D.4 zeigt, was die Reskalierung des Potenzials durch die Transformation  $\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon_n/L^\alpha$  bedeutet: Durch die künstliche Reskalierung wird die Potenziallandschaft mit zunehmender Systemgröße immer glatter, d.h. die lokalen Potenzial-Fluktuationen nehmen ab, obwohl die globalen Potenzial-Fluktuationen konstant bleiben. Weil die Lokalisierungslänge im Wesentlichen von den lokalen Fluktuationen bestimmt wird, solange die Werte von  $\varepsilon_n$  sich nicht um mehr als 2 von  $E$  unterscheiden, kann dadurch die Lokalisierungslänge mit zunehmender Systemgröße anwachsen, was ausgedehnte Zustände vortäuscht. Allerdings wird hier nicht Gleiches mit Gleichem verglichen, denn man vergleicht die Lokalisierungslänge eines kurzen Systems mit starken lokalen Fluktuationen mit der Lokalisierungslänge eines langen Systems mit schwachen lokalen Fluktuationen. Durch die gleichzeitige Variation von Systemgröße und Stärke der lokalen Fluktuationen werden so ausgedehnte Zustände vorgetäuscht.

In [DEMOURAetal-98] wurde ein numerisch bestimmtes, ungefähres Phasendiagramm für den Übergang zu diesen scheinbar ausgedehnten Zuständen präsentiert (siehe Abb. III.D.5 links), in dem für  $\alpha < 1/2$  (entsprechend  $\alpha_{\text{deMoura}} < 2$ ) nur lokalisierte Zustände auftreten. Die Form dieses Phasendia-



**Abb. III.D.3:** Phasendiagramm für das Anderson-Modell mit selbst-affinen, nichtstationären Potenzialen. Die Übergänge zu extrem lokalisierten Zuständen (oben und am Rand), die aus Rechnungen mit der Transfer-Matrix-Methode bestimmt wurden, sind in der  $E$ - $\alpha$ -Ebene für folgende Systemgrößen  $L$  und Inkrement-Standardabweichungen  $\Delta$  gezeigt:  $L = 2^{16}$ ,  $\Delta = 0.01$  ( $\square$ ),  $L = 2^{16}$ ,  $\Delta = 0.002$  ( $\circ$ ),  $L = 2^{16}$ ,  $\Delta = 0.001$  ( $\triangle$ ),  $L = 2^{18}$ ,  $\Delta = 0.001$  ( $\square$ ),  $L = 2^{18}$ ,  $\Delta = 0.0002$  ( $\bullet$ ) und  $L = 2^{18}$ ,  $\Delta = 0.0001$  ( $\blacktriangle$ ). Die entsprechenden theoretischen Kurven nach Gl. (III.D.6) sind für  $L = 2^{18}$  durchgezogen und für  $L = 2^{16}$  gestrichelt gezeichnet. Zur Ermittlung der Konstanten  $A_1$  und  $A_2$  wurde die Anzahl der Schritte bis zum Überschreiten einer vorgegebenen Schwelle durch Random-Walk-Simulationen für verschiedene  $\alpha$  bestimmt und im kleinen Bild halblogarithmisch aufgetragen, so dass die Konstanten nach Gl. (III.D.4) aus der angepassten Geraden folgen (nach [RUßetal-01]).

### III.D. Anomale Fluktuationen und Lokalisierung in selbst-affinen eindimensionalen Potenzialen

gramms lässt sich analytisch herleiten mit ähnlichen Argumenten wie ich sie im vorhergehenden Abschnitt für nicht renormierte selbst-affine Potenziale gebraucht habe. Für reskalierte Potenziallandschaften mit  $1/2 < \alpha < 1$  ist die mittlere Schrittweite  $\Delta$  nicht mehr konstant, sondern sie hängt von  $L$  und dem nun fixierten  $\sigma = \sigma_L(\epsilon_n)$  ab, wobei die Random-Walk-Theorie analog zu Gl. (III.D.4) ergibt

$$\Delta = B_2 \sigma \left( \frac{B_1}{L} \right)^\alpha \quad (\text{III.D.7})$$

Setzt man dies in Gl. (III.D.6) ein, ergibt sich nun für die kritische Energie  $E_c$  des scheinbaren Metall-Isolator-Übergangs

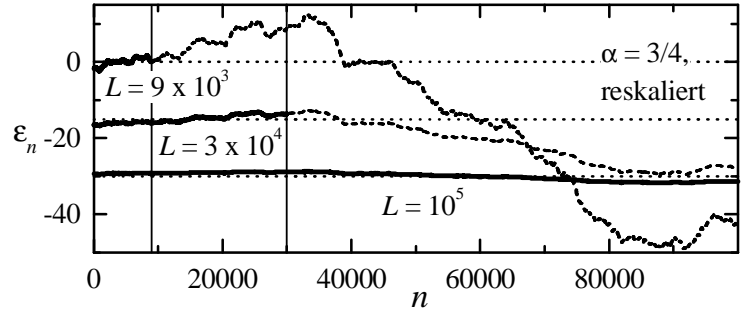
$$E_c = \pm \left[ 2 - \sigma \frac{B_1^\alpha B_2}{A_1^\alpha A_2} \right]. \quad (\text{III.D.8})$$

Abbildung III.D.5 zeigt einen Vergleich des Phasendiagramms von [DEMOURAetal-98] mit dem aus Gl. (III.D.8) resultierenden Phasendiagramm in der  $E$ - $\alpha$ -Ebene für verschiedene Werte von  $\sigma$ , wobei für  $A_1$  und  $A_2$  dieselben Werte verwendet wurden wie in Abb. III.D.3 und  $B_1$  und  $B_2$  angepasst wurden. Die numerischen Ergebnisse habe ich mit derselben Prozedur wie für Abb. III.D.3 erhalten, nur diesmal mit reskalierten Potenzialen. Das Phasendiagramm ist wieder symmetrisch,  $\alpha(E) = \alpha(-E)$ , und die Breite des Bereichs scheinbar ausgedehnter Zustände (um die Bandmitte für  $\alpha > 1/2$ ) nimmt mit zunehmender Breite  $\sigma$  ab. Auch hier erkennt man eine befriedigende Übereinstimmung zwischen der analytischen Formel und den numerischen Werten, die anzeigt, dass die von [DEMOURAetal-98] gezeigte Asymmetrie nicht tatsächlich vorhanden ist.

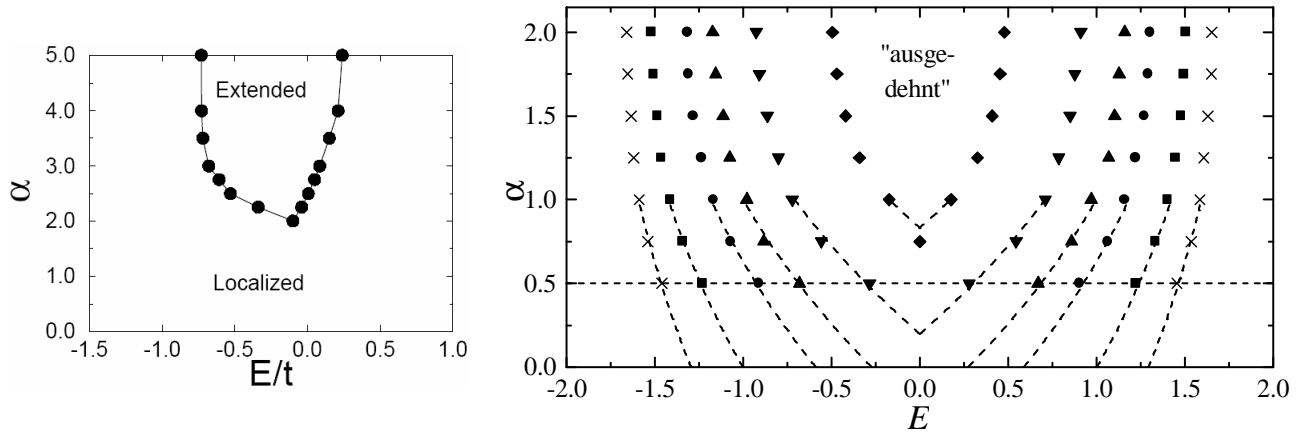
Für  $\alpha < 1/2$  gibt es keine scheinbar ausgedehnten Zustände, weil in diesem Bereich die Reskalierung des Potenzials durch die Transformation  $\epsilon_n \rightarrow \epsilon_n/L^\alpha$  zu schwach ist, um die Lokalisierungslänge  $\lambda(L) \sim w^{-2} \sim \Delta^{-2} \sim L^{2\alpha}$  (nach Abschnitt III.B.2 und Gl. (III.D.7)) schneller als linear mit  $L$  anwachsen zu lassen. Ausgedehnte Zustände erfordern mindestens ein lineares Anwachsen. Die Grenze bei  $\alpha = 1/2$  ist kein Phasenübergang, denn auf beiden Seiten der Linie gilt  $\lambda(L) \sim L^{2\alpha}$ , und die Zustände für  $\alpha < 1/2$  sind streng genommen auch nicht lokalisiert, denn ihre Lokalisierungslänge wird nicht konstant für große  $L$ . Daher gehen die Übergangslinien zu den echt lokalisierten Zuständen in der Nähe der Bandkante nach Gl. (III.D.8) auch für  $\alpha < 1/2$  weiter.

#### III.D.3. Diskussion nachfolgender Arbeiten

In nachfolgenden Arbeiten hat die brasilianische Gruppe ihre Untersuchungen von den Elektronen in reskalierten selbst-affinen Potenzialen [DEMOURAetal-98, DEMOURAetal-99] auf Magnonen (Spinwellen) in ferromagnetischen Ketten mit reskalierten selbst-affinen Kopplungskonstanten [LI-MAetal-02] und auf Phononen in harmonisch schwingenden Ketten mit reskalierten selbst-affin korrelierten Massen [DEMOURAetal-03] erweitert, die sich durch dieselben Gleichungen beschreiben lassen. In beiden Fällen finden sie einen Übergang zwischen (scheinbar) ausgedehnten Zuständen bei kleinen Energien bzw. Frequenzen (am unteren Ende des Spektrums) und lokalisierten Zuständen am oberen Ende des Spektrums. Weil die Lokalisierungslänge von Phononen und Magnonen am unteren Ende des Spektrums divergiert, reicht hier schon eine infinitesimale Reskalierung der



**Abb. III.D.4:** Illustration einer für verschiedene Systemgrößen  $L$  normierten (reskalierten) Potenziallandschaft  $\epsilon_n$  mit  $\alpha = 0.75$ . Die mit breiten Linien gezeichneten Bereiche zeigen für die drei  $L$ -Werte die tatsächlich betrachteten Abschnitte. Man erkennt, dass die Potenziallandschaften durch die Reskalierung mit zunehmender Systemgröße immer glatter werden (nach [KANTELHARDTetal-00]).



**Abb. III.D.5:** Phasendiagramme für das Anderson-Modell mit reskalierten selbst-affinen Potenzialen. Links ist das Ergebnis von [DEMOURAetal-98] wiedergegeben und rechts sind unsere analytischen und numerischen Ergebnisse gezeigt. Für den Vergleich ist zu beachten, dass das  $\alpha$  von [DEMOURAetal-98] (links) mit dem  $\alpha$  dieser Arbeit (rechts) durch  $\alpha = (\alpha_{\text{deMoura}} - 1)/2$  verknüpft ist. Im rechten Bild sind die Übergänge zwischen scheinbar ausgedehnten (Mitte, oben) und lokalisierten Zuständen, die aus Rechnungen mit der Transfer-Matrix-Methode bestimmt wurden, in der  $E$ - $\alpha$ -Ebene für folgende Potenzial-Varianzen  $\sigma^2$  gezeigt:  $\sigma^2 = 0.05$  ( $\times$ ),  $0.1$  ( $\square$ ),  $0.2$  ( $\circ$ ),  $0.3$  ( $\triangle$ ),  $0.5$  ( $\nabla$ ),  $1.0$  ( $\diamond$ ). Die entsprechenden theoretischen Kurven für  $\alpha < 1$  nach Gl. (III.D.8) sind gestrichelt gezeichnet. Die Konstanten  $A_1$  und  $A_2$  sind die gleichen wie für Abb. III.D.4 und  $B_1 = 8.8$  sowie  $B_2 = 1.83$  wurden angepasst. Für  $\alpha < 1/2$  gibt es keine scheinbar ausgedehnten Zustände (nach [RUBetal-01]).

Kopplungskonstanten bzw. der Massen aus, um scheinbar ausgedehnte Zustände hervorzurufen. Daher tritt der Übergang nicht erst für  $\alpha > 1/2$ , sondern schon für  $\alpha > 0$  auf (entsprechend  $\alpha_{\text{deMoura}} = 1$ ; siehe oben).

Kürzlich veröffentlichte die brasilianische Gruppe zusammen mit einer spanischen Gruppe eine Arbeit zur Zeitentwicklung von Elektronen-Wellenpaketen in korrelierten und selbst-affinen Potenzialen [DOMINGUEZ-ADAMEetal-03]. Sie fanden dabei für die selbst-affinen Potenziale mit  $\alpha = 1$  Blochwellen-artige Oszillationen der Wellenpakete, die einem Hin- und Herlaufen entsprechen, während für die stationären, langreichweitig korrelierten Potenziale mit  $\gamma = 0.5$  keine Oszillationen auftraten. Während die Autoren die Oszillationen bei  $\alpha = 1$  mit ausgedehnten Zuständen in Verbindung bringen, könnte ich mir eher ein Hin- und Herlaufen der Wellenpakete vorstellen zwischen Bereichen, in denen die selbst-affinen Potenzialgebirge die Grenzen für schwach lokalisierte Zustände überschreiten (vgl. Abb. III.D.2).

Eine andere Möglichkeit, die nichtstationären selbst-affinen Potenziale stationär zu machen, haben [CARPENAetal-02] verwendet. Sie betrachten anstelle der nichtstationären  $\epsilon_n$  die Reihe der entsprechenden Vorzeichen,  $\epsilon_n \rightarrow \epsilon_n/|\epsilon_n| = \text{sign}(\epsilon_n)$ . Durch diese Transformation ändert sich – anders als bei der Reskalierung mit  $\epsilon_n \rightarrow \epsilon_n/L^\alpha$  – der Fluktuationsexponent  $\alpha$ , der die Reihen charakterisiert, und der beispielsweise mit der DFA berechnet werden kann (siehe Abschnitt II.A.2). Meine Analysen zeigen, dass die binären Potenziale aus den Vorzeichen der nichtstationären selbst-affinen Signale durch einen Exponenten  $\alpha' \approx \min(\alpha/2, 1)$  charakterisiert sind, wenn  $\alpha$  nach Gl. (III.B.11) der Skalenexponent des zugrunde liegenden selbst-affinen Signals ist. Hier ist anzumerken, dass [CARPENAetal-02] die Selbstaffinität numerisch durch eine DFA-Untersuchung der Potenziale bestimmen, wobei die Reihe nochmals aufintegriert wird. Daher ist der dort angegebene Exponent  $\alpha_{\text{Carpena}}$  um 1 größer als das  $\alpha$  in dieser Arbeit.

Auch für die binären Potenziale aus den Vorzeichen der nichtstationären selbst-affinen Signale gibt es einen scheinbaren Übergang zu ausgedehnten Zuständen, und zwar bei  $\alpha'_c \approx 0.45$  [CARPENAetal-02], also ungefähr an derselben Stelle wie bei den reskalierten Potenzialen, bei denen  $\alpha_c = 0.5$  ist [DEMOURAetal-98, DEMOURAetal-99]. Der Grund für diesen Übergang ist, dass die Vorzeichen-

### III.D. Anomale Fluktuationen und Lokalisierung in selbst-affinen eindimensionalen Potenzialen

wechsel immer seltener werden, je höher  $\alpha$  (bzw.  $\alpha'$ ) ist. Daher handelt es sich nicht um einen echten Metall-Isolator-Übergang, sondern vielmehr um einen Übergang von einem ungeordneten System mit lokalisierten Zuständen zu einem praktisch geordneten System mit ausgedehnten Zuständen. Aus diesem Grund musste die Gruppe ihre Arbeit in Nature formal zurückziehen [CARPENAetal-03], aber sie halten weiter an den Ergebnissen und den Schlussfolgerungen fest. Die Erklärung des scheinbaren Phasenübergangs durch immer seltenere Vorzeichenwechsel kann auch zu einer skalentheoretischen Bestimmung des Übergangspunktes  $\alpha'_c$  verwendet werden. Die Anzahl von Vorzeichenwechseln (Nulldurchgängen, „zero-level crossings“) in einem selbstaffinen Signal steigt nicht linear mit der Signallänge  $L$  an, sondern ist, wie die Random-Walk-Theorie ergibt, proportional zu  $L^{1-\alpha}$ . Daher kann man erwarten, dass für  $\alpha \rightarrow 1$  die Nulldurchgänge so unwahrscheinlich werden, dass das binäre System mit den Vorzeichen-Potenzialen praktisch nicht mehr ungeordnet ist. Demnach ist der Phasenübergang bei  $\alpha' \approx \alpha/2 \rightarrow 0.5$  zu erwarten, in akzeptabler Übereinstimmung mit dem numerischen Ergebnis  $\alpha'_c \approx 0.45$  [CARPENAetal-02].

Eine dritte Möglichkeit für ein selbst-affines aber trotzdem nicht divergierendes System berichtet kürzlich [YAMADA-04]. Dabei wird die selbst-affine Potenziallandschaft nicht mit der Fourier-Filter-Methode erzeugt, sondern mit einem deterministisch-chaotischen Generator, der so genannten „Bernoulli Map“. Diese liefert Signale mit Wertebereich zwischen 0 und 1, die – bei geeignet gewählten Parametern (hier  $B > 2$ ) – nichtstationär und selbst-affin sind entsprechend Gl. (III.B.11). Obwohl dafür ein exponentielles Verschwinden des Lyapunov-Exponenten (Anwachsen der Lokalisierungslänge) mit ansteigendem  $B > 2$  (entsprechend  $\alpha > 0$ ) beobachtet wird, bleiben doch alle Zustände sogar für schwache Unordnung im Limes unendlicher Systemgröße lokalisiert. Damit stehen diese Ergebnisse im Einklang mit unseren analytischen und numerischen Ergebnissen und meiner Interpretation der anderen Resultate für die renormierten selbst-affinen Potenziale und die binären Potenziale aus den Vorzeichen.

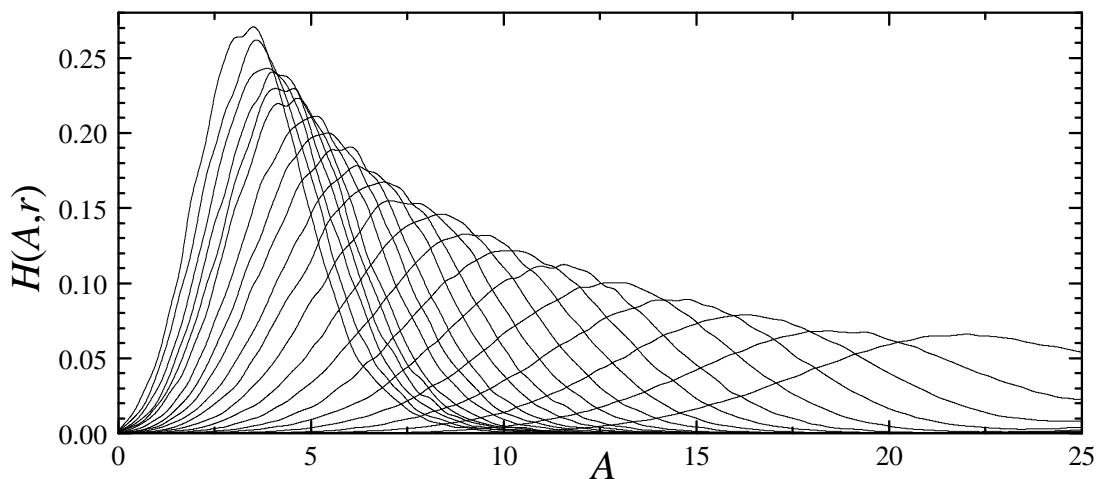


### III.E. Anomale Lokalisierung und Fluktuationen in unkorrelierten zweidimensionalen Systemen

In diesem Kapitel betrachte ich das in Abschnitt III.B.2 eingeführte Standard-Anderson-Modell ohne zusätzliche Wechselwirkungen oder Korrelationen auf dem Quadratgitter. Die Motivation dafür hängt mit dem Metall-Isolator-Übergang in zweidimensionalen Si-MOSFET-Proben zusammen, der im Widerspruch zur Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung steht (siehe Kapitel III.A). Bisher wurden numerische Arbeiten zu Abweichungen von dieser Theorie fast ausschließlich für eindimensionale Systeme durchgeführt. Die Gültigkeit der Theorie für zweidimensionale Systeme wurde angenommen, weil frühe Rechnungen mit der Transfer-Matrix-Methode sie bestätigten [MACKINNON&KRAMER-83, KRAMER&MACKINNON-93]. In diesen Rechnungen wurde aber nur die Lokalisierungslänge für lange, streifenförmige Systeme berechnet (Transfer-Matrix-Methode, siehe Abschnitt III.C.1), und eine Analyse der Fluktuationen erfolgte nicht. In Anbetracht der experimentellen Ergebnisse erscheint eine sorgfältigere Überprüfung der Gültigkeit der Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung anhand des einfachsten, dafür geeigneten Modells, des Standard-Anderson-Modells, sinnvoll. Um den Einfluss der Quantenlokalisierung auf die Fluktuationen genau untersuchen zu können, verwenden wir das Modell weit im lokalisierten Bereich, in dem die Systemgröße  $L$  wesentlich größer ist als die Lokalisierungslänge  $\lambda$ . Die Ergebnisse dieses Kapitels sind zu großen Teilen in [KANTELHARDT&BUNDE-02] publiziert.

#### III.E.1. Ergebnisse zur Verteilung der Eigenzustandsamplituden und zur Lokalisierungslänge

Zum Test auf Abweichungen von der Ein-Parameter-Skalentheorie sollen wie für das eindimensionale Standard-Anderson-Modell, für das sich diese Theorie auch in Bezug auf die Fluktuationen bestätigt hat (siehe Abschnitt III.C.3.e), Eigenfunktionen analysiert werden, genauer gesagt die Verteilung der Eigenzustandsamplituden in festen Abständen  $r$  vom Lokalisierungszentrum (siehe Abschnitt III.C.3.d für eine Definition der betrachteten Größen). Abb. III.B.1(b) zeigt ein typisches Beispiel für einen lokalisierten Eigenzustand. Die Berechnung der Eigenzustände erfolgt mit dem

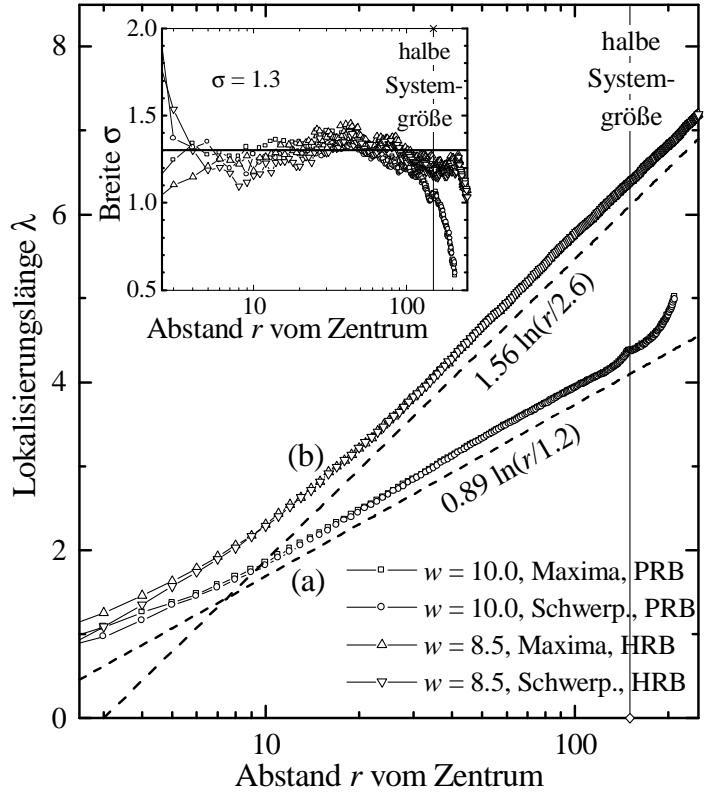


**Abb. III.E.1:** Unskalierte Amplituden-Histogramm-Verteilungen  $H(A, r)$  für das zweidimensionale Einteilchen-Anderson-Modell mit diagonalen Unordnung  $w = 8.5$  und Randbedingungen mit harter Wand.  $H(A, r)$  ist für feste Abstände  $r$  zum Lokalisierungszentrum (von  $r = 6$  bis  $r = 128$  mit Schrittweite-Faktor 1.2) über dem negativen Logarithmus der Amplitude,  $A = -\ln|\psi(r)|/|\psi(0)|$ , aufgetragen. Die Kurven sind in guter Näherung Normalverteilungen, deren Positionen und Varianzen ungefähr proportional zu  $r$  sind. Es sind ca. 1000 Eigenfunktionen auf Systemen der Größe  $300 \times 300$  nahe der Bandmitte  $E \approx 0$  analysiert, die mit dem Lanczos-Algorithmus berechnet wurden.

Lanczos-Algorithmus [LANCZOS-50, CULLUM&WILLOUGHBY-85], weil Eigenvektoren dünn besetzter Matrizen zu berechnen sind. Wir wählen bewusst im Gegensatz zur Transfer-Matrix-Methode eine exakt quadratische Geometrie und vergleichen die Ergebnisse für periodische Randbedingungen und für ein unendliches Potenzial am Rand (harte Randbedingungen). Für die numerisch recht aufwendigen Rechnungen mit vierfacher Genauigkeit (4\*4 Byte, ca. 30 Stellen) habe ich Zustände in der Nähe der Bandmitte ( $E \approx 0$ ) und die Unordnungsparameter  $w = 8.5$  und  $10.0$  ausgewählt, für die die Lokalisierungslängen  $\lambda$  deutlich kleiner sind als die mit dem Stand der Computertechnik erreichbaren Systemgrößen von  $300 \times 300$  Gitterplätzen. Dadurch fallen die Amplituden der Eigenzustände in den betrachteten Systemen vom Lokalisierungszentrum bis zum Minimum um 13 bis 20 Größenordnungen ab, was die vierfache Genauigkeit erforderlich macht aber auch eine genaue Untersuchung der Form der lokalisierten Eigenzustände ermöglicht. Im Vergleich mit dem vorhergehenden Kapitel III.D ist zu erwähnen, dass die Potenziallandschaften hier nicht korreliert sind und dass die Wellenfunktionen in dem zweidimensionalen System einzelne Plätze mit ungünstigem Potenzial stets umgehen können. Darum kommt es hier nicht zu der dort beobachteten extremen Lokalisierung, auch wenn einzelne  $\varepsilon_n$ -Werte außerhalb des Bandes liegen.

Abbildung III.E.1 zeigt beispielhaft die Amplituden-Histogramm-Verteilungen  $H(A, r)$  nach Definition (III.C.21), mit  $A = -\ln|\psi(r)/\psi(0)|$  für das Standard-Anderson-Modell mit  $w = 8.5$  und harte Randbedingungen. Man erkennt, dass die  $H(A, r)$  für die verschiedenen festen (euklidischen) Abstände  $r$  vom Lokalisierungszentrum (Maximum des Eigenzustands) – wie beim schon im eindimensionalen Fall (siehe Abb. III.C.1) – in guter Näherung Normalverteilungen sind, d.h. durch den Ansatz (vgl. Gl. (III.C.25))

$$H(A, r) = \sqrt{\frac{\lambda(r)}{\pi\sigma(r)r}} \exp \left\{ -\frac{[A - r/\lambda(r)]^2}{\sigma(r)r/\lambda(r)} \right\} \quad (\text{III.E.1})$$



**Abb. III.E.2:** Lokalisierungslänge  $\lambda(r)$  von Anderson-Zuständen auf dem Quadratgitter (a) mit periodischen Randbedingungen (PRB) für  $w = 10.0$  sowie (b) mit harten Randbedingungen (HRB) für  $w = 8.5$ . Die Werte von  $\lambda(r)$  wurden durch Anpassung von Gl. (III.E.1) an die Amplituden-Histogramm-Verteilungen  $H(A, r)$  für jeden Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum bestimmt, wobei zur Definition des Zentrums zweimal das Maximums- und zweimal das Schwerpunktskriterium verwendet wurde (siehe Legende). Die gestrichelten Geraden haben die angegebene logarithmische  $r$ -Abhängigkeit, (a)  $\lambda(r) = 0.89 \ln(r/1.2)$  und (b)  $\lambda(r) = 1.56 \ln(r/2.6)$  und sind nur zur besseren Sichtbarkeit etwas nach unten verschoben. In dem kleinen Bild ist gezeigt, dass der ebenfalls durch Anpassung von Gl. (III.E.1) bestimmte Breite-Parameter weitgehend unabhängig von  $r$  und  $w$  ist,  $\sigma(r) = 1.3 \pm 0.2$  (gestrichelte Linie). Für beide Unordnungsstärken ist über ca. 1000 Eigenzustände gemittelt, die mit dem Lanczos-Algorithmus mit vierfacher Genauigkeit berechnet wurden (nach [KANTELHARDT&BUNDE-02]).

beschrieben werden. Anders als für die eindimensionalen Systeme habe ich hier die beiden Parameter, die Lokalisierungslänge  $\lambda(r)$  und den Breite-Parameter  $\sigma(r)$ , als explizit vom Abstand  $r$  abhängig geschrieben, damit Abweichungen von der Ein-Parameter-Skalentheorie erfasst werden können. Durch Anpassung des Ansatzes (III.E.1) an die numerischen Ergebnisse  $H(A,r)$  für verschiedene Abstände  $r$  kann geprüft werden, ob  $\lambda(r)$  und  $\sigma(r)$  wie beim eindimensionalen Modell konstant sind oder nicht.

Abbildung III.E.2 zeigt das Ergebnis dieser Bestimmung für beide betrachteten Unordnungsstärken, beide Arten von Randbedingungen und beide Definitionen des Lokalisierungszentrums. Ähnliche Ergebnisse erhalten wir auch für die anderen Kombinationen von  $w$ -Werten und Randbedingungen. Effekte durch die endliche Systemgröße machen sich vor allem in den Ergebnissen für periodische Randbedingungen bemerkbar (Kurven (a) in Abb. III.E.2), bei denen die  $\lambda(r)$ -Kurve bei der halben Systemgröße einen Knick aufweist und offensichtlich zu größeren Werten abwandert. Das ist verständlich, denn bei Abständen über der halben Systemgröße kommt bei periodischen Randbedingungen das Lokalisierungszentrum schon von der anderen Seite (über den Rand) in Sicht, so dass die Eigenzustände einen scheinbar stärker ausgedehnten Charakter mit größerem  $\lambda$  bekommen. Bei harten Randbedingungen (Kurven (b) in Abb. III.E.2) ist das Verhalten von  $\lambda(r)$  praktisch bis zur gesamten Systemgröße  $r = L = 300$  stabil. Die Art der Definition des Lokalisierungszentrums spielt offensichtlich nur für ganz kleine Abstände  $r < 10$  eine Rolle. Auch wenn nur die Eigenzustände betrachtet werden, die ein lokales, d.h. auf jeden einzelnen Gitterplatz bezogenes, relatives Genauigkeitskriterium erfüllen, ergibt sich keine Änderung in den Ergebnissen.

Die Ergebnisse in Abb. III.E.2 zeigen, dass die Lokalisierungslänge in dem numerisch zugänglichen Systemgrößen-Bereich keineswegs konstant ist, sondern deutlich vom Abstand zum Lokalisierungszentrum abhängt. Für Abstände  $r > 10$  lassen sich die  $\lambda(r)$ -Kurven gut durch eine logarithmische Abhängigkeit annähern,

$$\lambda(r) = c_\lambda(w) \ln[r/c_r(w)], \quad (\text{III.E.2})$$

in der die beiden Parameter  $c_\lambda(w)$  und  $c_r(w)$  Skalen für die Lokalisierungslänge  $\lambda$  und den Abstand  $r$  beschreiben. Nur für  $r < 20$  erscheint auch die Anpassung eines Potenzgesetzes möglich. Wir beobachten die logarithmische  $\lambda(r)$ -Abhängigkeit numerisch über mehr als eine Dekade in  $r$  in allen unseren Simulationen. Tabelle III.E.1 fasst die durch Anpassung von Gl. (III.E.2) an die numerischen Ergebnisse bestimmten Werte für  $c_\lambda(w)$  und  $c_r(w)$  zusammen für beide Unordnungsstärken  $w$ , beide Arten von Randbedingungen und verschiedenen Teilmengen von Eigenfunktionen, die entsprechend der absoluten Energie ausgewählt wurden, wobei  $E \in [-E_{\max}, E_{\max}]$ . Die Tabelle zeigt, dass beide Parameter eindeutig von  $w$  abhängen, aber kaum von den Randbedingungen und prak-

$w$	Randbed.	$E_{\max}$	Anzahl	$c_\lambda$	$c_r$	$\sigma$
8.5	HRB	0.05	994	1.56	2.6	1.35
8.5	HRB	0.005	359	1.54	2.5	1.34
8.5	HRB	0.001	76	1.53	2.4	1.28
8.5	PRB	0.05	227	1.64	3.1	1.27
8.5	PRB	0.005	73	1.68	3.2	1.37
10.0	HRB	0.05	288	0.91	1.3	1.32
10.0	HRB	0.005	97	0.92	1.4	1.34
10.0	PRB	0.05	1029	0.89	1.2	1.25
10.0	PRB	0.005	309	0.90	1.2	1.24
10.0	PRB	0.001	68	0.92	1.4	1.20

**Tabelle III.E.1:** Die Werte der Parameter  $c_\lambda(w)$  und  $c_r(w)$  aus der Anpassung von Gl. (III.E.2) an die Lokalisierungslängen  $\lambda(r)$  sowie der Breite-Parameter  $\sigma$  für das Standard-Anderson-Modell auf dem Quadratgitter. Die Resultate für beide Unordnungsstärken  $w$ , beide Arten von Randbedingungen (PRB = periodische Randbed., HRB = harte Randbed.) sowie für unterschiedliche Energie-Eigenwert-Intervalle  $E \in [-E_{\max}, E_{\max}]$  werden verglichen; die jeweilige Anzahl von betrachteten Eigenzuständen ist auch angegeben. Der Anpassungsbereich für die Parameter ist  $30 \leq r \leq 120$  (nach [KANTELHARDT&BUNDE-02]).

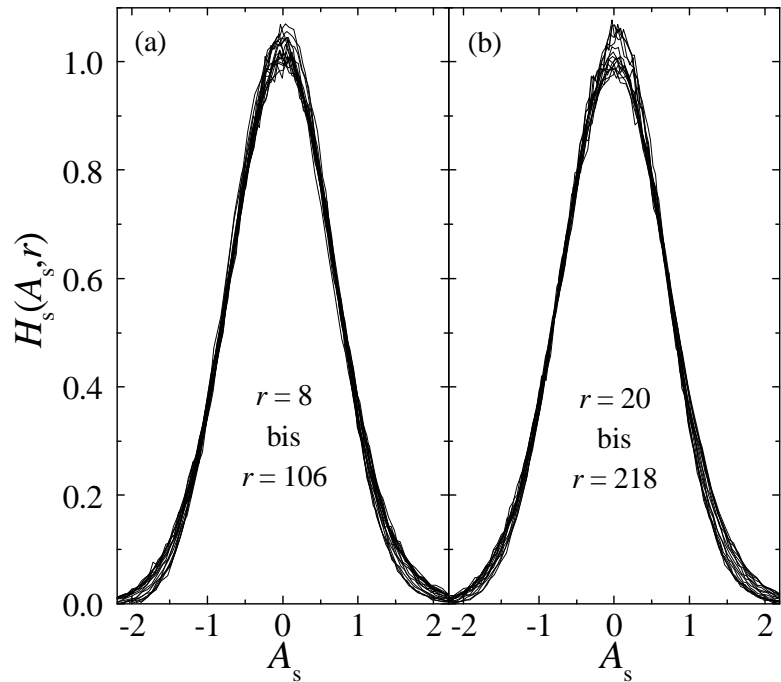
tisch überhaupt nicht von der Breite des Energieintervalls. Das gleiche Bild ergibt sich, wenn nur die Zustände mit  $|E| > E_{\max}$  ausgewählt werden. Daher kann das anomale Lokalisierungsverhalten mit der logarithmischen Systemgrößenabhängigkeit der Lokalisierungsgröße nicht auf eine Anomalie in der Bandmitte zurückzuführen sein.

Diese Ergebnisse stehen nicht im Widerspruch zu den alten Simulationen mit der Transfer-Matrix-Methode [MACKINNON&KRAMER-83, KRAMER&MACKINNON-93], weil damit eine solche Abhängigkeit prinzipiell nicht erkannt werden kann. Es ist auch möglich, dass die streifenförmige Geometrie bei der Transfer-Matrix-Methode das System „eindimensionaler“ macht, so dass die  $\lambda(r)$ -Abhängigkeit wie bei eindimensionalen Systemen verschwindet. Die logarithmische Abhängigkeit der Lokalisierungsgröße  $\lambda(r)$  vom Abstand  $r$  (und damit auch von der Systemgröße  $L$ ) gibt einen Grund für die unterschiedlichen numerischen Ergebnisse für  $\lambda$ , die basierend auf Skalen-Extrapolationen veröffentlicht wurden, siehe beispielsweise [MACKINNON&KRAMER-83, ZHAREKESHEV*etal*-96].

Die logarithmische Abhängigkeit in Gl. (III.E.2) passt auch gut dazu, dass  $d = 2$  die kritische Dimension für Quanten-Lokalisierungsphänomene ist, bei der gerade noch keine ausgedehnten Zustände auftreten, denn in der kritischen Dimension gibt es häufig logarithmische Korrekturen, siehe z.B. [BELITZ*etal*-01, JANSSEN&STENULL-03, STENULL&JANSSEN-03, COSTA-SANTOS-03, JANSSEN&STENULL-04].

Im Gegensatz zur Lokalisierungsgröße  $\lambda(r)$ , die in dem numerisch zugänglichen Bereich eine deutliche Abhängigkeit vom Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum zeigt, ist der Breite-Parameter  $\sigma(r)$  der Normalverteilung (III.E.1) praktisch konstant. Wie schon auf dem kleinen Bild in Abb. III.E.2 gezeigt und in Tabelle III.E.1 angegeben ist, schwankt  $\sigma(r)$  in dem brauchbaren  $r$ -Bereich unterhalb von der halben Systemgröße zwischen 1.0 und 1.5. Die Angabe eines (konstanten) Durchschnittswertes von  $\sigma = 1.3 \pm 0.2$  für beide betrachteten Unordnungsstärken  $w$ , beide Arten von Randbedingungen und alle betrachteten Energiebereiche erscheint angesichts der numerischen Genauigkeit angebracht. Der Wert  $\sigma = 1.3 \pm 0.2$  ist deutlich kleiner als die Vorhersage  $\sigma = 2$  der Standard-Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung (siehe Gl. (III.C.24)). Dies ist eine weniger dramatische, aber vom logarithmischen Anstieg der Lokalisierungsgröße  $\lambda(r)$  vollkommen unabhängige Abweichung von der Standard-Ein-Parameter-Skalentheorie.

Wenn man die logarithmische  $\lambda(r)$ -Abhängigkeit und das konstante  $\sigma$  verwendet, lassen sich die Amplituden-Histogramm-Verteilungen  $H(A, r)$  für verschiedene Abstände  $r$  wie beim eindimensionalen Anderson-Modell skalieren. Dazu ist wieder die reskalierte Histogramm-Verteilung



**Abb. III.E.3:** Skalierte Amplitudenverteilungen  $H_s(A_s, r)$  entsprechend Gl. (III.E.3) für das zweidimensionale Standard-Anderson-Modell bei (a)  $w = 10.0$  und periodischen Randbedingungen sowie (b)  $w = 8.5$  und harten Randbedingungen für die angegebenen euklidischen Abstände  $r$  vom Lokalisierungszentrum. Für die Reskalierungsprozedur wurden hier die Lokalisierungsgrößen (a)  $\lambda(r) = 0.89 \ln(r/1.2)$  und (b)  $\lambda(r) = 1.56 \ln(r/2.6)$  verwendet sowie  $\sigma = 1.3$ . Für jeden der beiden Teile wurden ca. 1000 Eigenzustände analysiert (nach [BUNDE&KANTELHARDT-02]).

$$H_s(A_s, r) = H(A, r) \sqrt{\pi \sigma r / \lambda(r)} \quad \text{gegen} \quad A_s = [A - r/\lambda(r)] / \sqrt{\sigma r / \lambda(r)} \quad (\text{III.E.3})$$

aufzutragen (vgl. Glgn. (III.C.26) und (III.C.27)). Abbildung III.E.3 zeigt, dass es für beide Unordnungsstärken und für  $r$ -Werte aus einem Bereich, der mehr als eine Größenordnung umfasst, gute Daten-Kollapse gibt. Das bestätigt im Nachhinein den Ansatz (III.E.1) einer (logarithmischen) Normalverteilung auch für die Amplituden der lokalisierten Eigenzustände in festem Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum.

### III.E.2. Sublokalisierung und Superlokalisierung

Nachdem ich gezeigt habe, dass die Verteilung der Amplituden  $|\psi(r)|$  für große Abstände  $r$  vom Lokalisierungszentrum für das Anderson-Modell in guter Näherung eine logarithmische Normalverteilung ist, d.h. dass  $A = -\ln|\psi(r)/\psi(0)|$  nach Gl. (III.E.1) normalverteilt ist, kann jetzt der Abfall der über alle Plätze im Abstand  $r$  gemittelten Eigenzustände  $\Psi_N(r) = \langle |\psi(r)/\psi(0)| \rangle_N$  direkt aus dem Ansatz für die Verteilung  $H(A, r)$  berechnet werden. Der Index  $N$  bezeichnet hier die Anzahl der Konfigurationen, über die gemittelt wird, und auch die Abhängigkeit des Mittelwerts von  $N$  soll untersucht werden. Insbesondere kann man auf diese Art  $\Psi_N(r)$  in dem asymptotischen Bereich bestimmen, der numerisch nicht zugänglich ist. Die Rechnung gilt für ein- und zweidimensionale Anderson-Eigenfunktionen, deren Werteverteilungen durch Gl. (III.E.1) mit den Parametern  $\lambda$  bzw.  $\lambda(r)$  und  $\sigma$  beschrieben werden.

Um das Lokalisierungsverhalten von  $\Psi_N(r)$  zu charakterisieren, machen wir den Ansatz

$$\ln \Psi_N(r) \sim r^{d_\psi}, \quad (\text{III.E.4})$$

in dem  $d_\psi$  ein effektiver Lokalisierungsexponent ist, der Abweichungen von einer einfach exponentiellen Lokalisierung charakterisieren kann. Ein Exponent  $d_\psi < 1$  zeigt dabei eine Lokalisierung an, die schwächer als einfach exponentiell ist („Sublokalisierung“) und ein Exponent  $d_\psi > 1$  zeigt eine Lokalisierung, die stärker als einfach exponentiell ist („Superlokalisierung“).

Wenn über alle möglichen Konfigurationen gemittelt wird, ergibt sich

$$\Psi_\infty(r) = \int_0^\infty \exp(-A) H(A, r) dA, \quad (\text{III.E.5})$$

wobei  $A = -\ln|\psi(r)/\psi(0)| < 0$  nicht vorkommen kann, weil  $\psi(0)$  das Maximum ist. Setzt man nun die Normalverteilung (III.E.1) für  $H(A, r)$  ein, lässt sich der Mittelwert direkt ausrechnen. Dabei ist allerdings zu beachten, dass der Ansatz (III.E.1) nur für große Werte von  $r$  und für große  $A$  gut stimmt. Daher soll ein Mittelwert über eine *endliche* Anzahl  $N$  von Konfigurationen betrachtet werden, unter denen seltene Extremereignisse, wie besonders große  $\psi$ -Werte (d.h. besonders kleine  $A$ -Werte,  $A \gtrsim 0$ ), nicht vorkommen.

Für eine endliche Konfigurations-Anzahl  $N$  ist die Gesamtzahl von Gitterplätzen im Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum gleich  $ar^{d-1}N$  mit  $d = 1$  (2) und  $a = 2$  ( $2\pi$ ) für ein- bzw. zweidimensionale Systeme. Die Werte von  $A$ , die eine zu kleine Wahrscheinlichkeit haben, kommen in dieser Stichprobe nicht vor. Daher muss die Verteilung  $H(A, r)$  durch Abschneiden der Fläche  $1/(2ar^{d-1}N)$  an beiden Schwänzen begrenzt werden. Der untere Abschneidepunkt  $A_{\min}$  ergibt sich aus

$$\frac{1}{2ar^{d-1}N} = \int_{-\infty}^{A_{\min}} H(A, r) dA = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left[ \left( A_{\min} - \frac{r}{\lambda} \right) \sqrt{\frac{\lambda}{\sigma r}} \right] \right\}, \quad (\text{III.E.6})$$

wobei  $\operatorname{erf}(x) = 2\pi^{-1/2} \int_0^x \exp(-t^2) dt$  die Fehler-Funktion ist. Mit deren Umkehrung  $\operatorname{inverf}(x)$  gilt

$$A_{\min}(r, N) = \max \left\{ 0, \frac{r}{\lambda} - \sqrt{\frac{\sigma r}{\lambda} \operatorname{erfinv} \left( 1 - \frac{1}{ar^{d-1}N} \right)} \right\}, \quad (\text{III.E.7})$$

was die neue untere Integrationsgrenze in Gl. (III.E.5) wird,

$$\Psi_N(r) = \int_{A_{\min}(r,N)}^{\infty} \exp(-A) H(A, r) dA. \quad (\text{III.E.8})$$

Die Ausführung der Integration ergibt

$$\Psi_N(r) = \frac{1}{2} \exp\left[-\left(1 - \frac{\sigma}{4}\right) \frac{r}{\lambda}\right] \left\{ 1 - \operatorname{erf}\left[\sqrt{\frac{\sigma r}{4\lambda}} - \operatorname{erfinv}\left(1 - \frac{1}{ar^{d-1}N}\right)\right] \right\}. \quad (\text{III.E.9})$$

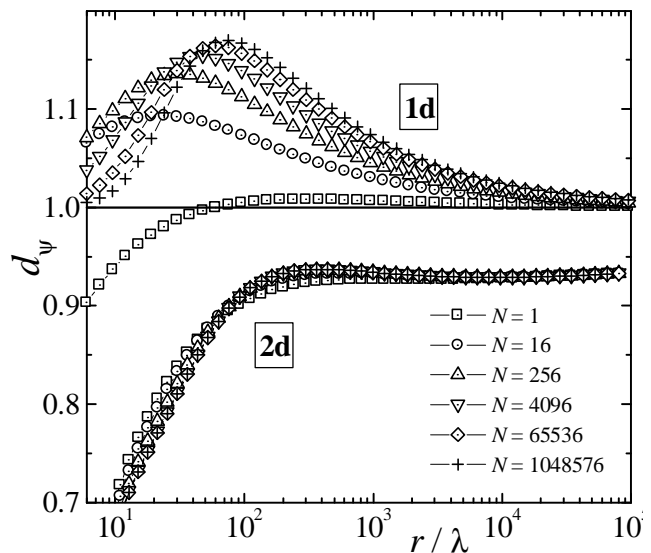
Der erste Term in dieser Gleichung scheint einen einfach exponentiellen Abfall anzuzeigen, wenn der zweite Term vernachlässigbar wäre und  $\lambda$  konstant ist. Beides ist für das zweidimensionale Anderson-Modell nicht der Fall, und auch für das eindimensionale Modell ist der zweite Term nur asymptotisch vernachlässigbar. Darum zeigt  $\Psi_N(r)$  kein einfach exponentielles Skalenverhalten.

Gleichung (III.E.9) sollte für große Werte von  $r$  exakt sein. Der Abfall lässt sich durch den Ansatz (III.E.4) charakterisieren. In Abb. III.E.4 ist die Abhängigkeit des effektiven Lokalisierungsexponenten  $d_\Psi$  von  $r/\lambda$  gezeigt für verschiedene Werte von  $N$ , wobei die Parameter  $\lambda$  bzw.  $\lambda(r)$  und  $\sigma$  für das ein- bzw. zweidimensionale Anderson-Modell verwendet wurden. Die Werte von  $d_\Psi$  wurden durch lokale Anpassung von Gl. (III.E.4) an Gl. (III.E.9) bestimmt. Wie man erkennt ist der Abfall der gemittelten Eigenzustände recht unterschiedlich.

Für die eindimensionalen Systeme zeigt  $\Psi_N(r)$  demnach außer für den typischen Mittelwert  $N = 1$  zunächst einen Bereich mit Superlokalisierung, d.h. stärkerer als einfach exponentieller Lokalisierung ( $d_\Psi > 1$ ). In diesem Bereich hängt das Verhalten zudem von der Anzahl der gemittelten Konfigurationen ab, d.h.  $\Psi_N(r)$  ist nicht selbstmittelnd. Nur asymptotisch für extrem große Abstände,  $r \approx 10^5 \lambda$ , konvergiert  $d_\Psi$  gegen 1, was die theoretisch vorhergesagte einfach exponentielle Lokalisierung in Übereinstimmung mit der Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung ergibt. Für die zweidimensionalen Systeme schließt sich an einen eher kurzen Bereich mit starker Sublokalisierung ( $d_\Psi < 1$ ) der asymptotische Teil an, in dem  $d_\Psi \approx 0.93$  gilt, und zwar praktisch unabhängig von der Anzahl der gemittelten Konfigurationen.

Dieses gestreckte exponentielle Verhalten ist natürlich kein Hinweis auf einen Metall-Isolator-Übergang, aber es zeigt doch, dass es bei den zweidimensionalen Systemen wesentliche Abweichungen von der Ein-Parameter-Skalentheorie gibt, und dass man ein einfach exponentielles Abklingen der Eigenzustände nicht voraussetzen kann.

Das Abklingen der Mittelwerte  $\Psi_N(r)$  lässt sich auch numerisch aus den je 1000 Eigenfunktionen berechnen, die ich für die beiden Unordnungsstärken  $w = 10.0$  und  $8.5$  im Anderson-Modell auf dem Quadratgitter berechnet habe. Dabei ist ein dreistufiger Mittelungsprozess nötig. Zuerst wird für jeden Eigenzustand das Maximum bestimmt, das das Lokalisierungszentrum anzeigt. Dann werden – weiterhin für jeden Eigenzustand  $v$  getrennt – für jedes  $r$  alle Eigenzustands-Amplituden  $|\psi_n^{(v)}|$  auf dem entsprechenden Kreis mit



**Abb. III.E.4:** Die theoretischen effektiven Lokalisierungsexponenten  $d_\Psi$ , die durch lokale Anpassung von Gl. (III.E.4) an Gl. (III.E.9) bestimmt wurden, sind für das Anderson-Modell auf der linearen Kette (1d) und auf dem Quadratgitter (2d) gegen  $r/\lambda$  aufgetragen für verschiedene Anzahlen gemittelter Konfigurationen  $N$ . Für 1d wurden die Parameter  $\lambda = 105$  und  $\sigma = 2$  verwendet und für 2d  $\lambda(r) = 0.89 \ln(r/1.2)$  und  $\sigma = 1.3$  (aus [KANTELHARDT & BUNDE-02]).

Radius  $r$  um das Maximum gemittelt, was  $\Psi^{(v)}(r)$  ergibt. Im zweiten Schritt werden diese Funktionen über  $N$  Konfigurationen (Eigenfunktionen) gemittelt,  $\langle \Psi(r) \rangle_N \equiv \frac{1}{N} \sum_{v=1}^N \Psi^{(v)}(r)$ . Um den typischen Wert dieser unter Umständen (bei Versagen der Selbstmittelung) zwischen verschiedenen Sätzen von  $N$  Konfigurationen fluktuierenden Größe zu erhalten, wird schließlich logarithmisch über mehrere Sätze von  $N$  Konfigurationen gemittelt,  $\Psi_N(r) \equiv \exp\langle \ln\langle \Psi(r) \rangle_N \rangle$ , was eine Glättung der fluktuierenden Kurven bewirkt.

Dieser typische Mittelwert über  $N$  Konfigurationen ist in Abb. III.E.5 für die Anderson-Eigenzustände auf dem Quadratgitter gezeigt. Man erkennt deutlich den anfänglichen Bereich mit starker Sublokalisierung,  $d_\Psi \approx 0.33$ , in dem die Eigenzustands-Amplituden bis auf etwa  $10^{-5}$  abfallen. Daran schließt sich ein Bereich mit steilerem Abfall (deutlich größerem  $d_\Psi$ ) an. Die numerisch zugängliche Systemgröße ermöglicht nicht, den asymptotischen Bereich mit  $d_\Psi \approx$

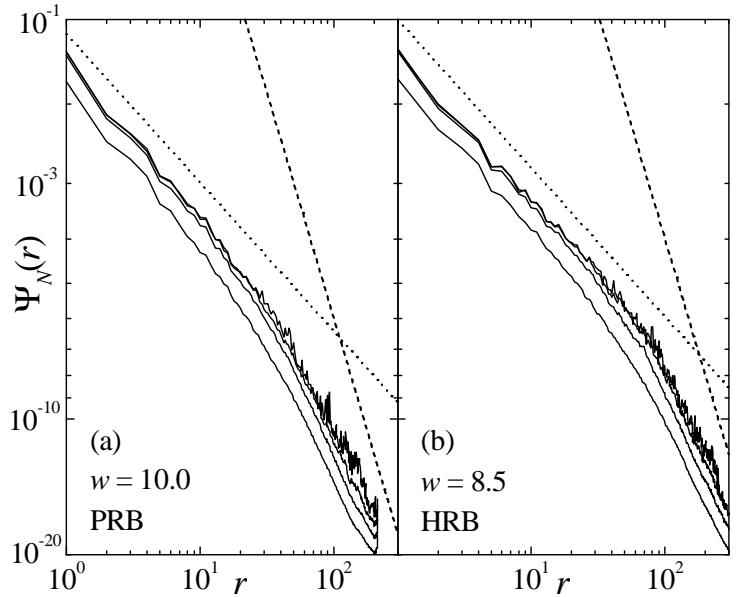
0.93 ganz zu erreichen; für die periodischen Randbedingungen sind die Randeﬀekte bei großen  $r$  wieder stärker. In den numerischen Ergebnissen ist die Sublokalisierung sogar noch etwas stärker ausgeprägt als in der Vorhersage (III.E.9) aus der Integration über die Verteilung  $H(A, r)$  (siehe Abb. III.E.4). Der Grund hierfür sind Abweichungen der tatsächlichen Verteilung von der Normalverteilung (III.E.1) bei kleinen  $A$  und  $r$ .

### III.E.3. Diskussion nachfolgender Arbeiten und Anregungen

In einer nachfolgenden Arbeit [DEQUEIROZ-02] wurden deutlich kleinere Systeme mit nur bis zu  $L \times r = 64 \times 64$  Plätzen (vgl. hier  $300 \times 300$  Plätze) betrachtet und die Wellenfunktionsamplituden nicht direkt als Eigenvektoren der Hamilton-Operator-Matrix berechnet, sondern aus Ergebnissen der Transfer-Matrix-Methode (siehe Abschnitt III.C.1) abgeschätzt. Dabei wurde die Formel

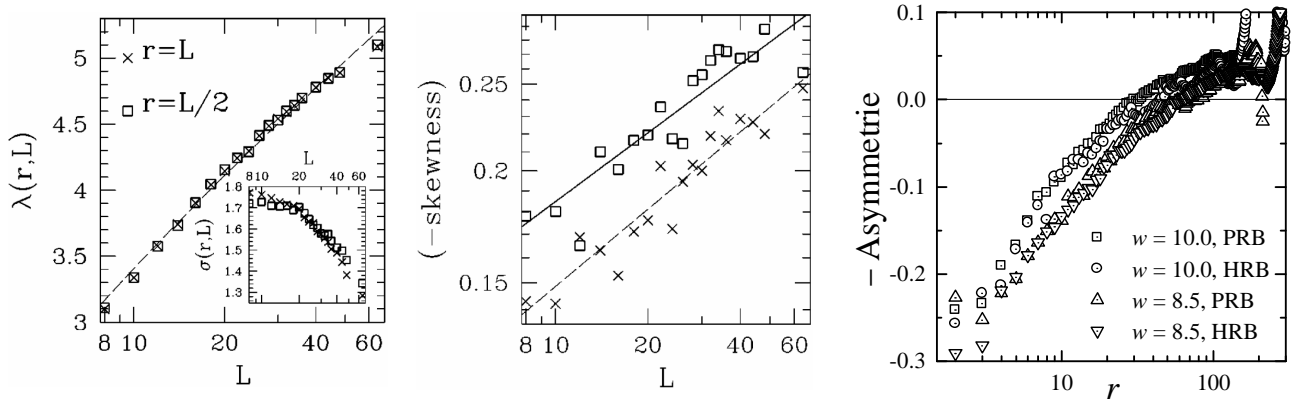
$$A(r) = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^r \ln \left( \sum_{j=k}^{k+1} \sum_{i=1}^L \Psi_{i,j}^2 \right) \quad (\text{III.E.10})$$

verwendet, in der die  $\Psi_{i,k}$  die Komponenten des Vektors  $\Psi_k$  aus der Iterationsgleichung (III.C.2) bezeichnen. Für diese logarithmischen Ersatz-Eigenzustands-Amplituden wurden dann ebenfalls die Histogramm-Verteilungsfunktionen  $H(A, r)$  bestimmt. Beim eindimensionalen Anderson-Modell ( $L = 1$ ) sind die Ergebnisse praktisch dieselben wie ich sie für echte Eigenzustands-Amplituden in Abschnitt III.C.3.e erhalten habe; die Parameter für  $w = 1.0$  sind  $\lambda = 104$  und  $\sigma = 2.08$  im Vergleich zu  $\lambda = 105$  und  $2.1$  bei mir (vgl. Abb. III.C.2). Beim zweidimensionalen Ander-



**Abb. III.E.5:** Der Abfall von  $\Psi_N(r)$  gegen  $r$  für elektronische Eigenzustände im zweidimensionalen Anderson-Modell für  $N = 1, 8, 64$  und  $512$  (von unten nach oben). Die vertikale Achse ist doppelt logarithmisch, die horizontale Achse einfach logarithmisch geteilt. In (a) ist die Unordnungsstärke  $w = 10.0$  und die Randbedingungen sind persiodisch, während in (b)  $w = 8.5$  mit harten Randbedingungen gewählt ist. Für jeden Teil sind ca. 1000 Eigenzustände in der dreistufigen Prozedur gemittelt, die mit dem Lanczos-Algorithmus bei  $E \approx 0$  auf  $300 \times 300$  Gittern berechnet wurden. Die geraden gestrichelten und gepunkteten Linien haben die Steigungen  $d_\Psi = 1$  bzw.  $0.33$  und sind zum Vergleich gezeigt (aus [KANTELT-HARDT&BUNDE-02]).

### III.E. Anomale Lokalisierung und Fluktuationen in unkorrelierten zweidimensionalen Systemen



**Abb. III.E.6:** Links: Abhängigkeit der Lokalisierungslänge  $\lambda$  und (kleines Bild) des Breite-Parameters  $\sigma$  von der Systemgröße  $L$  für das Standard-Anderson-Modell mit  $w = 10.0$  für quadratische ( $r = L$ ) bzw. rechteckige ( $r = L/2$ ) Systeme; die eingezeichnete Kurve ist  $\lambda(L) = 3.4 (\log L)^{0.72}$ . Mitte: Abhängigkeit der Verteilungs-Asymmetrie (III.E.11) von  $L$ . Beide Bilder wurden für Verteilungen von logarithmischen Quasi-Amplituden (III.E.10) aus Transfer-Matrix-Rechnungen erstellt (aus [DEQUEIROZ-02]). Rechts: Asymmetrie der Amplituden-Verteilung  $H(A, r)$  für meine echten Anderson-Wellenfunktionen in Abhängigkeit vom Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum für das Standard-Anderson-Modell mit  $w = 10.0$  und  $8.5$  und periodische (PRB) sowie harte (HRB) Randbedingungen.

son-Modell gibt es allerdings Unterschiede. Der linke Teil von Abb. III.E.6 zeigt, dass die Lokalisierungslänge  $\lambda(L)$  für die Verteilung der logarithmischen Quasi-Amplituden (III.E.10) nur ungefähr logarithmisch mit der Systemgröße  $L$  ansteigt und bei  $w = 10.0$  etwas besser durch  $\lambda(L) = 3.4 (\log L)^{0.72}$  beschrieben wird als durch den Ansatz (III.E.2),  $\lambda(r) = 0.89 \ln(r/1.2)$ , während der Breite-Parameter  $\sigma$  etwas größer ist als bei mir (vgl.  $\sigma = 1.3 \pm 0.2$ ). Damit bestätigt [DEQUEIROZ-02] qualitativ die Abhängigkeit der Lokalisierungslänge von der Systemgröße. Eine quantitative Übereinstimmung der Ergebnisse ist meiner Meinung nach nicht zu erwarten, weil [DEQUEIROZ-02] die Quasi-Amplituden (III.E.10) betrachtet, bei denen über viele Komponenten  $\psi_{i,k}$  sozusagen gemittelt wird, was die Fluktuationen verändert. Weitere Unterschiede sind, dass in der neueren Arbeit keine echten Eigenzustände betrachtet werden und dass die Systemgrößen deutlich kleiner sind.

Als zusätzlicher Test für den Normalverteilungs-Ansatz (III.E.1) für die Amplituden-Histogramm-Verteilungen  $H(A, r)$  wurde die Berechnung der normierten Asymmetrie (Schiefe, „skew“) vorgeschlagen [DEQUEIROZ-02]; siehe Glgn. (III.C.22) und (III.C.24) für die Umformung:

$$\text{Asymmetrie}(r) = \left\langle \left( \frac{A(r) - \langle A(r) \rangle}{\sqrt{\langle A^2(r) - \langle A(r) \rangle^2}} \right)^3 \right\rangle = \frac{\langle [A(r) - r/\lambda(r)]^3 \rangle}{[\sigma(r) r / 2\lambda(r)]^{3/2}}. \quad (\text{III.E.11})$$

Für kleine Werte von  $r$  ist eine gewisse Asymmetrie zu erwarten aus folgendem Grund: Weil  $\psi(0)$  das Maximum der Eigenzustände ist, kann  $A = -\ln |\psi(r)/\psi(0)| < 0$  nicht vorkommen. Daher muss die Verteilung  $H(A, r)$  bei  $A = 0$  exakt verschwinden und somit auf ihrer linken Seite (für kleine  $A$ ) steiler als nach Gl. (III.E.1) abfallen. Das bedeutet, dass der rechte Schwanz der Verteilung länger ist, und hat eine positive Asymmetrie zur Folge, denn im dritten Moment werden die größeren  $A$ -Werte stärker gewichtet als im Mittelwert  $\langle A(r) \rangle$ . Wie das mittlere Bild in Abb. III.E.6 zeigt, findet [DEQUEIROZ-02] entgegen dieser Erwartung für seine Verteilungen der logarithmischen Quasi-Amplituden (III.E.10) eine negative Asymmetrie, die mit zunehmendem Abstand  $r = L$  bzw.  $r = L/2$  ansteigt (er trägt mit dem umgekehrten Vorzeichen auf). Das zeigt, dass die Definition (III.E.10) nicht vollkommen zu dem hier verwendeten  $A = -\ln |\psi(r)/\psi(0)|$  äquivalent sein kann.

Meine Ergebnisse der Asymmetrie (III.E.11) für echte Anderson-Eigenzustände auf  $300 \times 300$  Quadratgittern sind in dem rechten Teil von Abb. III.E.6 dargestellt. Wie erwartet ist die Asymmetrie



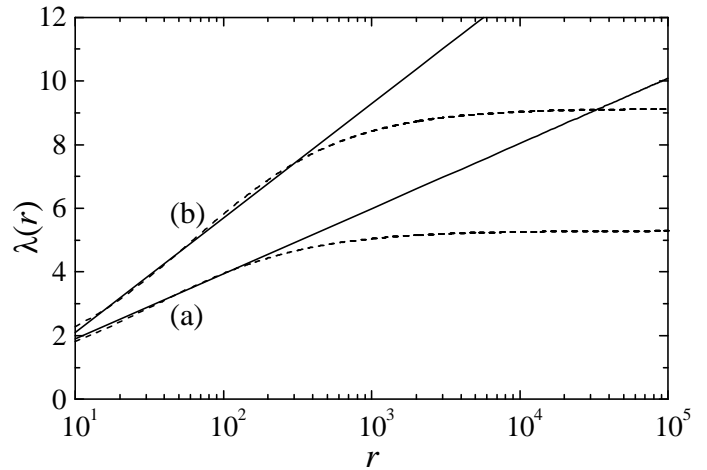
rie zunächst positiv (–Asymmetrie ist negativ) und nähert sich für größere Abstände  $r$  vom Lokalisierungszentrum dem Wert 0 an, der einer guten Übereinstimmung der numerischen Verteilungen mit der symmetrischen Normalverteilung (III.E.1) entspricht. Ein leichtes Hinausschießen über diesen Wert bis auf Asymmetrie  $\approx 0.04$  ist zu erkennen, bevor für große Abstände  $r > 150$  störende Randeﬀekte einsetzen. Diese Asymmetrie kann gut ein numerischer Artefakt sein: Die numerische Verteilung  $H(A, r)$  ist nicht nur nach oben hin begrenzt durch  $A > 0$ , sondern auch nach unten. Selbst in der Rechnung mit vierfacher Genauigkeit (ca. 30 Stellen bei den verwendeten Computern) werden ganz kleine Werte der Eigenzustandsamplituden nicht mehr exakt ermittelt, d.h. durch zufällige Werte in der Größenordnung eines „Maschinen-Epsilons“ ersetzt. Dadurch ist die Verteilung  $H(A, r)$  praktisch auch für große  $A$  abgeschnitten, und das erklärt die leicht negativen Werte der Asymmetrie für große Abstände  $r$  im rechten Teil von Abb. III.E.6.

Eine logarithmische Systemgrößenabhängigkeit der Lokalisierungslänge  $\lambda(r)$ , wie wir sie im Abschnitt III.E.1 gesehen haben, ist keineswegs vereinbar mit der Skalentheorie der Lokalisierung, die einen endlichen asymptotischen Wert der Lokalisierungslänge  $\lambda$  für  $r \rightarrow \infty$  voraussetzt, während  $\lambda(r)$  nach Gl. (III.E.2) divergiert. Das hat zu Zweifeln an der Formel (III.E.2) geführt. Ein alternativer Vorschlag lautet [MARKOS-03] (vgl. Gl. (III.C.22))

$$\langle A(r) \rangle = \frac{r}{\lambda(r)} = \frac{r}{\lambda} - B_0 - B_1 \ln\left(\frac{a_1}{r}\right) \Leftrightarrow \lambda(r) = \left[ \frac{1}{\lambda} - \frac{B_0}{r} - \frac{B_1}{r} \ln\left(\frac{a_1}{r}\right) \right]^{-1} \quad (\text{III.E.12})$$

mit vier Parametern, und zwar der asymptotischen Lokalisierungslänge  $\lambda$  und den drei Konstanten  $B_0$ ,  $B_1$  und  $a_1$ . Dieser Ansatz steht nicht im Widerspruch zur Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung, denn für  $r \rightarrow \infty$  ist nur die asymptotische Lokalisierungslänge  $\lambda$  wesentlich, wie man am besten in der rechten Form sieht.

Ich habe Gl. (III.E.12) ebenfalls an meine numerischen Ergebnisse für  $\lambda(r)$  für das Standard-Anderson-Modell angepasst, was auch fast gleich gut funktioniert wie bei Gl. (III.E.2). Innerhalb der numerischen Genauigkeit ist es nicht möglich, definitiv zwischen den beiden Ansätzen zu unterscheiden. Allerdings hat Gl. (III.E.12) doppelt so viele Parameter wie Gl. (III.E.2), und alle Parameter hängen unterschiedlich von  $w$  ab. Trotzdem ist die Anpassung eher leicht schlechter, denn die angepasste Kurve ist stärker gekrümmt als die numerischen Daten. In Abb. III.E.7 sind die angepassten Funktionen für beide Unordnungsstärken  $w$  gezeigt, und zwar nicht nur in dem Bereich  $30 \leq r \leq 120$ , in dem sie an die Daten angepasst wurden, sondern weiter bis zu viel größeren  $r$ -Werten, die numerisch nicht mehr zu erreichen sind. Man erkennt deutlich, wie Gl. (III.E.12) für große  $r$  (auf dem logarithmischen Maßstab) schnell konstant wird, während Gl. (III.E.2) weiter ansteigt. Obwohl der Ansatz (III.E.12) nicht ausgeschlossen werden kann, möchte ich wegen der wenigen Parameter weiterhin Gl. (III.E.2) den Vorzug geben.



**Abb. III.E.7:** Vergleich der beiden Ansätze (III.E.2) (durchgezogen) und (III.E.12) (gestrichelt) für die Abhängigkeit der Lokalisierungslänge  $\lambda$  vom Abstand  $r$  vom Lokalisierungszentrum für das zweidimensionale Standard-Anderson-Modell mit Unordnung (a)  $w = 10.0$  und (b)  $w = 8.5$ . Die gezeigten Kurven sind für Ansatz (III.E.2) (a)  $\lambda(r) = 0.89 \ln(r/1.2)$  und (b)  $\lambda(r) = 1.56 \ln(r/2.6)$  (wie in Abb. III.E.2) und für Ansatz (III.E.12) (a)  $\lambda(r) = [1/5.29 - 1.09/r - 1.23 \ln(0.22/r)]^{-1}$  und (b)  $\lambda(r) = [1/9.13 - 1.24/r - 1.28 \ln(0.29/r)]^{-1}$ .

### III.F. Lokalisierung wechselwirkender Elektronen in zweidimensionalen Systemen

Wie in der Motivation (Kapitel III.A) dargestellt, sind in den Messungen der elektrischen Leitfähigkeit von zweidimensionalen Elektronensystemen, die den bislang unverstandenen Metall-Isolator-Übergang zeigen, die Energien der Elektron-Elektron-Wechselwirkungen groß im Vergleich zur Fermi-Energie (Verhältnis  $r_s \approx 4$  bis 20). Daher kann man weder die Unordnung, die für die Quanten-Lokalisierung verantwortlich ist, noch die Vielteilchen-Wechselwirkungen störungstheoretisch hinreichend behandeln. Beide sind so stark, dass sowohl eine „mean field“-Näherung für die Unordnung als auch der Ansatz eines effektiven Potenzials für die Wechselwirkungen, das alle anderen Elektronen pauschal beschreibt, problematisch sind. Alle störungstheoretischen Behandlungen sind im erforderlichen Parameterbereich nicht mehr voll gültig. Daher sollen in diesem Kapitel numerisch Eigenzustände des erweiterten Anderson-Modells (siehe Abschnitte III.B.5 und 6) analysiert werden, bei dem die Vielteilchen-Coulomb-Wechselwirkungen explizit berücksichtigt sind. Zusätzlich werden auch die Auswirkungen eines Magnetfelds in diesem Modell untersucht, weil es zur Magnetoleitfähigkeit mehrere aktuelle Experimente gibt (siehe Abschnitt III.A.2). Die meisten in diesem Kapitel beschriebenen Ergebnisse sind in [BERKOVITSetal-01, KANTELHARDTetal-01, BERKOVITS&KANTELHARDT-02a, BERKOVITS&KANTELHARDT-02b] publiziert.

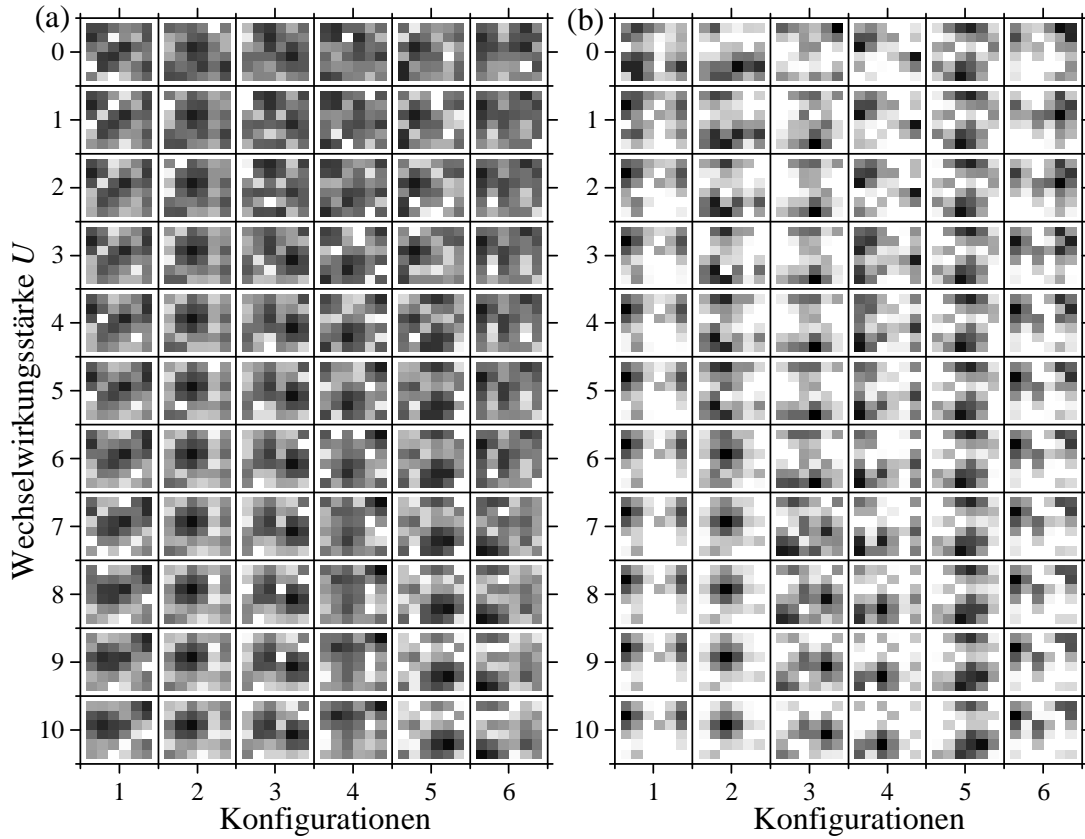
#### III.F.1. Analyse der Tunnelamplitude für polarisierte Elektronen

Zuerst betrachten wir das erweiterte Anderson-Modell ohne Spin-Freiheitsgrad, Glgn. (III.B.13) und (III.B.14), das für polarisierte Elektronen gilt [BERKOVITSetal-01, KANTELHARDTetal-01]. Aufgrund der Vielteilchen-Coulomb-Wechselwirkungen ist exakte Berechnung von Eigenzuständen numerisch wegen der großen Matrizen des Hamilton-Operators sehr aufwendig; siehe Gl. (III.B.12) für den Rang der Basis, d.h. der auftretenden Matrizen. Daher betrachten wir Systeme von  $N = 4, 6$  und  $8$  wechselwirkenden Elektronen auf Quadratgittern der Größen  $n \times m = 6 \times 6, 5 \times 5$  bzw.  $5 \times 4$  mit periodischen Randbedingungen (Torus-Geometrie; Basis-Rang 58905, 177100 bzw. 125970). Die Ladungsträgerdichten, d.h. die Füllungsfaktoren (die Anzahlen der Elektronen pro Gitterplatz), betragen  $N/nm = 4/36 \approx 0.11$ ,  $6/25 = 0.24$  bzw.  $8/20 = 0.40$ . Wie in Abschnitt III.C.4 begründet wurde, analysieren wir anstelle von Wellenfunktionen  $\psi(\mathbf{r})$  die normierte Vielteilchen-Tunnelamplitude  $\phi(\mathbf{r}) \sim \langle 0^N | \hat{a}_{\mathbf{r}}^+ | 0^{N-1} \rangle$  zwischen den Grundzuständen  $|0^{N-1}\rangle$  und  $|0^N\rangle$  mit  $N-1$  und  $N$  Elektronen, deren Betragsquadrat die Wahrscheinlichkeit für das Erhalten des Grundzustands nach dem Hinzufügen eines Elektrons auf dem Gitterplatz  $\mathbf{r}$  ist. Da man in der numerischen Simulation die Ladungsträgerdichte  $N/nm$  nicht kontinuierlich verändern kann, sondern auf die drei angegebenen Werte fixiert ist, wird die Veränderung des Parameters  $r_s$  durch eine Variation der Stärke  $U$  der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen erreicht (siehe Gl. (III.B.14)),

$$r_s = \frac{1}{t} U \sqrt{nm/4\pi N} \quad (\text{III.F.1})$$

Für elf Werte der (dimensionslosen) Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U = 0, 1, 2, \dots, 10$  und vier Werte des Parameters  $w$  für die diagonale Anderson-Unordnung,  $w = 5, 10, 15, 20$ , haben wir je 100 Konfigurationen analysiert. Die Energieeinheit ist wieder durch  $t = 1$  für die Nichtdiagonalterme des Anderson-Hamilton-Operators (III.B.13) festgelegt, die der kinetischen Energie entsprechen.

Abbildung III.F.1 zeigt für vier Elektronen auf dem  $6 \times 6$  Gitter und je sechs der 100 Konfigurationen (nebeneinander) die normierten Tunnelamplituden  $\phi(\mathbf{r})$  für alle Coulomb-Wechselwirkungsstärken  $U$  (übereinander; entsprechend verschiedenen Werten von  $r_s$  nach Gl. (III.F.1)) und zwei Unordnungsstärken  $w$ . Wenn man die Reihen übereinander liegender Bilder vergleicht, erkennt man, dass sich die Verteilungen der Tunnelamplituden für dieselbe Konfiguration ähneln, dass aber eine systematische Verschiebung mit zunehmendem  $U$  stattfindet. Ohne Coulomb-Wechselwir-



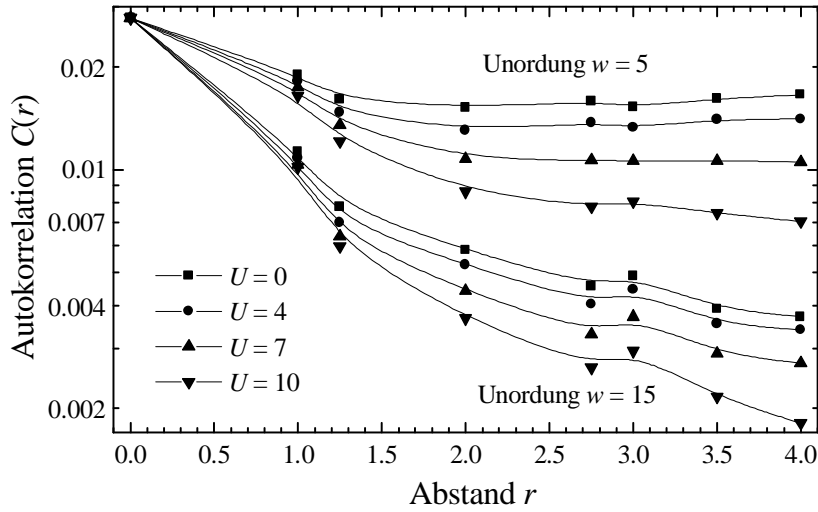
**Abb. III.F.1:** Graustufen-Darstellungen von Verteilungen der normierten Tunnelamplituden  $\phi(\mathbf{r})$  für vier Elektronen im erweiterten Anderson-Modell auf einem  $6 \times 6$  Gitter mit anwachsender Coulomb-Wechselwirkung  $U$  (übereinander) und Unordnungsstärke (a)  $w = 5$ , (b)  $w = 15$ . Es sind jeweils 6 Konfigurationen nebeneinander dargestellt. Die Graustufen-Kodierung ist linear, und schwarz entspricht der größten Tunnel-Amplitude ( $\phi(\mathbf{r}) \approx 1$ ), weiß der kleinsten ( $\phi(\mathbf{r}) \approx 0$ ).

kung kann man bei  $w = 5$  mehrere Lokalisierungsschwerpunkte (dunkle Bereiche) auf den  $6 \times 6$  Gittern unterscheiden, während es für starke Wechselwirkung meist nur noch einen klaren Schwerpunkt gibt (man beachte die periodischen Randbedingungen). Dies zeigt ein zunehmend lokalisiertes Verhalten der Tunnelamplituden mit zunehmender Wechselwirkung an. Die Veränderungen erfolgen für  $w = 15$  von einem schon stärker lokalisierten Anfangszustand ohne Wechselwirkung und sind schwächer, aber tendenziell in derselben Richtung.

Nun sollen verschiedene, von den Einteilchen-Eigenzuständen her bekannte Analysemethoden auf die normierten Tunnelamplituden  $\phi(\mathbf{r})$  angewandt werden. Abbildung III.F.2 zeigt – wieder für vier Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter – die mittleren räumlichen Autokorrelationsfunktionen

$$C(r) = \left\langle \left| \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') \right| \right\rangle_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|=r}, \quad (\text{III.F.2})$$

wobei die Mittelung für jedes  $U$  und  $w$  über alle Gitterplatz-Paare im (Luftlinien-)Abstand  $r$  und über alle 100 Konfigurationen erfolgte. Ähnliche Ergebnisse haben wir für die anderen Systemgrößen erhalten. Offensichtlich fällt die Autokorrelationsfunktion (III.F.2) mit  $r$  ab und zeigt wie zu erwarten das Abklingen von Amplituden-Korrelationen an. Der Abfall wird wie bei nicht wechselwirkenden Elektronen für stärkere Unordnung  $w$  schneller, was eine stärkere Lokalisierung der Eigenzustände bei stärkerer Unordnung signalisiert. Darüber hinaus entwickelt sich der Abfall von  $C(r)$  gleichmäßig mit ansteigender Coulomb-Wechselwirkung  $U$ , die nach Gl. (III.F.1) einem ansteigenden Wert von  $r_s$  entspricht. Wie Abb. III.F.2 zeigt, fällt  $C(r)$  umso schneller ab, je stärker die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen im Vergleich mit der Fermi-Energie sind. Also kann man schon aus diesen Ergebnissen schließen, dass es in dem betrachteten Modell keinen Übergang

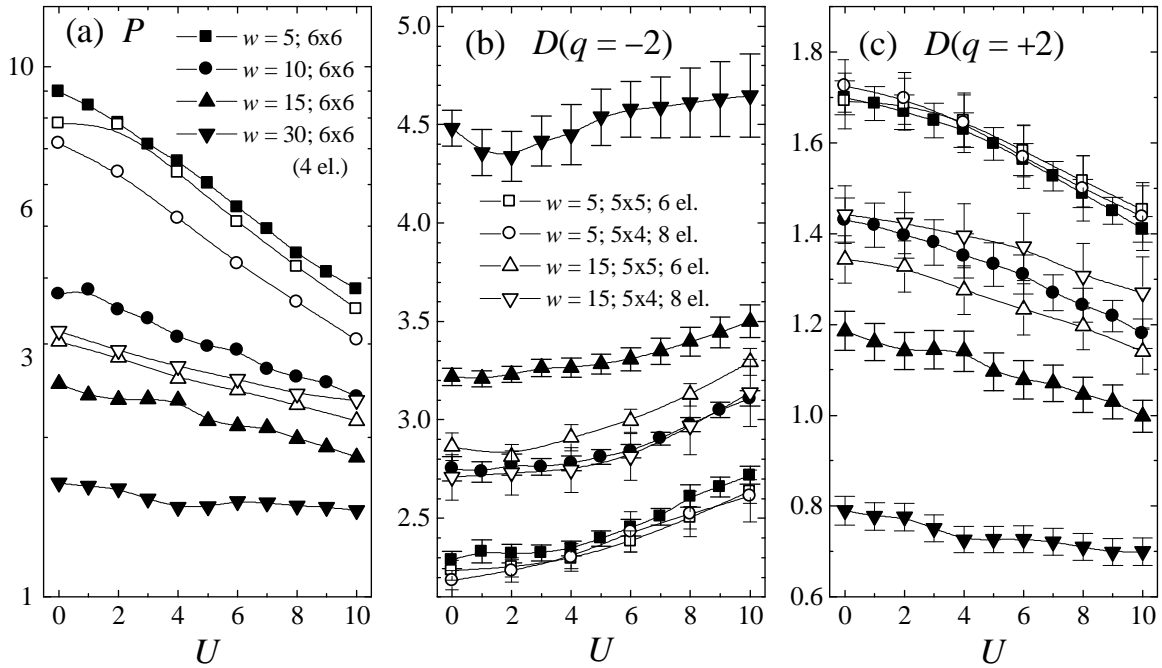


**Abb. III.F.2:** Der Abfall der räumlichen Autokorrelationsfunktionen  $C(r)$  für die normierten Tunnelamplituden  $\phi(\mathbf{r})$  für vier Elektronen auf einem  $6 \times 6$  Gitter im erweiterten Anderson-Modell mit Coulomb-Wechselwirkung  $U$  und den Unordnungsstärken  $w = 5$  (oben) und  $15$  (unten). Die Korrelationen fallen für starke Unordnung und starke Wechselwirkungen schneller ab (nach [BERKOVITS*etal*-01]).

zu einem metallischen Verhalten für größere Werte von  $r_s$  gibt, denn die Zustände werden im Gegenteil mit anwachsendem  $r_s$  immer stärker isolierend. Im Gegensatz dazu war in vorhergehenden Arbeiten, in denen persistente Ströme analysiert wurden [BERKOVITS&AVISHAI-98, BENENTI*etal*-99], ein Übergang gefunden worden. Insbesondere zeigte sich, dass das Fluss-Schema der lokalen persistenten Ströme geordnet und im Wesentlichen eindimensional wird. Das Ergebnis für die Tunnelamplitude zeigt nun, dass dies Verhalten der persistenten Ströme nicht als ein Anzeichen für einen Übergang zu metallischem Verhalten interpretiert werden darf.

Ein ähnliches Verhalten offenbart das Anteils-Verhältnis (Participation-Ratio)  $P$  der normierten Tunnel-Amplituden  $\phi(\mathbf{r})$ , Gl. (III.C.35), gemittelt über alle Konfigurationen  $v$ . Abbildung III.F.3(a) zeigt den monotonen Abfall von  $P$  mit anwachsender Unordnung  $w$  und anwachsender Wechselwirkung  $U$ . Auch hier gibt es kein Anzeichen für eine metallische Phase.

Zusätzlich haben wir die Verteilungen der Participation-Ratios  $P^{(v)}$  für die je 100 einzelnen Konfigurationen  $v$  untersucht [KANTELHARDT*etal*-01]. Eine ähnliche Untersuchung der Verteilungen wurde für das Standard-Anderson-Modell ohne Wechselwirkungen aber mit langreichweitigen Nichtdiagonaltermen durchgeführt [EVERS&MIRLIN-00] im Zusammenhang mit der Behauptung, dass verschiedene Eigenzustände desselben Systems unterschiedliche multifraktale Eigenschaften haben [PARSHIN&SCHÖBER-99] (siehe auch Abschnitt III.B.2). Wenn die Verteilungen sehr breit sind, hängt der Mittelwert von  $P^{(v)}$  von der Mittelungsprozedur oder der Anzahl der gemittelten Konfigurationen ab, wie bei den gemittelten lokalisierten Eigenzuständen im Anderson-Modell ohne Wechselwirkung (siehe Abschnitt III.E.2). Daher ist es sinnvoll, zu überprüfen, ob die Breite der Verteilungen eine zuverlässige Berechnung des Mittelwerts ermöglicht. Daneben offenbaren die Verteilungen Auswirkungen der kleinen betrachteten Systemgrößen, sofern es solche gibt. Für ein lokalisiertes Teilchen ohne Vielteilchen-Wechselwirkungen, erwartet man, dass die Werte von  $\log P^{(v)}$  normalverteilt sind, während bei gutem metallischem Verhalten die Verteilung sehr eng sein sollte [MIRLIN-00]. Wir erwarten daher ähnliche Verteilungen für die Participation-Ratios  $P^{(v)}$  der normierten Tunnelamplituden bei den wechselwirkenden Vielelektronen-Zuständen. Abbildung III.F.4 zeigt die Ergebnisse für vier Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter für drei Unordnungsstärken  $w$  und drei Wechselwirkungsstärken  $U$ . In allen Fällen lassen sich logarithmische Normalverteilungen in akzeptabler Weise an die numerischen Ergebnisse anpassen; es gibt hier also keine wesentlichen Störungen durch die kleine Systemgröße. Für schwache Unordnung ( $w = 5$ , Abb. III.F.4(a)),



**Abb. III.F.3:** (a) Anteils-Verhältnis (Participation-Ratio)  $P$  der normierten Tunnelamplituden  $\phi(\mathbf{r})$  in Abhängigkeit von der Wechselwirkungsstärke  $U$ . Der monotone Abfall zeigt zunehmend isolierendes Verhalten an. Die Teile (b) und (c) zeigen die multifraktalen Dimensionen  $D(-2)$  und  $D(2)$  als wesentliche Ergebnisse der multifraktalen Analyse der normierten Tunnelamplituden  $\phi(\mathbf{r})$ , deren monotone  $U$ -Abhängigkeit ebenfalls kein Anzeichen eines metallischen Bereichs aufweist. Alle Ergebnisse sind im erweiterten Anderson-Modell mit Coulomb-Wechselwirkung  $U$  durch Mittelung über 100 Konfigurationen ermittelt für vier Elektronen auf einem  $6 \times 6$  Gitter ( $w = 5$  (□),  $10$  (●),  $15$  (▲),  $20$  (▼)), sechs Elektronen auf einem  $5 \times 5$  Gitter ( $w = 5$  (□),  $15$  (△)) und acht Elektronen auf einem  $5 \times 4$  Gitter ( $w = 5$  (□),  $15$  (▽)) (nach [BERKOVITSetal-01]).

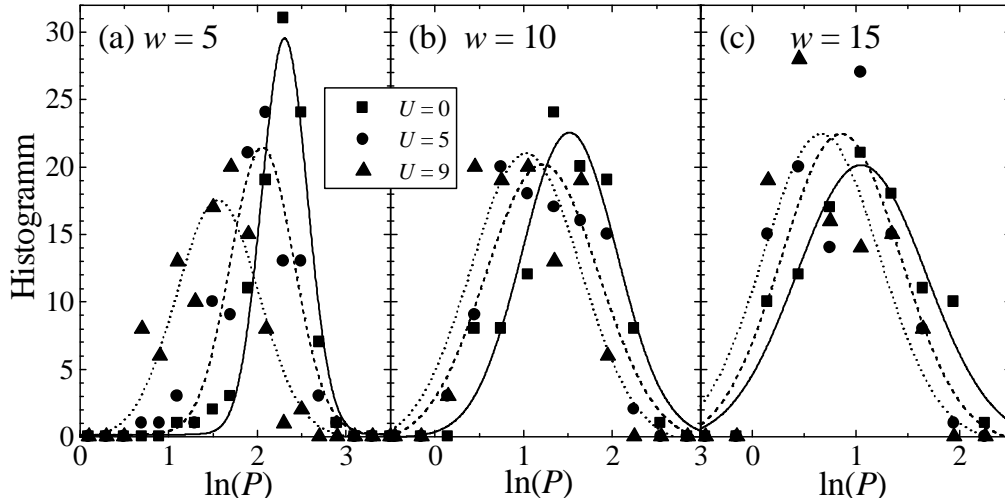
sieht man deutlich eine Verschiebung des Mittelpunkts und der Breite der Verteilung mit anwachsender Wechselwirkungsstärke  $U$ . Dieses Ergebnis lässt sich als ein Übergang von einem nahezu metallischen (schwach lokalisierten) System für den nicht-wechselwirkenden Fall ( $U = 0$ ) zu einem stärker isolierenden System bei stärkerer Wechselwirkung interpretieren. Für mittlere und starke Unordnung (Abb. III.F.4(b) und (c)) bewegt sich das Zentrum der Verteilungen kaum mit steigender Wechselwirkungsstärke. Die Breiten sind auch nahezu gleich und betragen ungefähr das Dreifache des Wertes im Zentrum.

Da die Verteilungen in allen Fällen breit sind, stimmen der arithmetische Mittelwert, der typische Mittelwert und der geometrische Mittelwert (vgl. dieselben Mittelungsverfahren für die Lokalisierungslängen in Gl. (II.D.2))

$$P_{\text{arith}} \equiv \langle P \rangle, \quad P_{\text{typ}} \equiv \exp \langle \log P \rangle \quad \text{und} \quad P_{\text{geom}} \equiv \langle P^{-1} \rangle^{-1} \quad (\text{III.F.3})$$

für die Participation-Ratios nicht überein. In [EVERS&MIRLIN-00] wurden  $P_{\text{arith}}$ ,  $P_{\text{typ}}$  und der Median unterschieden. Allerdings zeigen sich bei unseren Untersuchungen aller drei Mittelwert-Arten (III.F.3) keine qualitativen Unterschiede im Hinblick auf die Abhängigkeit von der Unordnungsstärke  $w$  oder der Wechselwirkungsstärke  $U$ . Da der typische Mittelwert  $P_{\text{typ}}$  am schnellsten konvergiert, d.h. schon für die kleinste Anzahl von Konfigurationen stabil wird, haben wir schon in Abb. III.F.3(a)  $P_{\text{typ}}$  aufgetragen, was den numerischen Aufwand etwas verringert.

Aufgrund der kleinen betrachteten Systeme ist es nicht möglich, die Lokalisierungslänge  $\lambda$  oder die Fluktuationen der Tunnel-Amplitude in bestimmten Abständen  $r$  vom Lokalisierungszentrum zu analysieren, beispielsweise durch Berechnung von  $H(A, r)$  wie beim zweidimensionalen Anderson-Modell ohne Wechselwirkung – die Statistik reicht dafür nicht und für diese Größen sind auch erst



**Abb. III.F.4:** Histogramme der Logarithmen der Anteils-Verhältnisse (Participation-Ratios)  $P$  der normierten Tunnelamplituden  $\phi(\mathbf{r})$  für (a) schwache Unordnung,  $w = 5$ , (b) mittlere Unordnung,  $w = 10$ , sowie (c) starke Unordnung  $w = 15$ . An die numerischen Ergebnisse für 100 Konfigurationen des erweiterten Anderson-Modells mit Coulomb-Wechselwirkung für vier Elektronen auf einem  $6 \times 6$  Gitter sind Normalverteilungen angepasst. Gezeigt sind die Ergebnisse für drei Wechselwirkungsstärken  $U = 0$  (■, durchgezogene Linien),  $U = 5$  (●, gestrichelt) und  $U = 9$  (▲, gepunktet) (nach [KANTELHARDTetal-01]).

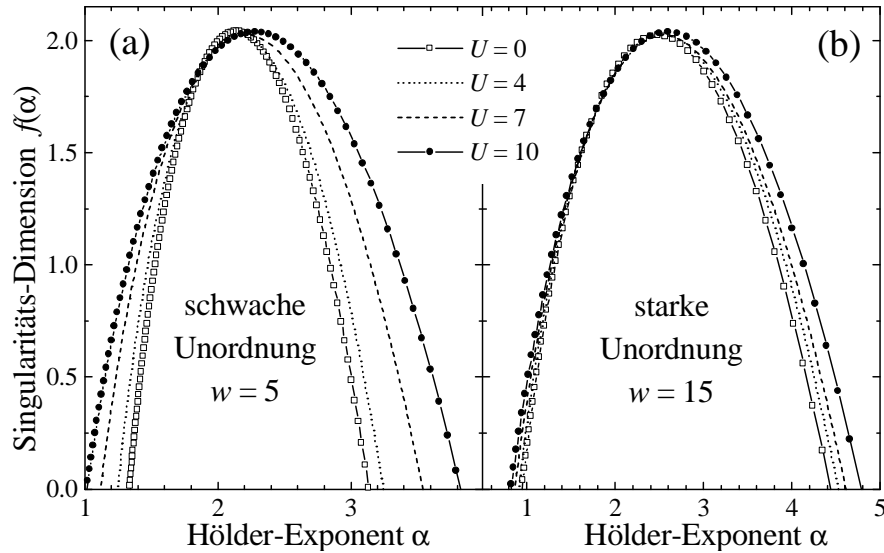
bei Abständen  $r \gg 10$  sinnvolle Aussagen möglich. Eine Charakterisierung der Fluktuationseigenschaften der Tunnelamplituden kann aber durch eine multifraktale Analyse erfolgen, bei der die Verteilung als Ganzes ohne eine Berücksichtigung des Lokalisierungszentrums betrachtet wird, siehe Abschnitt III.C.3.c. Der Grund ist, dass die Zustände in den kleinen Systemen quasi-ausgedehnt sind, weil die Lokalisierungslängen nicht oder nicht wesentlich kleiner als die Systemgröße (maximal 6) sind. Daher haben wir die verallgemeinerten Zustandssummen  $Z_q(s) \sim s^{-\tau(q)}$  nach Gl. (II.A.36) berechnet und die Renyi-Exponenten  $\tau(q)$  bestimmt. Die Abbildungen III.F.3(b) und (c) zeigen die verallgemeinerten Dimensionen  $D(2) = \tau(2)$  und  $D(-2) = -\tau(-2)/3$  (siehe Gl. (III.C.19)), die für elektronische Systeme normalerweise betrachtet werden. Man erkennt auch hier weitgehend monotone Veränderungen der beiden Dimensionen mit anwachsender Wechselwirkung  $U$  und findet bei keinem der betrachteten Systeme einen Hinweis auf ein metallisches Regime.

Eine andere, nach Abschnitt II.A.3.e äquivalente Möglichkeit, die Ergebnisse der multifraktalen Analyse zu präsentieren, besteht in der Angabe des Singularitätsspektrums  $f(\alpha)$ , das nach Gl. (II.A.42) die Legendre-Transformierte von  $\tau(q)$  ist. Das Singularitätsspektrums wurde in Abschnitt II.A.3.c definiert und gibt für jeden Hölder-Exponenten (lokalen Fluktuationsexponenten)  $\alpha$  die (fraktale) Dimension  $f(\alpha)$  des entsprechenden Trägers, d.h. der Menge der Gitterpunkte an, die jeweils durch denselben Hölder-Exponenten  $\alpha = \alpha(v)$  charakterisiert werden. Dabei ist der Hölder-Exponent definiert durch (vgl. Gl. (II.A.34))

$$p(v, s) \sim s^{\alpha(v)} \quad (s \rightarrow 0), \quad (\text{III.F.4})$$

wobei jeder Gitterpunkt  $v$  als Mittelpunkt von einem Kästchen der Kantenlänge  $s$  betrachtet wird und die Kästchen-Wahrscheinlichkeiten  $p(v, s)$  nach Gl. (III.C.17) mit  $P(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r})$  definiert sind.

Abbildung III.F.5 zeigt einige Beispiele dieser Singularitätsspektren für vier Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter. Da die Multifraktalitätsstärke, die sich in der Breite der  $f(\alpha)$ -Spektren bei  $f = 0$  niederschlägt, offensichtlich nicht unabhängig von der Wechselwirkung  $U$  ist, ist die Multifraktalität kein Anzeichen für einen kritischen Punkt. Vielmehr werden die Spektren breiter, weil die Zustände mit zunehmender Unordnung oder Wechselwirkung immer stärker lokalisiert sind. Also gibt es auch hier keine Anzeichen für eine metallische Phase oder einen kritischen Punkt.



**Abb. III.F.5:** Singularitäts-Spektren  $f(\alpha)$  für die normierte Vielteilchen-Tunnelamplitude  $\phi(\mathbf{r})$  im erweiterten Anderson-Modell mit Wechselwirkung  $U$  und Unordnung (a)  $w = 5$  und (b)  $w = 15$ . Für jeden Hölder-Exponenten  $\alpha$  kann  $f(\alpha)$  interpretiert werden als die fraktale Dimension der Teilmenge von Kästchen  $v$ , die durch  $p(v, s) \sim s^\alpha$  charakterisiert werden. Die Spektren werden mit zunehmender Wechselwirkung breiter, was einen Übergang zu stärker lokalisierten Zuständen anzeigt (nach [BERKOVITSetal-01]).

### III.F.2. Die Kubo-Leitfähigkeit für polarisierte Elektronen

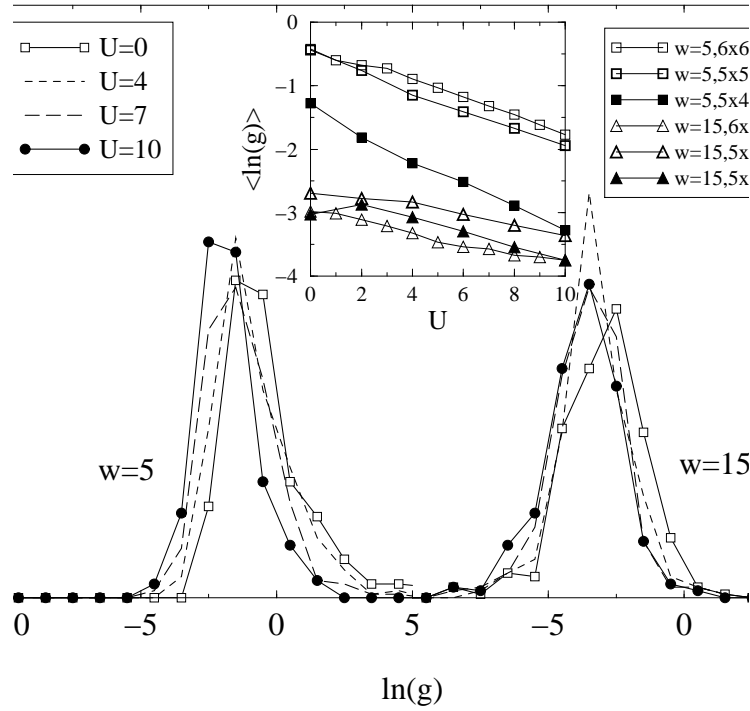
Um die Ergebnisse für die Tunnelamplitude und deren Interpretation als ein Fehlen einer metallischen Phase unabhängig zu überprüfen, haben wir zusätzlich Kubo-Leitfähigkeiten berechnet [BERKOVITSetal-01]. Die Motivation für diesen unabhängigen und numerisch sehr aufwendigen Ansatz liegt in den abweichenden Ergebnissen von [BELLANIetal-99] begründet, die basierend auf Betrachtungen der persistenten Störme für dasselbe Modell auf ein metallische Phase zwischen zwei isolierenden Phasen geschlossen hatten. Während die Verwendung der Tunnelamplituden neu ist, stellt die Kubo-Leitfähigkeit eine bereits seit langem bekannte Größe dar, deren Zusammenhang mit den Transporteigenschaften unbestritten ist.

Die Kubo-Formel für die elektrische Leitfähigkeit lautet [BERKOVITS&AVISHAI-96]

$$\sigma = \frac{\pi e^2}{L^2 h} \sum_{\alpha} \frac{\left| \langle \alpha^N | J_x | 0^N \rangle \right|^2 (E_{\alpha}^N - E_0^N) \gamma}{(E_{\alpha}^N - E_0^N)^2 + \gamma^2}, \quad (\text{III.F.5})$$

wobei der  $J_x$  der quantenmechanische Strom-Operator ist,  $L$  die Seitenlänge des betrachteten Gitters,  $e$  die Elementarladung und  $h$  die Plancksche Konstante. Die inelastische Verbreiterung  $\gamma$  wird ungefähr gleich dem reskalierten Ein-Elektronen Niveau-Abstand  $B/N(L^2 - N)$  gesetzt, bei dem  $B$  die Breite des Vielteilchen-Energiebands ist [BERKOVITS-99, SHEPELYANSKY-00]. Die Auswertung von Gl. (III.F.5) ist sehr aufwendig, weil man nicht nur die  $N$ -Teilchen-Grundzustände  $|0^N\rangle$  benötigt, sondern auch die angeregten Zustände  $|\alpha^N\rangle$ . Hier wird die Rechnung auf die 20 energetisch niedrigsten Zustände beschränkt, was trotzdem noch eine schwierige Aufgabe für den verwendeten Lanczos-Algorithmus darstellt.

Abbildung III.F.6 zeigt als Ergebnis die Verteilungen der dimensionslosen Kubo-Leitfähigkeiten  $g = (h/e^2)\sigma$  für zwei Unordnungsstärken  $w$  und vier Wechselwirkungsstärken  $U$ . Für die geringere Unordnung, die ohne Wechselwirkung bei den betrachteten kleinen Systemen quasi-ausgedehnte (nahezu metallische) Zustände zur Folge hat, nähert sich die Verteilung mit anwachsender Wechselwirkungsstärke einer logarithmischen Normalverteilung an. Für die stärkere Unordnung, bei der



**Abb. III.F.6:** Verteilungen des Logarithmus der dimensionslosen Kubo-Leitfähigkeiten  $g = (h/e^2)\sigma$  für Unordnung  $w = 5$  und  $15$  und Wechselwirkungsstärken  $U = 0, 4, 7$  und  $10$  für vier Elektronen auf einem  $6 \times 6$  Gitter. Das kleine Bild zeigt die logarithmischen Mittelwerte von  $g$  in Abhängigkeit von der Wechselwirkungsstärke für vier Elektronen auf einem  $6 \times 6$  Gitter (gemittelt über 280 Unordnungs-Konfigurationen), sechs Elektronen auf einem  $5 \times 5$  Gitter (60 Konfigurationen) und acht Elektronen auf einem  $5 \times 4$  Gitter (100 Konfigurationen) (nach [BERKOVITSetal-01]).

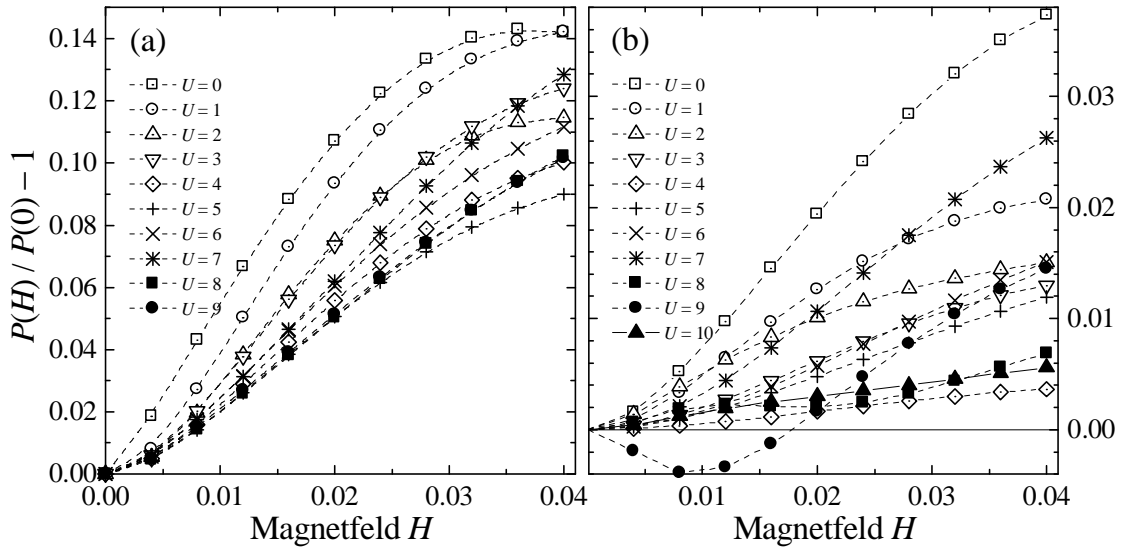
das System schon ohne Wechselwirkung isolierende Zustände aufweist, ergeben sich logarithmische Normalverteilungen bei allen betrachteten Wechselwirkungsstärken. Da die Leitfähigkeitsverteilung nur für ein isolierendes System eine logarithmische Normalverteilung ist [SHAPIRO-86], während für ein metallisches System eine einfache Normalverteilung erwartet wird, zeigt dieses Verhalten, dass die Elektron-Elektron-Wechselwirkungen den metallischen Charakter der Kubo-Leitfähigkeiten verringern. Das ist konsistent mit älteren Ergebnissen zur Kubo-Leitfähigkeit in Verbindung mit Wechselwirkungen [BERKOVITS&AVISHAI-96, VOJTAetal-98]. Insbesondere wurde gezeigt, dass die Leitfähigkeit im diffusiven Bereich durch Wechselwirkungen unterdrückt wird, während nur tief im lokalisierten Bereich, in dem die Leitfähigkeit sehr klein ist, eine leichte Erhöhung möglich ist [VOJTAetal-98].

Derselbe Trend ist in Abb. III.F.6 auf dem kleinen Bild zu erkennen, in dem die logarithmischen Mittelwerte der Kubo-Leitfähigkeiten für die verschiedenen betrachteten Elektronen-Anzahlen und Systemgrößen gegen die Wechselwirkungsstärke  $U$  aufgetragen sind. Demnach zeigen weder die Verteilung noch die Mittelwerte der Kubo-Leitfähigkeiten für die polarisierten Elektronen irgendein Anzeichen einer metallischen Phase und bestätigen voll die Ergebnisse aus der Untersuchung der Tunnelamplituden im vorhergehenden Abschnitt.

### III.F.3. Der senkrechte Magnetowiderstand und sein Skalenverhalten

In diesem Abschnitt betrachte ich das erweiterte Anderson-Modell mit Coulomb-Wechselwirkung und einem senkrecht zu dem zweidimensionalen Elektronensystem stehenden Magnetfeld, siehe Abschnitt III.B.5 und Glgn. (III.B.13), (III.B.14) und (III.B.15) [KANTELHARDTetal-01]. Das senkrechte Magnetfeld geht in die Nichtdiagonalelemente der Hamilton-Operator-Matrix ein, so dass man schon ohne Berücksichtigung des Elektronen-Spins, d.h. für polarisierte Elektronen, eine Aus-



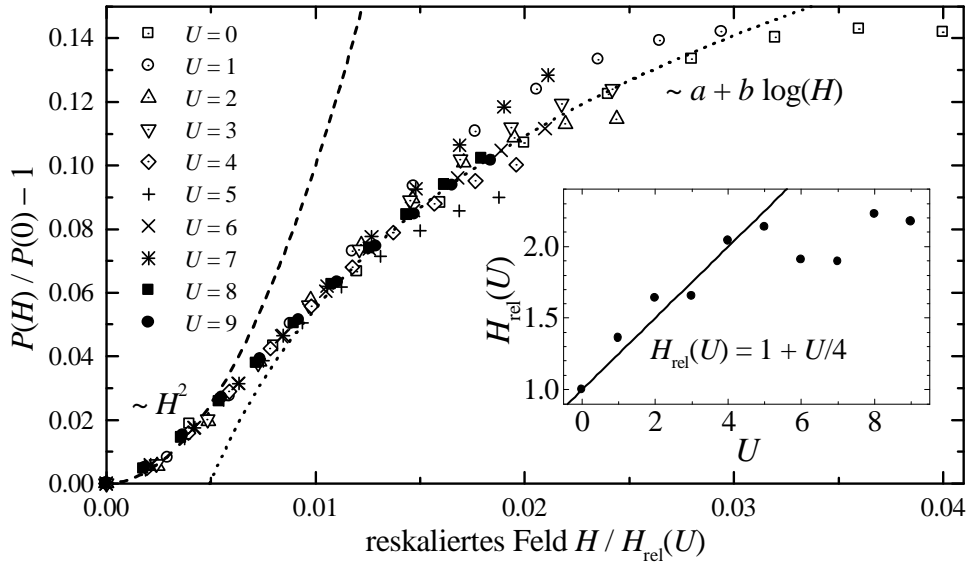


**Abb. III.F.7:** Relative Abweichungen der Participation-Ratios  $P(H)$  von  $P(0)$  für sehr schwache, senkrechte Magnetfelder  $H$  (in Einheiten des Flussquantums pro Elementarzelle). Das erweiterte Anderson-Modell mit Coulomb-Wechselwirkung und Magnetfeld wurde für vier Elektronen auf einem  $6 \times 6$ -Gitter betrachtet für (a) schwache Unordnung,  $w = 5$ , und (b) mittlere Unordnung,  $w = 10$ , sowie verschiedene Wechselwirkungsstärken  $U$  (siehe Legenden), gemittelt über 100 Unordnungs-Konfigurationen. Der Anstieg von  $P(H)$  signalisiert einen negativen Magnetowiderstand (nach [KANTELHARDTetal-01]).

wirkung erwarten kann. Die Universalitätsklasse der Matrix wechselt dabei vom orthogonalen Ensemble (GOE) zum unitären Ensemble (GUE), weil die Nichtdiagonalterme komplexe Zahlen werden. So ist der Hauptunterschied zu den Rechnungen in Abschnitt III.F.1, dass jetzt der tiefste Eigenzustand von unitären Matrizen mit dem Lanczos-Algorithmus berechnet werden muss. Zwar wird in den meisten Experimenten ein paralleles Magnetfeld verwendet (siehe Abschnitt III.A.2), weil dafür der Magnetowiderstand viel größer ist, aber es gibt für ein senkrechtes Magnetfeld eine Reihe von Vorhersagen zum Magnetowiderstand. Daher können die hier durchgeführten Rechnungen auch als ein Test der auf Analyse der normierten Tunnelamplitude basierenden neuen Methode zur Untersuchung wechselwirkender Elektronensysteme dienen.

Für ein Magnetfeld senkrecht zu einem zweidimensionalen System gilt ein schwacher negativer Magnetowiderstand, d.h. ein leichter Abfall des Widerstands mit zunehmendem Magnetfeld, üblicherweise als ein Anzeichen von schwacher Lokalisierung, obwohl es auch einen zusätzlichen positiven Beitrag durch eine Spin-Aufspaltung und durch Bahneffekte geben kann [LEE&RAMAKRISHNAN-85]. Der Grund für den negativen Magnetowiderstand ist, dass das Magnetfeld zu einigen ausgedehnten Zuständen in dem zweidimensionalen System führt, die auch beim Quanten-Hall-Effekt eine wichtige Rolle spielen. Für nicht wechselwirkende Systeme mit schwach lokalisierten Elektronenzuständen wurde der Magnetowiderstand theoretisch berechnet. Asymptotisch für ein kleines senkrechtes Magnetfeld  $H$  ist er proportional zu  $H^2$  [HIKAMIetal-80]. Eine logarithmische Abhängigkeit wird hingegen für große Felder  $H$  erwartet [HIKAMIetal-80, ALTSHULERetal-80], siehe auch [LEE&RAMAKRISHNAN-85] für einen Überblick.

Um aus den normierten Tunnelamplituden  $\phi(\mathbf{r})$  (siehe Abschnitt III.C.4) ohne und mit zusätzlichem Magnetfeld den Magnetowiderstand abzuschätzen, betrachten wir wieder die Anteils-Verhältnisse (Participation-Ratios)  $P$  nach Gl. (III.C.35). Um eine schnellere Konvergenz zu erreichen, wird der typische Mittelwert  $P_{\text{typ}}$  über die Unordnungs-Konfigurationen nach Gl. (III.F.3) berechnet. Ein Anstieg von  $P(H)$  mit zunehmendem Magnetfeld  $H$  zeigt einen zunehmend metallischen Charakter der Zustände an und entspricht daher einem Absinken des Widerstands, also einem negativen Magnetowiderstand. Um die Ergebnisse für verschiedene Unordnungsstärken und verschiedene Wech-



**Abb. III.F.8:** Daten-Kollaps der schon in Abb. III.F.7(a) gezeigten Ergebnisse für die Abhängigkeit des Participation-Ratios der Tunnelamplitude vom Magnetfeld  $H$  bei schwacher Unordnung  $w = 5$ . Das Magnetfeld wird durch Division durch den  $U$ -abhängigen Skalenparameter  $H_{\text{rel}}(U)$  renormiert, der in dem kleinen Bild gezeigt ist und der für schwache Wechselwirkung durch  $H_{\text{rel}}(U) \approx 1 + U/4$  approximiert werden kann (eingezeichnete Gerade). Die gestrichelte und punktierte Linie sind angepasste Kurven mit dem theoretisch erwarteten asymptotischen Verhalten des Magnetowiderstands (nach [KANTELHARDTetal-01]).

selwirkungsstärken besser vergleichen zu können, bei denen die Ausgangswerte  $P(0)$  ohne Magnetfeld sehr verschieden sind, tragen wir  $P(H)/P(0) - 1$  auf.

Abbildung III.F.7 zeigt die Ergebnisse für vier Elektronen auf einem  $6 \times 6$  Gitter, gemittelt über 100 Konfigurationen; es sollen zuerst die Ergebnisse für schwache Unordnung  $w = 5$  (Abb. III.F.7(a)) diskutiert werden. Man erkennt deutlich, dass der Participation-Ratio monoton mit dem Magnetfeld ansteigt, dass also wie für schwache Lokalisierung erwartet ein negativer Magnetowiderstand auftritt. Die Ergebnisse für die größere Unordnung,  $w = 10$ , die bei den betrachteten Systemgrößen dem Übergangsbereich zwischen schwacher und starker Lokalisierung entspricht, zeigt Abb. III.F.7(b). Im Allgemeinen finden wir auch dafür einen negativen Magnetowiderstand. Die Ergebnisse sind allerdings weniger stabil, besonders bei starken Wechselwirkungen, siehe z.B. die Kurve für  $U = 9$ . Folglich wird der Magnetowiderstand im Übergangsbereich komplizierter. Für noch stärkere Unordnung,  $w = 15$ , die dem lokalisierten Bereich entspricht, erwartet man einen nur sehr kleinen Magnetowiderstand. Daher werden die Unterschiede von  $P(H)$  und  $P(0)$  numerisch schwer auflösbar, denn das Magnetfeld führt nur zu minimalen Veränderungen im Vergleich mit relativ großen Unsicherheiten in der Mittelung über Unordnungs-Konfigurationen. Unsere hier nicht gezeigten Berechnungen scheinen auch in diesem Fall einen schwachen negativen Magnetowiderstand anzuzeigen, der praktisch unabhängig von der Wechselwirkungsstärke ist.

Der Magnetowiderstand im Bereich der schwachen Lokalisierung (Abb. III.F.7(a)) ist einfacher zu verstehen. Abbildung III.F.8 zeigt, dass wir durch Reskalieren des Magnetfelds  $H$  einen Datenkollaps erhalten können. Wir haben dazu  $H$  durch von der Wechselwirkungsstärke  $U$  abhängige, geeignet gewählte Faktoren  $H_{\text{rel}}(U)$  dividiert. Wie im kleinen Bild in Abb. III.F.8 gezeigt ist, gilt  $H_{\text{rel}}(U) > 1$  für  $U > 0$ . Die Wechselwirkung macht also für denselben Effekt ein größeres Magnetfeld nötig, oder – anders ausgedrückt – sie reduziert das wirksame (effektive) Feld auf den Wert  $H/H_{\text{rel}}(U)$ . Das bedeutet, dass durch eine stärkere Wechselwirkung der Magnetowiderstand verringert wird, was wiederum einem weniger metallischen Verhalten entspricht. Die numerischen Werte von  $H_{\text{rel}}(U)$ , die im kleinen Bild von Abb. III.F.8 gezeigt sind, können durch  $H_{\text{rel}}(U) \approx 1 + U/4$  angenähert werden. Dieses Verhalten ist ähnlich wie die reduzierte Empfindlichkeit der Höhen der

Leitfähigkeits-Maxima gegenüber einem magnetischen Feld, die für Quantenpunkte im Coulomb-Blockade-Bereich experimentell [FOLKetal-96, CHANGetal-96] und in Simulationen [BERKOVITS&SIVAN-98] beobachtet wurden. Für größere Wechselwirkungsstärken  $U$  sättigt das Reskalierungsfeld  $H_{\text{rel}}(U)$ , d.h. wenn die Wechselwirkung eine gewisse Schwelle übersteigt, reduziert sie den Magnetowiderstand nicht weiter.

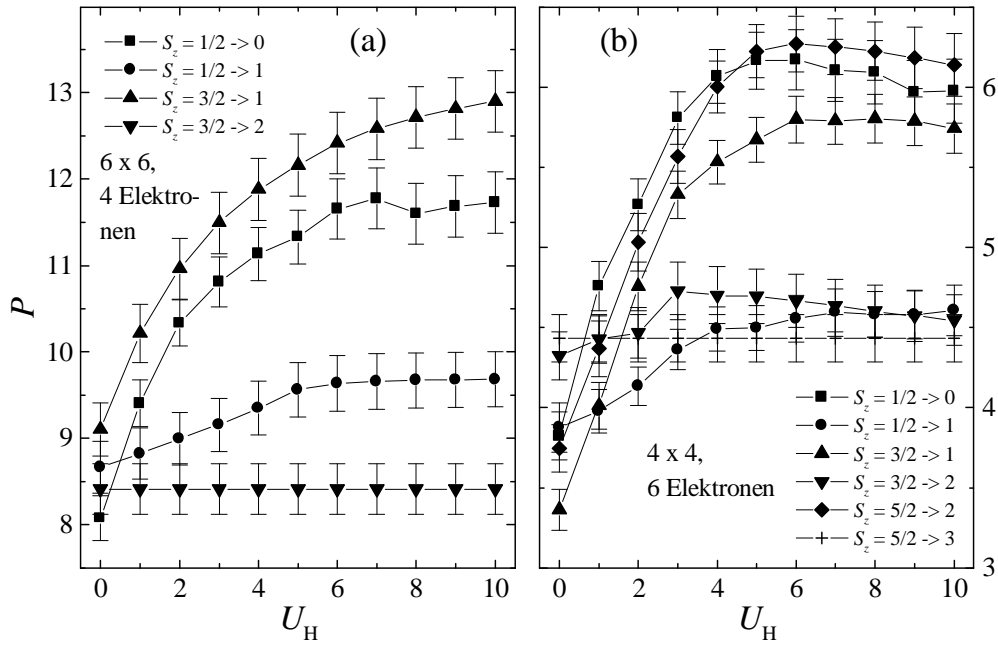
Für sehr kleine Magnetfelder  $U$  finden wir in III.F.8 einen verzögerten Anstieg der Participation-Ratios, der sich gut durch die theoretisch vorhergesagte Parabel  $\sim H^2$  [HIKAMIetal-80, LEE&RAMAKRISHNAN-85] beschreiben lässt. Andererseits kann dieses Verhalten auch eine Auswirkung der Tatsache sein, dass das Verhalten bei kleinen Feldern hauptsächlich von großen Trajektorien beeinflusst wird, deren Pfad Bereiche mit positivem und negativem Feld einschließen kann (siehe Abschnitt III.B.5 für die verwendeten Randbedingungen), so dass sich die magnetischen Flüsse effektiv auslöschen und den Magnetowiderstand reduzieren. Für größere Magnetfelder, bei denen die kleinen Trajektorien wesentlich sind, tendiert der Anstieg von  $P(H)$  zu einer Sättigung, was eine Abnahme des Magnetowiderstands anzeigt. Unsere numerischen Ergebnisse stimmen mit dem theoretisch vorhergesagten logarithmischen Verhalten [HIKAMIetal-80, ALTSHULERetal-80] überein.

Die Übereinstimmung mit den Erwartungen demonstriert die Zuverlässigkeit der neuen Methode der Analyse von Transporteigenschaften wechselwirkender Elektronen durch die Betrachtung von Participation-Ratios der normierten Tunnelamplitude. Es wurde in diesem Abschnitt gezeigt, dass die Methode durchaus auch erwartete Übergänge zu eher metallischen Zuständen anzeigen kann. Da für die wechselwirkenden polarisierten Elektronensysteme (ohne Berücksichtigung des Spins) aber kein Anzeichen eines Metall-Isolator-Übergangs zu erkennen ist (siehe Abschnitte III.F.1 und III.F.2), soll nun das Lokalisierungsverhalten unter Berücksichtigung des Elektronenspins betrachtet werden. Dadurch wird auch ein Vergleich mit den Experimenten (siehe Abschnitt III.A.2) zum parallelen Magnetowiderstand (mit einem Magnetfeld, das in der Systemebene liegt) ermöglicht.

#### III.F.4. Spinkanäle für die Tunnelamplitude

In diesem eher technischen (und zum Verständnis nicht unbedingt notwendigen) Abschnitt wird das Konzept der Tunnelamplitude (siehe Abschnitt III.C.4) auf Elektronensysteme mit Spin verallgemeinert und diskutiert, warum nicht periodische, sondern harte Randbedingungen in den Simulationen verwendet werden. Ein erweitertes zweidimensionales Anderson-Modell mit Berücksichtigung des Elektronenspins wurde bereits in Abschnitt III.B.6 vorgestellt, siehe Glgn. (III.B.16) bis (III.B.20). Wesentlich ist dabei, dass sich zwei Elektronen (mit entgegengesetztem Spin) auf einem Gitterplatz aufhalten dürfen. Die Abstoßung zwischen zwei solchen Elektronen wird durch die kurzreichweitige Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$ , Gl. (III.B.17), beschrieben, die zu der schon in den vorhergehenden Abschnitten verwendeten, langreichweitig mit  $1/r$  abfallenden Coulomb-Wechselwirkung  $U$ , Gl. (III.B.18), hinzukommt. Als erstes wird jetzt nur die Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$  verwendet ( $U = 0$ ). Aufgrund des numerischen Aufwands, der noch stärker mit der Elektronenzahl ansteigt als bei den polarisierten Elektronen, können Systeme mit vier Elektronen auf einem  $6 \times 6$ -Gitter und mit sechs Elektronen auf einem  $4 \times 4$ -Gitter betrachtet werden. Um den Bereich der schwachen Lokalisierung zu betrachten, verwenden wir die Unordnungsstärken  $w = 5$  bzw. 8.

Da das Modell keinen Mechanismus für ein Umklappen des Spins enthält, können die Eigenzustände  $|0^{N,S_z}\rangle$  für jeden möglichen Gesamtspin  $S_z$  der  $N$  Elektronen in  $z$ -Richtung getrennt berechnet werden. Um die Tunnelamplituden  $\langle 0^{N,S_z} | \hat{a}_r^+ | 0^{N-1,S'_z} \rangle$  zwischen den Grundzuständen mit  $N-1$  und  $N$  Elektronen zu bestimmen, muss als erstes geklärt werden, zwischen welchen Spin-Zuständen der Übergang erfolgt. Dabei gibt es verschiedene erlaubte Übergänge (Spinkanäle) für die Spinkomponente  $S'_z$  des  $N-1$ - und  $S_z$  des  $N$ -Teilchen-Zustands. Bei  $N = 4$  sind vier Spinkanäle möglich,



**Abb. III.F.9:** Participation-Ratios für die Tunnelamplituden verschiedener Spin-Kanäle in Abhängigkeit von der Stärke der Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$  für (a)  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf einem  $6 \times 6$ -Gitter und (b)  $5 \rightarrow 6$  Elektronen auf einem  $4 \times 4$ -Gitter, beide ohne Coulomb-Wechselwirkung ( $U = 0$ ). Die Symbole entsprechen den einzelnen erlaubten Spin-Übergängen, siehe Legende. Die Ergebnisse wurden über 100 Konfigurationen logarithmisch gemittelt und die Fehlerbalken zeigen die Standardabweichungen der Mittelwerte (nach [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]).

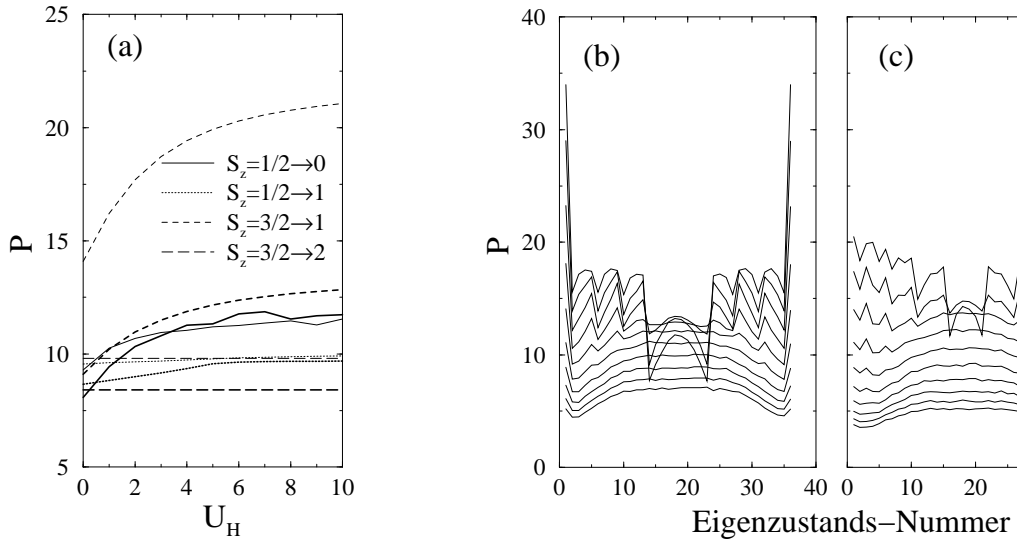
$$|0^{3,1/2}\rangle \rightarrow |0^{4,0}\rangle, \quad |0^{3,1/2}\rangle \rightarrow |0^{4,1}\rangle, \quad |0^{3,3/2}\rangle \rightarrow |0^{4,1}\rangle, \quad |0^{3,3/2}\rangle \rightarrow |0^{4,2}\rangle, \quad (\text{III.F.6})$$

und für  $N = 6$  gibt es dementsprechend 6 Spinkanäle,

$$|0^{5,1/2}\rangle \rightarrow |0^{6,0}\rangle, \quad |0^{5,1/2}\rangle \rightarrow |0^{6,1}\rangle, \quad |0^{5,3/2}\rangle \rightarrow |0^{6,1}\rangle, \quad |0^{5,3/2}\rangle \rightarrow |0^{6,2}\rangle, \quad |0^{5,5/2}\rangle \rightarrow |0^{6,2}\rangle, \quad |0^{5,5/2}\rangle \rightarrow |0^{6,3}\rangle. \quad (\text{III.F.7})$$

Abbildung III.F.9 zeigt die Abhängigkeit der Participation-Ratios  $P$  (Gl. (III.C.35)) der Tunnelamplituden von der Hubbard-Wechselwirkungsstärke  $U_H$  für alle vier bzw. sechs möglichen Spinkanäle [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]; es ist wieder der logarithmische Mittelwert  $P_{\text{typ}}$  über die Unordnungs-Konfigurationen nach Gl. (III.F.3) berechnet, weil der schneller konvergiert. Während die Tunnelamplituden ohne Wechselwirkung ( $U_H = 0$ ) sehr ähnliche Werte von  $P$  aufweisen, steigen einige für  $U_H > 0$  deutlich an, was eine schwächere Lokalisierung, d.h. eher metallisches Verhalten signalisiert. Für vollständig polarisierte Elektronen entsprechend dem Übergang  $S_z = \frac{3}{2} \rightarrow 2$  in Abb. III.F.9(a) und  $S_z = \frac{5}{2} \rightarrow 3$  in Abb. III.F.9(b) hat die Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$  keine Auswirkungen, da sie nur Elektronen mit unterschiedlichem Spin koppelt (siehe Gl. (III.B.17)).

Es ist interessant, dass es zwei unterschiedliche Grade des Anstiegs gibt. Die Participation-Ratios für die Übergänge, bei denen ein Elektron mit Spin nach unten hinzukommt,  $S_z(\text{Ende}) = S_z(\text{Anfang}) - 1/2$ , steigen verhältnismäßig stärker an als die Participation-Ratios für die Übergänge, bei denen ein Elektron mit Spin nach oben hinzukommt,  $S_z(\text{Ende}) = S_z(\text{Anfang}) + 1/2$ . Der Grund dafür könnte sein, dass das zusätzliche Elektron mit Spin nach unten zu mehreren Elektronen hinzukommt, die einen Spin nach oben haben, was die Wirksamkeit der Hubbard-Wechselwirkung verstärkt. Ein zusätzliches Elektron mit Spin nach oben, das zu mehreren anderen Elektronen mit Spin nach oben hinzukommt, kann hingegen nicht oder kaum die Hubbard-Wechselwirkung ausnutzen, die nur Elektronen mit entgegengesetztem Spin koppelt. Es fällt auch auf, dass  $P$  für die sechs Elektronen auf dem  $4 \times 4$ -Gitter bei starker Hubbard-Wechselwirkung  $U_H \geq 5$  wieder leicht abfällt, während der Wert für vier Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter nur sättigt. Wir schreiben dieses Verhalten den stark



**Abb. III.F.10:** (a) Participation-Ratios für die normierten Tunnelamplituden verschiedener Spin-Kanäle (siehe Legende) in Abhängigkeit von der Stärke der Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$  für periodische Randbedingungen (dünne Linien) und harte Randbedingungen (dicke Linien), für  $3 \rightarrow 4$  Elektronen im erweiterten Anderson-Modell mit Hubbard-Wechselwirkung und schwacher Unordnung  $w = 5$  auf einem  $6 \times 6$ -Gitter. (b) und (c): Mittlere Participation-Ratios für je 1000 Einteilchen-Eigenzustände auf einem  $6 \times 6$ -Gitter im Standard-Anderson-Modell ( $U = U_H = 0$ ) für  $w = 1$  (oberste Kurve) bis  $w = 10$  (unterste Kurve) für (b) periodische und (c) harte Randbedingungen (nach [BERKOVITS&KANTELHARDT-02b]).

unterschiedlichen Ladungsträgerdichten  $v = 3/8 \approx 0.38$  bzw.  $1/9 \approx 0.11$  zu, wobei die größere Ladungsträgerdichte schon zu einem Anzeichen für einen Mott-Hubbard-Übergang führt, der bei der kleineren Ladungsträgerdichte noch nicht in Erscheinung tritt.

Hier ist anzumerken, dass es einen erstaunlich großen Unterschied macht, ob periodische Randbedingungen oder harte Randbedingungen, d.h. ein unendliches Potenzial am Rand, verwendet werden [BERKOVITS&KANTELHARDT-02b]. Die eben diskutierten Ergebnisse gelten für harte Randbedingungen und erscheinen uns physikalisch sinnvoller. Wie Abb. III.F.10(a) zeigt, ist insbesondere der Participation-Ratio für die Tunnelamplitude des Übergangs vom vollständig polarisierten Zustand in den nicht vollständig polarisierten Zustand,  $|0^{3,3/2}\rangle \rightarrow |0^{4,1}\rangle$  für periodische Randbedingungen deutlich größer als alle anderen Participation-Ratios. Bei harten Randbedingungen sind die Werte hingegen vergleichbar. Die  $U_H$ -Abhängigkeit von  $|0^{3,3/2}\rangle \rightarrow |0^{4,1}\rangle$  ist bei beiden Randbedingungsarten sehr ähnlich, da die beiden gestichelten Linien in Abb. III.F.10(a) fast parallel verlaufen, und der Unterschied ist schon ohne Hubbard-Wechselwirkung ( $U_H = 0$ ) zu beobachten. Daher handelt es sich nicht um einen Effekt der Wechselwirkungen, sondern um einen Einteilchen-Effekt.

Die Abbildungen III.F.10(b) und (c) zeigen die über 1000 Konfigurationen gemittelten Participation-Ratios der 36 entsprechend ihrer Energie-Eigenwerte geordneten Einteilchen-Zustände des Systems mit  $6 \times 6$  Gitterplätzen für verschiedene Unordnungsstärken  $w$ . Man erkennt, dass die Zustände mit der kleinsten und der größten Energie (Nr. 1 und 36) bei periodischen Randbedingungen (Abb. III.F.10(b)) einen überaus großen Participation-Ratio haben. Das liegt daran, dass die entsprechenden Eigenfunktionen fast konstant sind und nur sehr wenig von der Unordnung beeinflusst werden. Bei harten Randbedingungen (Abb. III.F.10(c)) können keine fast konstanten Zustände vorkommen, und alle Zustände haben einen ähnlichen Participation-Ratio. Wenn man nun zu den 3- bzw. 4-Elektronenzuständen übergeht, so kommt für den Spinkanal  $|0^{3,3/2}\rangle \rightarrow |0^{4,1}\rangle$  gerade ein Elektron mit Spin nach unten zu drei Elektronen mit Spin nach oben. Für die Grundzustände wird dieses Elektron näherungsweise in den energetisch tiefsten unbesetzten Zustand mit Spin nach unten gehen, und das ist hier der tiefste Einteilchenzustand, für den der Participation-Ratio bei periodischen

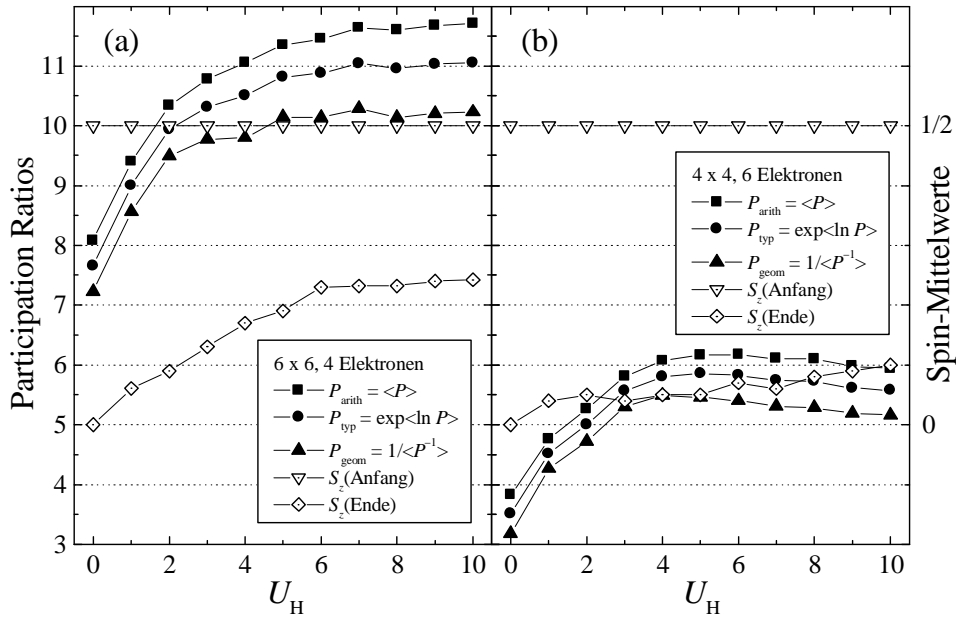
Randbedingungen so ungewöhnlich (unphysikalisch) groß ist. Daher liegt die Kurve für  $|0^{3,3/2}\rangle \rightarrow |0^{4,1}\rangle$  bei periodischen Randbedingungen unphysikalisch hoch. Aus diesem Grund betrachten wir für die Elektronen mit Spin harte Randbedingungen. Im Unterschied zu den Elektronen ohne Spin muss dann übrigens in dem Term für die Coulomb-Wechselwirkung eine Hintergrund-Ladung berücksichtigt werden, damit die Elektronen nicht an die harte Wand gedrückt werden (siehe Gl. (III.B.18)).

Für die Transporteigenschaften ohne thermische Anregungen (im Limes  $T \rightarrow 0$ ) sind nicht alle nach den Regeln (III.F.6) bzw. (III.F.7) erlaubten Spinkanäle wirklich maßgeblich. Tatsächlich ist immer der Übergang zwischen dem energetisch tiefsten  $N-1$ -Teilchen-Zustand und dem energetisch tiefsten  $N$ -Teilchen-Zustand entscheidend, falls dieser Übergang nach den Regeln erlaubt ist. Wenn die entsprechenden Eigenenergien entartet sind, betrachten wir immer den Zustand mit dem größten  $S_z$  als Grundzustand; das entspricht der Annahme eines infinitesimalen polarisierenden Magnetfelds. Gibt es zwischen den so gefundenen Grundzuständen keinen erlaubten Übergang, sind die Tunnelamplitude und auch der Participation-Ratio  $P$  für die betreffende Konfiguration Null. Da aber nicht nur die Eigenzustände, sondern auch die Eigenwerte von Modell-Parametern wie  $U_H$  abhängen und für verschiedene Konfigurationen schwanken, wird nicht für jede Konfiguration und alle  $U_H$  der gleiche Spinkanal den Grundzustandsübergang darstellen [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]. Abbildung III.F.11 zeigt die Mittelwerte  $S_z(\text{Anfang})$  vom Spin im 3-Elektronen- (Anfangs-) Zustand und  $S_z(\text{Ende})$  vom 4-Elektronen- (End-) Zustand. Man erkennt, dass ohne Wechselwirkung ( $U_H = 0$ ) nur Übergänge zwischen den tiefsten Spin-Werten  $S_z(\text{Anfang}) = 1/2$  und  $S_z(\text{Ende}) = 0$  erfolgen, während bei  $U_H > 0$  auch manchmal ein höherer Wert  $S_z(\text{Ende})$  vorkommt.

### III.F.5. Auswirkungen der Hubbard-Wechselwirkung und eines parallelen Magnetfelds auf Elektronen mit Spin

Abbildung III.F.11 zeigt für das erweiterte Anderson-Modell mit Spin und (kurzreichweitiger Hubbard-) Elektron-Elektron-Wechselwirkung die drei Mittelwerte der Participation-Ratios  $P$  der Tunnelamplitude nach Gl. (III.F.3) in Abhängigkeit von der Stärke der Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$ . Die verschiedenen Mittelwerte weisen zwar quantitativ leicht verschiedene Werte auf, haben aber qualitativ für beide betrachteten Systeme, (a) vier Elektronen auf einem  $6 \times 6$ -Gitter und (b) sechs Elektronen auf einem  $4 \times 4$ -Gitter, dasselbe Verhalten. Das bedeutet, dass die Breite der Verteilung der  $P^{(v)}$ -Werte für die einzelnen Konfigurationen keine Rolle spielt. Mit anwachsender Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$  steigen auch die Participation-Ratios  $P$  für den Transport bei  $T = 0$  deutlich an solange  $U_H \leq 5$ , und für größere  $U_H$  hängen sie nur noch schwach davon ab. Das bedeutet, dass der Transport im zweidimensionalen System durch Hubbard-Wechselwirkungen verstärkt wird; das Verhalten wird etwas metallischer. Die Verstärkung ist im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen allerdings eher schwach und erreicht maximal 50% für das  $6 \times 6$ -Gitter mit vier Elektronen und 70% für das  $4 \times 4$ -Gitter mit sechs Elektronen. Der Bereich von  $U_H$ , in dem die Verstärkung auftritt, kann nicht direkt mit experimentellen Ergebnissen verglichen werden, weil der dafür relevante Parameter  $r_s$  mit der Coulomb-Wechselwirkung  $U$  zusammenhängt, die hier 0 ist, und nicht mit der Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$ ; siehe Gl. (III.F.1).

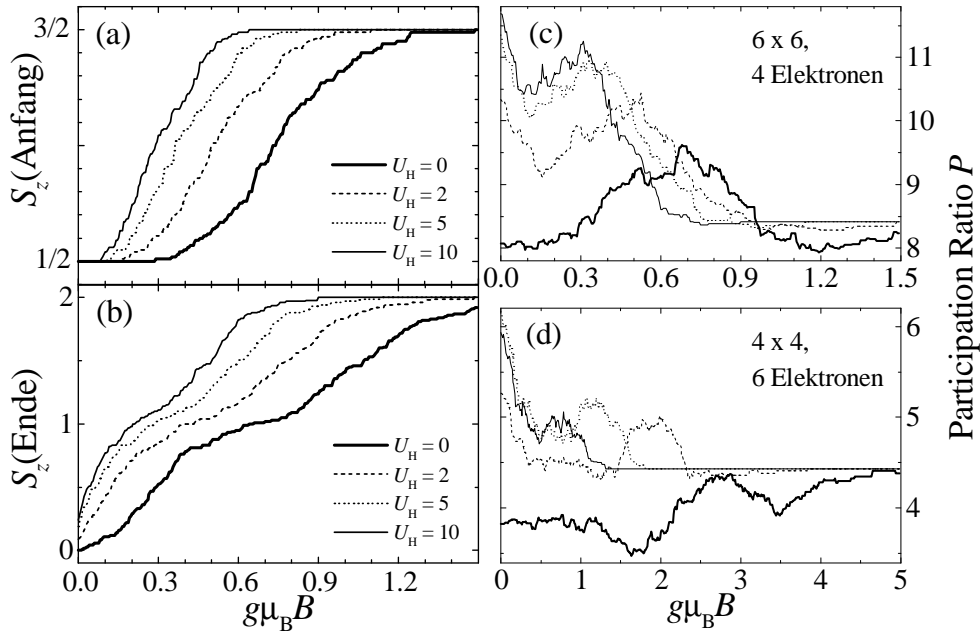
Als nächstes soll untersucht werden, wie der Transport bei  $T = 0$  von einem parallelen Magnetfeld  $B$ , einem Feld in der Ebene des Elektronensystems, beeinflusst wird [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]. Während es für ein senkrechtes Feld zu Veränderungen der Bahnen kommt (siehe Abschnitt III.F.3), wechselwirkt das parallele Feld nur mit den Elektronenspins, siehe Glgn. (III.B.16) bis (III.B.20). Da die Vielteilchen-Eigenfunktionen  $|0^{N,S_z}\rangle$  bereits als Eigenzustände des entsprechenden Spinoperators  $S_z$  berechnet wurden, bleiben sie auch mit Magnetfeld Eigenfunktionen. Das einzige, was das Magnetfeld verändert, sind die Vielteilchen-Eigenwerte  $E_\alpha^{N,S_z}$ , die sich nach Gl.



**Abb. III.F.11:** Mittlere Participation-Ratios der normierten Tunnelamplituden für  $T = 0$ -Transport (ausgefüllte Symbole und linke Skala) und mittlere Spins vor ( $S_z(\text{Anfang})$ ,  $\nabla$ ) und nach ( $S_z(\text{Ende})$ ,  $\diamond$ ) dem Tunnelprozess (rechte Skala) in Abhängigkeit von der Stärke der Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$  für (a)  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter und (b)  $5 \rightarrow 6$  Elektronen auf dem  $4 \times 4$ -Gitter im erweiterten Anderson-Modell mit Hubbard-Wechselwirkung, ohne Coulomb-Wechselwirkung ( $U = 0$ ) und mit schwacher Unordnung. Die Resultate für verschiedene Mittelwerte der Participation-Ratios, arithmetischer Mittelwert ( $\square$ ), typischer Mittelwert ( $\bullet$ ) und geometrischer Mittelwert ( $\blacktriangle$ ) sind qualitativ gleich. In der Mittelungsprozedur für 100 Konfigurationen wurden die Spinkanäle gewählt wie im Text beschrieben; bei allen Konfigurationen war die Tunnelamplitude nicht null (nach [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]).

(III.B.19) um den Wert  $-g\mu_B B S_z$  verschieben, also auf  $E_{\alpha}^{N, S_z} - g\mu_B B S_z$ . Dadurch werden möglicherweise andere Eigenzustände zum Grundzustand, und die Bestimmung der maßgeblichen Spinkanäle zwischen dem energetisch tiefsten  $N-1$ -Teilchen-Zustand und dem energetisch tiefsten  $N$ -Teilchen-Zustand muss für jedes Feld  $B$  wiederholt werden. Es ist zu erwarten, dass mit wachsendem  $B$  ein höherer Polarisationsgrad der Elektronen energetisch günstiger wird [KURLANDetal-01]. Die Ergebnisse für  $S_z(\text{Anfang})$  und  $S_z(\text{Ende})$  für  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter in Abb. III.F.12 bestätigen diese Erwartung klar. Gezeigt ist der Mittelwert des Spins vom 3-Elektronen-Grundzustand ( $S_z(\text{Anfang})$ , Abb. III.F.12(a)) und vom 4-Elektronen-Grundzustand ( $S_z(\text{Ende})$ , Abb. III.F.12(b)) in Abhängigkeit vom parallelen Magnetfeld  $B$  für vier Werte von  $U_H$ ; man sieht in beiden Teilen einen monotonen Anstieg bis auf die maximalen Werte  $S_z(\text{Anfang}) = 3/2$  und  $S_z(\text{Ende}) = 2$  bei hohen  $B$ .

Jetzt kann – unter zusätzlicher Berücksichtigung der Regel  $S_z(\text{Ende}) = S_z(\text{Anfang}) \pm 1/2$  – auch der Mittelwert der Participation-Ratios  $P$  der entsprechenden normierten Tunnelamplituden für verschiedene Magnetfelder berechnet werden, um die Frage nach der  $B$ -Abhängigkeit des  $T = 0$ -Transports zu klären [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]. Die Ergebnisse dieser  $B$ -abhängigen Mittelungsprozedur sind in Abb. III.F.12(c) für  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter und in Abb. III.F.12(d) für  $5 \rightarrow 6$  Elektronen auf dem  $4 \times 4$ -Gitter gezeigt, wieder für verschiedene Werte der Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$ . Im Fall ohne Wechselwirkung gibt es nur eine schwache, nicht monotone Feldabhängigkeit des mittleren Participation-Ratios. Für  $U_H > 0$  beobachten wir zuerst einen Abfall von  $P$  im Bereich  $g\mu_B B < \Delta$ , wobei  $\Delta$  dem mittleren Niveauabstand der Einteilchen-Zustände entspricht;  $\Delta \approx 4/(6 \cdot 6) \approx 0.11$  für das  $6 \times 6$ -Gitter und  $\Delta \approx 4/(4 \cdot 4) = 0.25$  für das  $4 \times 4$ -Gitter). Dieses Verhalten ist das Ergebnis eines größeren Participation-Ratios für die Übergänge  $S_z(\text{Ende}) = S_z(\text{Anfang}) - 1/2$  verglichen mit dem Übergang  $S_z(\text{Ende}) = S_z(\text{Anfang}) + 1/2$ . Wie die

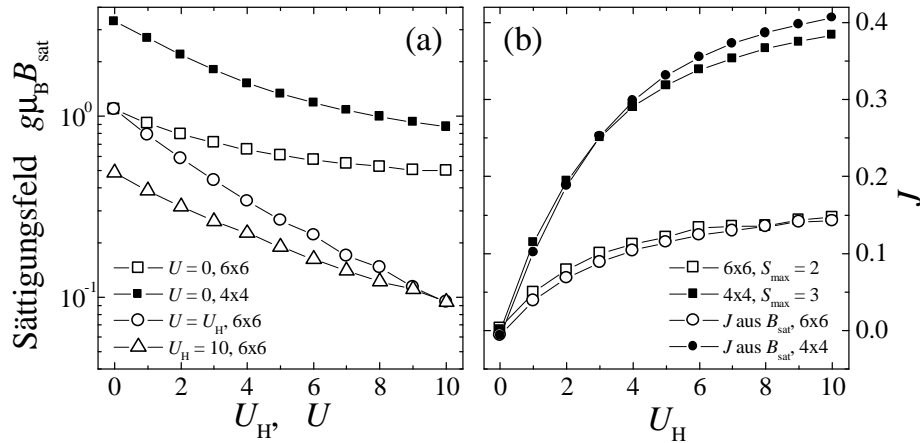


**Abb. III.F.12:** Links: Mittlere Spins  $S_z$  (a) vor und (b) nach dem Tunnelprozess zwischen Grundzuständen in Abhängigkeit vom skalierten Magnetfeld  $B$  für  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter. Mit steigendem Feld treten Grundzustände mit immer stärkerer Polarisierung auf. Die unterschiedlichen Linien entsprechen verschiedenen Stärken der Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$  (siehe Legende), während keine Coulomb-Wechselwirkung vorhanden ist ( $U = 0$ ). Rechts sind die mittleren Participation-Ratios  $P_{\text{arith}}$  der  $T = 0$  Tunnelamplituden ebenfalls in Abhängigkeit vom skalierten Magnetfeld  $B$  gezeigt für (c)  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter und (d)  $5 \rightarrow 6$  Elektronen auf dem  $4 \times 4$ -Gitter. In der Mittelungsprozedur für 100 Konfigurationen wurden die Spinkanäle gewählt wie im Text beschrieben; Konfigurationen mit verbotenen Grundzustands-Übergang wurden in der Prozedur nicht berücksichtigt (nach [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]).

Abbildungen III.F.12(a) und (b) zeigen, entspricht der Grundzustand für  $g\mu_B B < \Delta/2$  dem Wert  $S_z(\text{Anfang}) = 1/2$  während im Endzustand mit ansteigendem  $B$  mehr und mehr Konfigurationen von  $S_z(\text{Ende}) = 0$  auf  $S_z(\text{Ende}) = 1$  umschwenken; das Umschwenken einzelner Konfigurationen verursacht die kleinen Sprünge in den Kurven. Die Veränderung des Spins im Zielzustand ist der Grund für den Abfall des mittleren  $P$  in Abb. III.F.12(c) und (d), was einer Abnahme der Leitfähigkeit entspricht. Dieser anfängliche Abfall wird gefolgt von Zwischenmaxima und -minima, da die Mittelwerte von  $S_z$  mit wachsendem  $B$  ansteigen und abwechselnd  $S_z(\text{Ende}) = S_z(\text{Anfang}) - 1/2$  und  $S_z(\text{Ende}) = S_z(\text{Anfang}) + 1/2$  überwiegen. Es tritt immer ein lokales Maximum auf, wenn  $S_z(\text{Ende}) = S_z(\text{Anfang}) - 1/2$  überwiegt; generell ist eine fallende Tendenz zu beobachten. Sobald für einen größeren Anteil der Konfigurationen Anfangs- und Endzustand vollständig Spin-polarisiert sind,  $S_z(\text{Anfang}) = 3/2$  ( $5/2$ ) und  $S_z(\text{Ende}) = 2$  ( $3$ ), für vier (sechs) Elektronen, d.h. für große Felder  $B$ , fällt die Leitfähigkeit für alle Stärken der Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$  auf denselben Wert. Der Grund ist, dass der vollständig polarisierte Spinkanal nur Elektronen mit derselben Spinrichtung enthält, die die Hubbard-Wechselwirkung nicht koppelt. Die Werte des Sättigungs-Magnetfelds  $B_{\text{sat}}$ , für die das System vollständig Spin-polarisiert wird, sind für beide betrachteten Systemgrößen in Abb. III.F.13(a) gezeigt. Man erkennt, dass  $B_{\text{sat}}$  mit zunehmender Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$  abnimmt, aber für keinen der betrachteten Werte verschwindet.

Die Ergebnisse ähneln einigermaßen den experimentellen Resultaten (siehe Abschnitt III.A.2, insbesondere Abb. III.A.4). Der spezifische Widerstand eines zweidimensionalen Halbleiterbauelements, das eine metallische Phase aufweist, steigt mit zunehmendem parallelen Magnetfeld an, bis für  $B > B_{\text{sat}}$  ein konstanter spezifischer Widerstand erreicht ist. Dem entspricht das Abfallen der Participation Ratios in Abb. III.F.12(c) und (d) bis zu dem konstanten Niveau. Trotz dieser qualita-





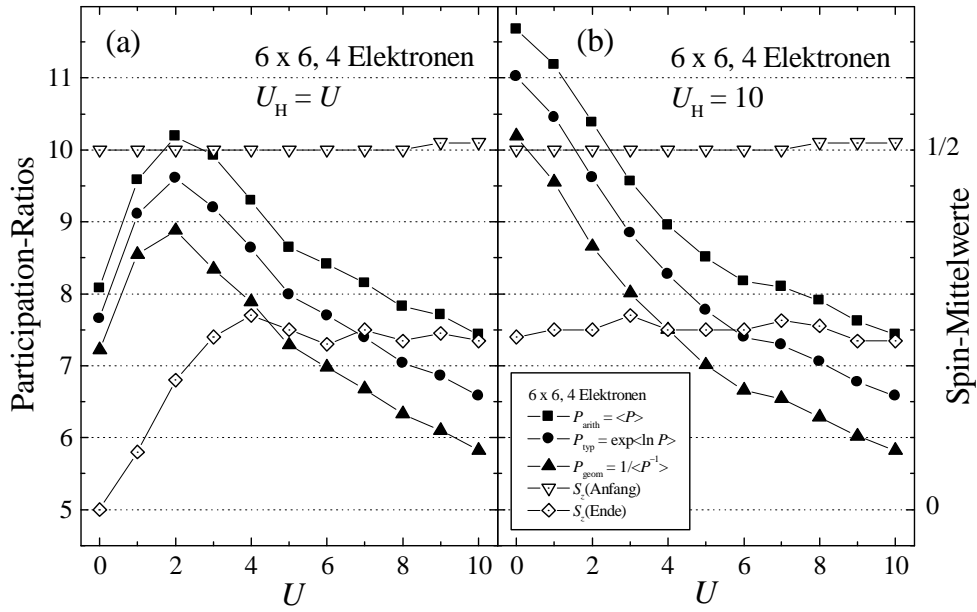
**Abb. III.F.13:** (a) Das Sättigungsfeld  $B_{\text{sat}}$ , für das das System vollständig Spin-polarisiert wird und der mittlere Participation-Ratio  $P$  der  $T = 0$ -Tunnelamplitude seinen asymptotischen Wert erreicht, aufgetragen gegen die Stärke der Hubbard-Wechselwirkung  $U_H$  ohne Coulomb-Wechselwirkung  $U$  ( $\square$  für  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter,  $\blacksquare$  für  $5 \rightarrow 6$  Elektronen auf dem  $4 \times 4$ -Gitter), gegen  $U_H = U$  ( $\circ$  für  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter) und gegen  $U$  bei  $U_H = 10$  ( $\triangle$  für  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter). Die Werte von  $B_{\text{sat}}$  sind über 100 Konfigurationen gemittelt. (b) Die Werte der mittleren Austauschenergie  $J$  in Abhängigkeit von  $U_H$  bei  $U = 0$  für  $6 \times 6$ -Gitter (offene Symbole) und  $4 \times 4$ -Gitter (ausgefüllte Symbole). Es werden zwei Arten der Berechnung von  $J$  verglichen: (i)  $J$  bestimmt aus den Eigenwerten von Gl. (III.F.8) für  $B = 0$  ( $\square, \blacksquare$ ) und (ii)  $J$  bestimmt aus  $B_{\text{sat}}$  über die diskrete Version von Gl. (III.F.9) ( $\circ, \bullet$ ). Das Bild zeigt eine gute Übereinstimmung, die den Ansatz bestätigt,  $B_{\text{sat}}$  mit  $U_H$  in Verbindung zu bringen (nach [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]).

tiven Ähnlichkeit mit unseren Simulationsergebnissen, ist die Stärke der von uns beobachteten Reduktion deutlich geringer als in den Experimenten. Für Silizium-Bauelemente wurde ein Abfall der Leitfähigkeit um zwei Größenordnungen gemessen (abhängig von der Temperatur) [SIMONIANetal-97, PUDALOVetal-97], während für GaAs-Bauelemente nur ein Faktor von 3 berichtet wurde [SIMMONSetal-98, YOONetal-00]. Ein weiteres Problem bei der Verbindung unserer Simulationen mit Experimenten ist die Abhängigkeit des Sättigungsfeldes von  $U_H$ . In einigen Experimenten wurde  $B_{\text{sat}} (\equiv H_c) \sim (n_s - n_c)^\delta$  mit  $\delta = 1$  für einen breiten Bereich von Ladungsträgerdichten  $n_s$  und die kritische Dichte des Metall-Isolator-Übergangs  $n_s$  gefunden [SHASHKINETal-01a], während andere Experimente eher ein Potenzgesetz mit  $\delta \approx 0.6$  nahe legen [VITKALOVetal-01] (siehe Abschnitt III.A.2). Da unsere Simulationen keinen Metall-Isolator-Übergang zeigen, ist nicht klar, wie sich diese experimentellen Ergebnisse damit vergleichen lassen. Außerdem ist der experimentell relevante Parameter, die Ladungsträgerdichte  $n_s$ , über  $r_s$  nach Gl. (III.F.1) mit der Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U$  verknüpft und nicht mit der Hubbard-Wechselwirkungsstärke  $U_H$ .

Dennoch ist es durch folgende Betrachtung möglich, eine Verbindung zwischen  $B_{\text{sat}}$  und  $U_H$  herzustellen: Die niedrigste mittlere Energie des Hamilton-Operators (III.B.20) für einen gegebenen Spin-Wert  $S$  kann angenähert werden durch [KURLANDetal-01]

$$E(S) - E(0) = \Delta S^2 - JS(S+1) - g\mu_B BS, \quad (\text{III.F.8})$$

wobei  $J$  die mittlere Austausch-Energie ist, die von  $U$  und  $U_H$  abhängt, und  $\Delta$  wieder den mittleren Niveau-Abstand der Einteilchen-Zustände bezeichnet. Abbildung III.F.13(b) zeigt die damit aus  $E(S_{\text{max}})$  und  $E(0)$  berechneten Werte von  $J$  für  $B = 0$  und  $U = 0$ . Ein Potenzgesetz  $J \sim (U_H)^\alpha$  mit einem Exponenten  $\alpha$  zwischen 0.25 und 0.5 könnte aus unseren Simulationsergebnissen abgelesen werden, und diese Relation ist konsistent mit Ergebnissen aus einer vorhergehenden Studie des ungeordneten Hubbard-Modells [FOLKetal-01]. Das Sättigungsfeld  $B_{\text{sat}}$  entspricht dem Feld, für das die Energie des vollständig polarisierten Zustands minimal wird,  $\partial E(S)/\partial S = 0$  mit  $S = S_{\text{max}}$ ; dies führt auf



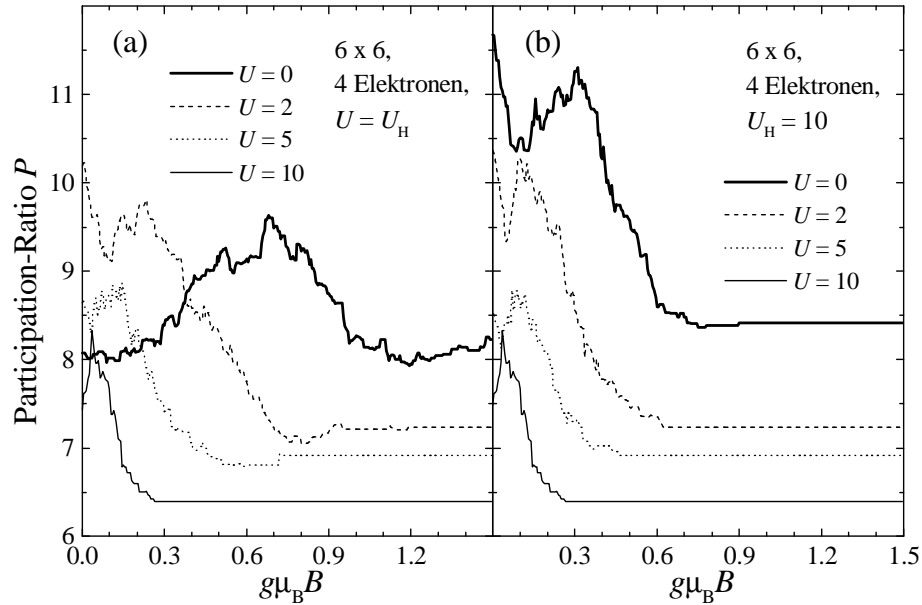
**Abb. III.F.14:** Mittlere Participation-Ratios der normierten Tunnelamplituden für  $T = 0$ -Transport (ausgefüllte Symbole und linke Skala) und mittlere Spins vor ( $S_z(\text{Anfang})$ ,  $\nabla$ ) und nach ( $S_z(\text{Ende})$ ,  $\diamond$ ) dem Tunnelprozess (rechte Skala) in Abhängigkeit von der Stärke der Coulomb-Wechselwirkung  $U$  für (a) Hubbard-Wechselwirkung  $U_H = U$  und (b)  $U_H = 10$  (in Einheiten der Nichtdiagonalelemente des Hamilton-Operators, was der kinetischen Energie entspricht). Betrachtet wurden  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter. Die Resultate für verschiedene Mittelwerte der Participation-Ratios, arithmetischer Mittelwert ( $\square$ ), typischer Mittelwert ( $\bullet$ ) und geometrischer Mittelwert ( $\blacktriangle$ ) sind qualitativ gleich. Die Mittelungsprozedur ist dieselbe wie für Abb. III.F.11 (nach [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]).

$$g\mu_B B_{\text{sat}} = 2\Delta S_{\text{max}} - J(2S_{\text{max}} + 1). \quad (\text{III.F.9})$$

Für kleine Werte von  $S$  ist es besser, die Ableitung, die auf Gl. (III.F.9) führt, durch einen diskreten Differenzenquotienten zu ersetzen, was zu  $g\mu_B B_{\text{sat}} = \Delta(2S_{\text{max}} - 1) - 2JS_{\text{max}}$  führt. In Abb. III.F.13(b) sind die Mittelwerte von  $J$  berechnet aus  $B_{\text{sat}}$  über diese Gleichung mit den nach Gl. (III.F.8) aus den Eigenwerten berechneten Werten verglichen. Das Bild zeigt, dass die Gleichungen das Verhalten von  $B_{\text{sat}}$  in zufrieden stellender Weise beschreiben können. Damit ist gezeigt, dass dieselbe Physik einer vollständigen Spin-Polarisierung beim Sättigungsfeld sowohl die experimentellen [SHASHKINetal-01a, DOLGOPOLOV&GOLD-00] als auch unsere numerischen Ergebnisse beschreiben kann. Allerdings ist anzumerken, dass die mittlere Austausch-Energie  $J$  für  $U_H \rightarrow \infty$  kleiner als  $\Delta$  bleibt [KURLANDetal-01] und dass es darum in dem betrachteten Modell keinen ferromagnetischen Übergang geben kann. Darum bleibt  $B_{\text{sat}}$  stets  $> 0$  und das Modell kann das experimentell beobachtete Verschwinden des Sättigungsfelds nicht beschreiben.

### III.F.6. Das Wechselspiel von Hubbard- und Coulomb-Wechselwirkung

Da sich die kurzreichweitigen Hubbard-Wechselwirkungen  $U_H$  im vorhergehenden Abschnitt als nicht ausreichend erwiesen haben, um das Verhalten der Elektronen in der Nähe des Metall-Isolator-Übergangs in zweidimensionalen Systemen realistisch zu beschreiben, sollen nun auch noch die langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkungen  $U$  berücksichtigt werden, deren Auswirkungen für polarisierte Elektronen schon in Abschnitt III.F.1 untersucht wurden. Wie unter Gl. (III.B.18) in Abschnitt III.B.6 diskutiert wurde, gibt es keinen für Halbleiter etablierten Zusammenhang zwischen  $U$  und  $U_H$ . Wir beginnen mit dem größten möglichen Wert der Coulomb-Wechselwirkung,  $U = U_H$ . Abbildung III.F.14(a) zeigt – wie für  $U = 0$  in Abb. III.F.11(a) – die Spin-Mittelwerte  $S_z(\text{Anfang})$  und  $S_z(\text{Ende})$  sowie die Participation-Ratio-Mittelwerte  $P$  der normier-



**Abb. III.F.15:** Mittlere Participation-Ratios  $P_{\text{arith}}$  der  $T = 0$ -Tunnelamplituden in Abhängigkeit vom skalierten Magnetfeld  $B$  für  $3 \rightarrow 4$  Elektronen auf dem  $6 \times 6$ -Gitter. Die unterschiedlichen Linien entsprechen verschiedenen Stärken der Coulomb-Wechselwirkung  $U$  (siehe Legende), während die Hubbard-Wechselwirkung (a) minimal gesetzt ist ( $U_H = U$ ) bzw. (b) auf  $U_H = 10$  fixiert ist. Sättigung der Participation-Ratios tritt auf, sobald die Zustände alle vollständig polarisiert sind. Die Mittelungsprozedur ist wie für Abb. III.F.12 (nach [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]).

ten Tunnelamplituden für den  $T = 0$ -Transport von 4 Elektronen auf einem  $6 \times 6$ -Gitter. Wiederum weisen die verschiedenen Mittelwerte von  $P$  qualitativ dasselbe Verhalten auf, so dass die Verteilung der Participation-Ratios offensichtlich nicht wesentlich ist. Aber jetzt gibt es in Abb. III.F.14(a) einen kurzen anfänglichen Anstieg der Participation-Ratios für  $U = U_H < 2$ , an den sich ein deutlicher Abfall anschließt.

Dieses Verhalten ist auf das Wechselspiel von kurzreichweitiger Hubbard- und langreichweitiger Coulomb-Wechselwirkung zurückzuführen [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a]. Kurzreichweitige Wechselwirkungen erhöhen die Participation-Ratios der Tunnelamplituden, während langreichweitige Wechselwirkungen sie verringern, indem sie die Lokalisierung verstärken. Die Erhöhung durch die Hubbard-Wechselwirkung geschieht dabei vor allem im Bereich kleiner Wechselwirkungsstärken  $U_H$  (siehe Abb. III.F.11(a)), während Abb. III.F.14(b) zeigt, dass die Verringerung durch die Coulomb-Wechselwirkung auch noch bei größeren Wechselwirkungsstärken  $U$  erfolgt. Für Abb. III.F.14(b) ist die Hubbard-Wechselwirkung auf den konstanten Wert  $U_H = 10$  gesetzt (in Einheiten der Nichtdiagonalelemente des Hamilton-Operators, was der kinetischen Energie entspricht). Eine Kombination der Effekte von Hubbard- und Coulomb-Wechselwirkung führt dann zu dem in Abb. III.F.14(a) erkennbaren Verhalten mit Maximum. Bei kleinen Wechselwirkungsstärken überwiegt der delokalisierende ( $P$  erhöhende) Einfluss der Hubbard-Wechselwirkung und bei großen Wechselwirkungsstärken überwiegt der lokalisierende ( $P$  verringernde) Einfluss der Coulomb-Wechselwirkung.

Abbildung III.F.15 zeigt die Abhängigkeit des Participation-Ratios  $P$  vom parallelen Magnetfeld in Gegenwart langreichweitiger Elektron-Elektron-Wechselwirkungen. Die Haupteffekte aus Abb. III.F.12, die Verringerung von  $P$  durch das Magnetfeld und die Sättigung bei großen Feldstärken sind kaum verändert. Das Sättigungsfeld  $B_{\text{sat}}$ , das in Abb. III.F.13(a) gezeigt ist, fällt auch mit zunehmender Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U$  monoton ab wie bei der schon diskutierten  $U_H$ -Abhängigkeit für  $U = 0$ . Aber es gibt auch ein paar Unterschiede. Der Sättigungswert von  $P$  nimmt mit wachsendem  $U$  deutlich ab; das entspricht der vorhergehenden Beobachtung, dass die lang-

reichweitigen Wechselwirkungen die Lokalisierung verstärken. Weiterhin kann bei der  $U$ -Abhängigkeit des Sättigungsfelds  $B_{\text{sat}}$  in Abb. III.F.13(a) anders als bei der  $U_{\text{H}}$ -Abhängigkeit nicht ausgeschlossen werden, dass  $B_{\text{sat}}$  für einen endlichen Wert von  $U$  verschwinden könnte. Falls wirklich  $B_{\text{sat}} = 0$  eintreten kann, wäre die dafür notwendige Coulomb-Wechselwirkungsstärke  $U$  viel größer als die hier betrachteten Werte. Daher ist auch hier kein direkter Vergleich mit den Experimenten möglich.

Allerdings kann man wegen  $U \neq 0$  mit Gl. (III.F.1) nun eine Beziehung zu den  $r_s$ -Werten der Experimente herstellen. Wegen  $nm/N = 36/4 = 9$  entspricht der Bereich von  $U = 0$  bis 10 in Abb. III.F.14 Werten zwischen  $r_s = 0$  und 8.5. Es wäre verlockend, das Maximum in dem Participation-Ratio  $P$ , das Abb. III.F.14(a) für  $U = 2$ , d.h.  $r_s \approx 1.7$  zeigt, als ein Anzeichen für den Metall-Isolator-Übergang zu interpretieren, aber eine solche Interpretation bringt einige Schwierigkeiten mit sich und ist daher ziemlich zweifelhaft. Zuerst ist der Wert  $r_s \approx 1.7$  sehr klein verglichen mit dem Bereich  $r_s \approx 4$  bis 20, den die Experimentatoren für den Metall-Isolator-Übergang angeben (siehe Abschnitt III.A.1). Weiterhin wird das Maximum bei  $U = 2$  in Abb. III.F.14(a) fast ausschließlich durch die Hubbard-Wechselwirkung verursacht, wie ein Vergleich der Kurven mit Abb. III.F.11(a) und III.F.14(b) beweist. Sobald die Erhöhung von  $P$  durch die kurzreichweitigen Wechselwirkungen schwächer wird, führen die langreichweitigen Wechselwirkungen zu einer monotonen und persistenten Verringerung bis hin zu großen Werten von  $r_s$ . Eigentlich wird der Maximums-Punkt von  $U_{\text{H}}$  bestimmt, während  $r_s$  aber von  $U$  und nicht von  $U_{\text{H}}$  abhängt. Für ein größeres Verhältnis  $U_{\text{H}}/U$  als das minimal Mögliche  $U_{\text{H}}/U = 1$  würde das Maximum bei noch kleineren  $r_s$  auftreten. Der kleine Wert von  $r_s$  und die Tatsache, dass die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung immer die Lokalisierung verstärkt, lassen uns schließen, dass das Maximum nicht als Anzeichen für einen Metall-Isolator-Übergang gewertet werden sollte.

Andererseits reproduziert das Modell den experimentell gefundenen positiven Magnetowiderstand (vgl. Abb. III.A.4) und die Sättigung des Widerstands bei bestimmten Feldern. Die physikalische Ursache der Sättigung ist Spin-Polarisierung der Vielteilchen-Zustände, wie sie auch für die Experimente vorgeschlagen wurde [SHASHKINETal-01a, DOLGOPOLOV&GOLD-00]. Man müsste noch stärkere Coulomb-Wechselwirkungen untersuchen, um zu sehen, ob das Sättigungsfeld vielleicht auch in der Simulation bei hinreichend starken Wechselwirkungen verschwindet. Selbst wenn die Verstärkung der Leitfähigkeit, die Abb. III.F.11 zeigt, nicht für die bisherigen Experimente zum Metall-Isolator-Übergang in zweidimensionalen Halbleiter-Bauelementen relevant ist, sollte sie für Doppel-Gate Bauelemente gelten, bei denen der langreichweitige Anteil der Elektron-Elektron-Wechselwirkungen abgeschirmt ist. Dadurch könnten diese Bauelemente eine höhere Leitfähigkeit haben als mit nur einem Gate.

#### III.F.7. Diskussion nachfolgender Arbeiten

Das Hauptergebnis unserer Simulationen [BERKOVITSetal-01, KANTELHARDTetal-01, BERKOVITS&KANTELHARDT-02a, BERKOVITS&KANTELHARDT-02b] von wechselwirkenden Elektronen in ungeordneten, kleinen, zweidimensionalen Systemen ist, dass auch bei Berücksichtigung des Spin-Freiheitsgrads die Behandlung ohne störungstheoretische Näherungen nicht zu einer metallischen Phase und einem Metall-Isolator-Übergang führt. Zwar kann die (kurzreichweitige) Hubbard-Wechselwirkung eine gewisse graduelle Erhöhung der Leitfähigkeit bewirken, aber die (langreichweitige) Coulomb-Wechselwirkung verstärkt stets die Lokalisierung und überwiegt im relevanten Parameterbereich. Das Verhalten des Magnetowiderstands und seine Sättigung sind hingegen konsistent mit experimentellen Ergebnissen.

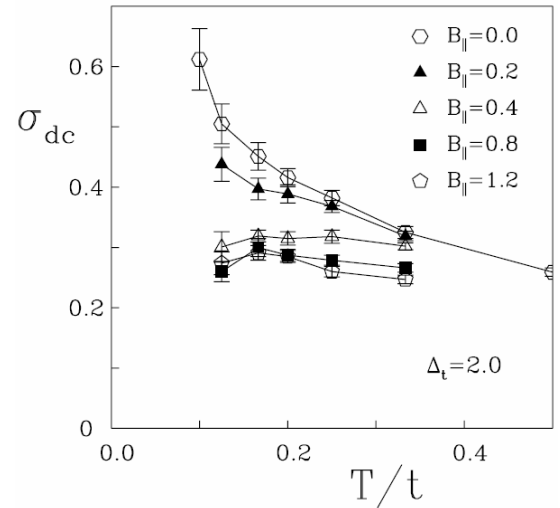
Ausgehend von dem gleichen Modell ohne äußeres Magnetfeld wurde kürzlich mit Hartree-Fock-Näherung ein effektiver Ein-Teilchen Hamilton-Operator aufgestellt und die spontane Spin-Magnetisierung untersucht [NITAetal-04]; dabei konnten Systeme bis zur Größe  $9 \times 10$  betrachtet

werden. Das Ergebnis war, dass die spontane Magnetisierung mit zunehmender Anderson-Unordnung und zunehmender Wechselwirkungsstärke ansteigt und ein ferromagnetischer Zustand erreicht werden kann. Eine mit unserer Tunnelamplitude verwandte Größe haben [SRINIVASAN*etal*-03] untersucht, indem sie die Ladungsverteilungen in den Grundzuständen mit  $N$  und  $N + 1$  Elektronen mit der Projektions-Quanten-Monte-Carlo-Methode berechnet und verglichen haben. Allerdings verwendeten sie nur kurzreichweitige Elektron-Elektron-Wechselwirkungen. Für bis zu 25 Teilchen auf Gittern mit bis zu  $6 \times 8$  Plätzen zeigten ihre Simulationen deutlich den delokalisierenden Einfluss der Hubbard-Wechselwirkung. Trotzdem konnten sich die Autoren nicht zu einer Aussage pro oder kontra die Existenz eines Metall-Isolator-Übergangs in ihren Systemen durchringen.

Die Magnetoleitfähigkeit in einem Hubbard-Modell mit ebenfalls ausschließlich kurzreichweitiger Wechselwirkung wurde kürzlich mit temperaturabhängigen Quanten-Monte-Carlo Simulationen auf einem  $8 \times 8$ -Gitter untersucht, indem die Leitfähigkeit aus dem Fluktuations-Dissipations-Theorem berechnet wurde [DENTENEER&SCALETAR-03]. Die in Abb. III.F.16 gezeigten Resultate wurden als Anzeichen für einen Metall-Isolator-Übergang in Abhängigkeit vom parallelen Magnetfeld interpretiert, wobei die metallische Phase für kleine Felder auftritt und mit einer nicht vollständigen Spin-Polarisierung einhergeht. Zu einem ähnlichen Ergebnis kommen [GOLDSTEIN&BERKOVITS-03] mit analytischen und numerischen, auf der Zufallsmatrix-Theorie basierenden Betrachtungen. Dies ist auch in Übereinstimmung mit neusten experimentellen Ergebnissen zur Magnetoleitfähigkeit von  $p$ -dotierten GaAs-Doppel-Quanten-Wellen, in denen zwei zweidimensionale (Löcher-) Ladungsträger-Schichten übereinander angeordnet sind [PILLARISSETTY*etal*-03].

Weitere neue experimentelle Ergebnisse deuten darauf hin, dass der Metall-Isolator-Übergang in den zweidimensionalen Systemen möglicherweise nicht wesentlich von der Unordnung bestimmt ist. In Silizium-Bauelementen mit geringer Unordnung erfolgt der Übergang immer ungefähr bei der kritischen Ladungsträgerdichte  $n_c \approx 9 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  (siehe auch Abschnitt III.A.1), und nur für stärker ungeordnete Proben erhöht sich dieser Wert [KRAVCHENKO&SARACHIK-04]. Analogiebetrachtungen zwischen einem Flüssigkeits-Kristall-Übergang in der Tieftemperaturphysik von  $^3\text{He}$  und dem Metall-Isolator-Übergang in den zweidimensionalen Halbleitersystemen [SPIVAK-01, SPIVAK-03] passen gut hierzu, weil darin bisher die Unordnung außer Acht gelassen wurde. Dabei entspricht die „metallische“ Phase der zweidimensionalen Halbleitersysteme einem gemischten Zustand aus einer Fermi-Flüssigkeit und einem Wigner-Kristall, der entsteht, weil der Phasenübergang erster Ordnung ist [SPIVAK-03].

Schließlich gibt es neue, meiner Ansicht nach für die Interpretation der in diesem Kapitel beschriebenen Simulationen wesentliche, experimentelle Ergebnisse zur Natur des Phasenübergangs. Abbildung III.F.17 zeigt die Veränderung der effektiven Elektronenmasse  $m^*$  und des  $g$ -Faktors durch Vielteilchen-Effekte für Elektronen in Silizium-MOSFETs im Bereich metallischer Ladungsträgerdichten. Die Werte wurden unter Verwendung einer Theorie von [ZALA*etal*-01] aus Messungen der Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit gewonnen [SHASHKIN*etal*-02, KRAVCHENKO&SARACHIK-04]. Man erkennt, dass das Verhältnis der effektiven Vielteilchen-Masse  $m^*$  zur effektiven Einzel-



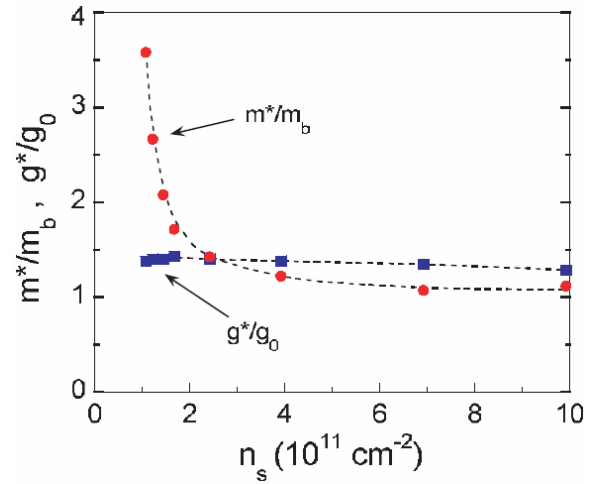
**Abb. III.F.16:** Temperaturabhängigkeit der dimensionslosen Leitfähigkeit aus Quanten-Monte-Carlo Simulationen eines Hubbard-Modells; Daten für 16 Konfigurationen und ein  $8 \times 8$ -Gitter. Für parallele Magnetfelder  $B_{||} \leq 0.2$  erkennt man metallisches Verhalten (aus [DENTENEER&SCALETAR-03]).

Elektronenmassen  $m_b$  in Silizium im metallischen Bereich mit hohen Ladungsträgerdichten  $n_s$  nahe 1 ist, aber in der Nähe des Metall-Isolator-Übergangs bei  $n_c \approx 9 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  sehr groß wird und möglicherweise sogar divergiert, während der  $g$ -Faktor konstant bleibt. Die Ergebnisse wurden kürzlich durch eine unabhängige Bestimmung der effektiven Massen aus Messungen der Temperaturabhängigkeit von Shubnikov-de-Haas Oszillationen bestätigt [SHASHKINetal-03a, SHASHKINetal-03b]; eine weitere unabhängige Bestätigung ergibt sich aus der Magneto-Kapazitäts-Spektroskopie [KHRAPAIetal-03]. Ein anderes Ergebnis, nämlich einen gleichzeitigen Anstieg von  $m^*$  und  $g$  auf endliche Werte, berichten nur [PUDALOVetal-02]; Messungen an GaAs wurden noch nicht veröffentlicht.

Der Grund für die Bedeutung dieser Messergebnisse ist, dass die Erhöhung  $m^*/m_b$  der effektiven

Masse als zusätzlicher Faktor in den Zusammenhang zwischen der Ladungsträgerdichte  $n_s$  und dem Parameter  $r_s$ , Gl. (III.A.1), eingeht. Aus diesem Grund entspricht  $n_c \approx 9 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  beim Metall-Isolator-Übergang für die Silizium-Bauelemente tatsächlich nicht  $r_s \approx 18$ , sondern einem vielfach höheren, möglicherweise divergierenden Wert von  $r_s$ . Darum kann man inzwischen nicht mehr sagen, dass der Metall-Isolator-Übergang im Bereich  $r_s \approx 4$  bis 20 erfolgt. Praktisch würden die Ergebnisse zu  $m^*/m_b$  bedeuten, dass die relative Stärke  $r_s$  der Elektron-Elektron-Wechselwirkung am Metall-Isolator-Übergang extrem groß wird oder sogar divergiert. Aus dieser Perspektive ist klar, dass Simulationen mit einer endlichen Hubbard- und Coulomb-Wechselwirkung diesen Übergang nicht zeigen können. In die für die Simulationen in diesem Kapitel verwendete Gleichung (III.F.1) geht der Faktor  $m^*/m_b$  nicht ein.

Die neuen experimentellen Ergebnisse könnten daher bedeuten, dass die „metallische“ Phase der zweidimensionalen Elektronensysteme in Wirklichkeit eher dem normalen, bei geringer Unordnung und kleinen Systemen nur sehr schwach lokalisierten (quasi ausgedehnten) Zustand entspricht. Die Verringerung der Leitfähigkeit in der Isolator-Phase wäre dann nicht durch unordnungsbedingte Quanten-Lokalisierung (Anderson-Lokalisierung) verursacht, sondern durch einen anderen Effekt, der mit extrem starken Elektron-Elektron-Wechselwirkungen in Zusammenhang steht. Dann wäre auch verständlich, warum unsere Simulationen das Verhalten des Magnetowiderstands im „metallischen“ Bereich ungefähr beschreiben, obwohl sie andererseits keine metallischen Zustände und keinen Phasenübergang reproduzieren können.



**Abb. III.F.17:** Veränderungen der effektiven Elektronenmasse  $m^*$  und des  $g$ -Faktors durch Vielteilchen-Effekte für Elektronen in Silizium-MOSFETs im Bereich metallischer Ladungsträgerdichten  $n_s$ , bestimmt aus Messungen der Temperaturabhängigkeit von Leitfähigkeit und Magnetowiderstand (aus [SHASHKINetal-02]).

### **III.G. Lokalisierungsübergänge in Quantenpunkten mit Drähten**

Nachdem die vorherigen Kapitel hauptsächlich zweidimensionale homogene Systeme (dünne Ladungsträger-Schichten) zum Thema hatten, soll es nun um (quasi-) null- und eindimensionale Systeme gehen, die in Wechselwirkung miteinander treten. Für die Nano-Technologie ist ein verbessertes Verständnis dieser kleinen Systeme wesentlich, bei denen Quanteneffekte die Transportprozesse wesentlich bestimmen, und die beispielsweise für Einzel-Elektronen-Transistoren eingesetzt werden [KASTNER-92]. Quantenpunkte sind weitgehend isolierte (nur schwach mit der Außenwelt gekoppelte) Cluster von gleichen Atomen (oder Atomgruppen) innerhalb oder auf der Oberfläche von Festkörpern. Der wesentliche Aspekt ist dabei, dass es in den Quantenpunkten kein kontinuierliches Band von elektronischen Zuständen gibt, sondern dass einzelne Energieniveaus aufgelöst werden können. In diesem Sinne kann man die Quantenpunkte auch als künstliche Atome mit nahe beieinander liegenden Niveaus auffassen. Im Gegensatz zu atomaren Niveaus ist die Lage der Quantenpunkt-Niveaus empfindlich von der genauen Anordnung der Atome und auch von der Umgebung abhängig, so dass eine exakte Berechnung wie in der Atomphysik nicht möglich ist. Stattdessen kann man die statistischen Eigenschaften der Niveau-Spektren von Quantenpunkten gut mit der Zufallsmatrix-Theorie beschreiben, die schon in den 60er Jahren bei der Beschreibung der Niveaus von Atomkernen erfolgreich war (siehe Abschnitt III.C.2).

Die konkrete Fragestellung in diesem Kapitel ist, wie sich die Niveaus eines Quantenpunkts verändern, wenn dieser in Kontakt mit sehr dünnen (quasi-eindimensionalen) Zuleitungen gebracht wird. Dabei werden wir einerseits die Frage nach einer Veränderung der Anzahl der Quantenpunkt-Niveaus klären [BERKOVITS*etal*-04] und dann auch auf Veränderungen in der Niveaustatistik und Übergänge zwischen den verschiedenen Universalitätsklassen eingehen (bisher nicht publiziert).

#### **III.G.1. Einführung und Modell für Quantenpunkte mit Drähten**

Es ist gut bekannt, dass sich die Anzahl von Elektronen in einem schwach gekoppelten Quantenpunkt bei hinreichend tiefen Temperaturen in diskreten Sprüngen in Abhängigkeit vom chemischen Potenzial ändert. Dies ist die Basis für die Anwendung der Quantenpunkte in Ein-Elektronen-Transistoren [KASTNER-92]. Solange die Kopplung an die externen Zuleitungen (Drähte) schwach ist, kann sie störungstheoretisch behandelt werden und führt zu einer Verbreiterung  $\Gamma = \pi N v |V|^2$  der diskreten Zustände im Quantenpunkt, d.h. durch die Kopplung an die Drähte werden aus den einzelnen Zuständen schmale Bänder der Breite  $\Gamma$ . Hier bezeichnet  $v$  die Zustandsdichte in den Drähten,  $N$  die Anzahl der Drähte und  $V$  das (kleine) Kopplungs-Matrixelement zwischen einem typischen Zustand im Quantenpunkt und einem typischen Zustand in den Drähten. Normalerweise erwartet man, dass die diskrete Struktur der Energieniveaus im Quantenpunkt verloren geht, wenn  $\Gamma$  größer wird als der typische Niveau-Abstand  $\Delta$  im Quantenpunkt. Das entspricht dem Kriterium, dass die dimensionslose Leitfähigkeit durch den Quantenpunkt,  $g = \Gamma/\Delta$ , größer als 1 wird [MATVEEV-95]. Dann sollte auch das Phänomen der Coulomb-Blockade keine Rolle mehr spielen. Die Coulomb-Blockade wird durch die Coulomb-Wechselwirkung der Elektronen im Quantenpunkt verursacht [ALEINER*etal*-02] und sorgt bei schwach gekoppelten Quantenpunkten dafür, dass die Energie für das Hinzufügen eines weiteren Elektrons nicht ungefähr  $\Delta$ , sondern  $\Delta + e^2/C$  beträgt, wobei  $C$  die Kapazität des Quantenpunkts bezeichnet [ALHASSID-00].

Während es also unumstritten ist, dass der Quantenpunkt für  $g = \Gamma/\Delta \ll 1$  diskrete Energieniveaus aufweist, gibt es für den anderen Extremfall  $g \gg 1$  nur wenige Untersuchungen, die kein klares Bild geben. Man kann aufgrund des Dicke-Effekts, der Beobachtung, dass neue scharfe Resonanzen auftreten, wenn Atome sehr stark an ein Strahlungsfeld koppeln [DICKE-53, DICKE-54, SHAHBAZIAN&ULLOA-98], vermuten, dass es auch bei stark an Drähte gekoppelten Quantenpunkten (möglicherweise andere) scharfe Niveaus geben sollte. Tatsächlich wurde eine solche Resonanz

### III.G. Lokalisierungsübergänge in Quantenpunkten mit Drähten

auch für einen Quantenpunkt mit ursprünglich zwei Niveaus beobachtet, der stark an einen [KÖNIG-*etal*-98] bzw. zwei Drähte [SHAHBAZYAN&RAIKH-94] gekoppelt ist. Bei zwei Drähten scheint das Verhalten von den Werten der Kopplungs-Matrixelemente  $V_{k,i}$  zwischen dem  $i$ -ten Quantenpunkts-Zustand und dem  $k$ -ten Draht abzuhängen, wobei eine Resonanz nur auftritt, wenn keines der vier Elemente ein umgedrehtes Vorzeichen hat [SILVA*etal*-02]. Weiterhin wurde für einen Quantenpunkt mit ursprünglich  $N_{\text{QP}}$  Zuständen gezeigt, dass bei starker Ankopplung eines Drahts genau  $N_{\text{QP}} - 1$  diskrete Niveaus verbleiben [PASCAUD&MONTAMBAUX-99].

Die beschriebenen Ergebnisse für einige Spezialfälle sollen hier durch eine generelle Regel verallgemeinert und zusammengefasst werden. Dazu betrachten wir ein System aus einem Quantenpunkt mit ursprünglich  $N_{\text{QP}}$  Zuständen, der an  $N$  Drähte gekoppelt ist,

$$H = H_{\text{QP}} + \sum_{k=1}^N (H_{\text{Draht}}^k + H_{\text{Kopplung}}^k). \quad (\text{III.G.1})$$

Der Hamilton-Operator des Quantenpunkts,

$$H_{\text{QP}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{QP}}} (\epsilon_i - \mu) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + U \sum_{i=1}^{N_{\text{QP}}} \sum_{j=i+1}^{N_{\text{QP}}} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j, \quad (\text{III.G.2})$$

entspricht einem erweiterten Anderson-Modell mit Elektron-Elektron-Wechselwirkung  $U$  (vgl. Glgn. (III.B.13) und (III.B.14)), geschrieben mit Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $\hat{a}_i^\dagger$  und  $\hat{a}_i$  für die Quantenpunkt-Zustände. Zusätzlich tritt hier das chemische Potenzial  $\mu$  auf, weil das System nicht abgeschlossen ist und die Teilchenzahl, d.h. die Anzahl der besetzten Zustände im Quantenpunkt, nicht fest ist, sondern durch ein an die Drähte angelegtes äußeres Potenzial variiert werden soll. Der Unterschied zum normalen Anderson-Modell entspricht etwa dem Unterschied zwischen einem großkanonischen und einem kanonischen Ensemble in der Statistischen Physik. Weiter im Gegensatz zum üblichen Anderson-Modell bezeichnen die  $\epsilon_i$  hier nicht die lokalen Potentiale einzelner Atome, sondern die Eigenenergien des Quantenpunkts. Die mit den Operatoren  $\hat{a}_i^\dagger$  und  $\hat{a}_i$  verbundenen Zustände sind hier schon die Eigenzustände des Quantenpunkts; darum sind keine Nichtdiagonalterme in  $H_{\text{QP}}$  nötig. Der Grund für diesen Ansatz ist, dass es auf die räumliche Struktur des Quantenpunkts nicht ankommt. Praktisch erhält man die Energieniveaus  $\epsilon_i$  für Simulationen als Eigenwerte einer Zufallsmatrix aus dem passenden Ensemble (siehe Abschnitt III.C.2 für die Zufallsmatrix-Theorie). Die Wechselwirkung  $U$  koppelt alle Quantenpunkt-Niveaus in gleicher Weise – es gibt keine „Abstände“ innerhalb des Quantenpunkts – und sie entspricht direkt der Coulomb-Blockade-Energie,  $U = e^2/C$ .

Die Hamilton-Operatoren der einseitig unendlichen Drähte,

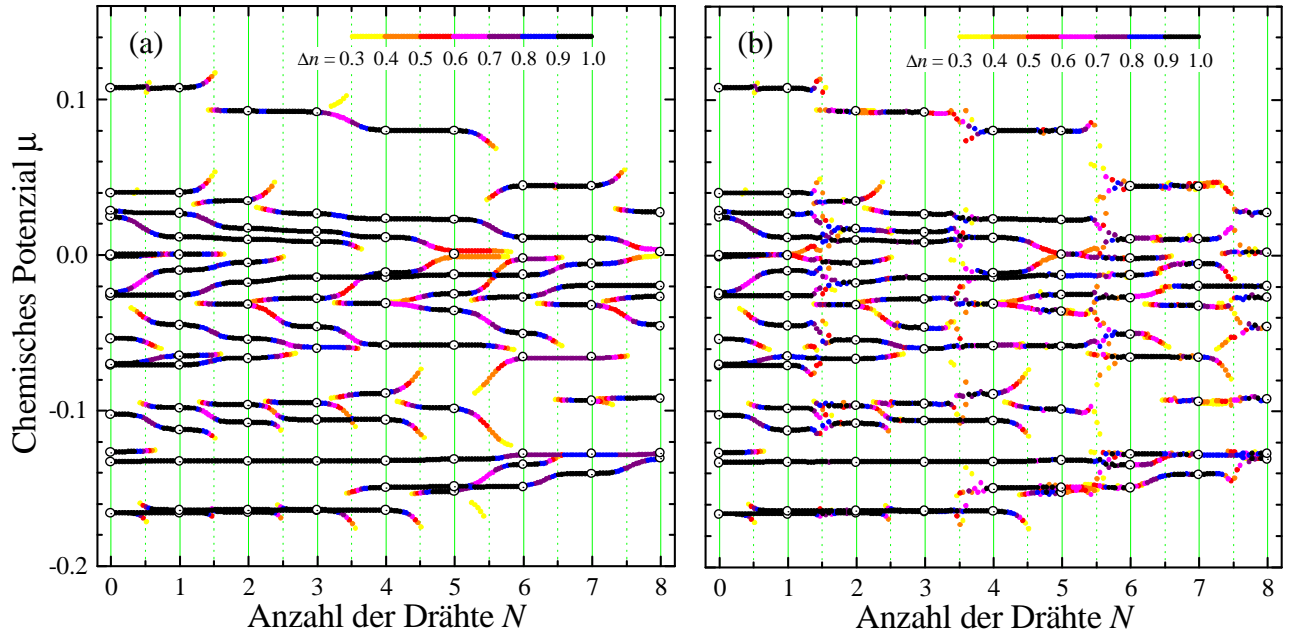
$$H_{\text{Draht}}^k = \mu \sum_{j=1}^{\infty} (c_j^k)^\dagger c_j^k - t \sum_{j=1}^{\infty} [(c_j^k)^\dagger c_{j+1}^k + (c_{j+1}^k)^\dagger c_j^k], \quad (\text{III.G.3})$$

entsprechen dem normalen Tight-Binding Hamilton-Operator ohne Unordnung in den Diagonal- oder Nichtdiagonalelementen. Man beachte, dass die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren  $(\hat{c}_j^k)^\dagger$  und  $\hat{c}_j^k$  sich hier auf atomare Zustände im  $j$ -ten Atom vom  $k$ -ten Draht beziehen. Die Nichtdiagonalelemente werden wieder auf  $t = 1$  gesetzt, um die Energieeinheit festzulegen. Die Kopplung zwischen dem Quantenpunkt und den Drähten ist schließlich in

$$H_{\text{Kopplung}}^k = \sum_{i=1}^{N_{\text{QP}}} V_{k,i} \hat{a}_i^\dagger \hat{c}_1^k + V_{k,i} (\hat{c}_1^k)^\dagger \hat{a}_i \quad (\text{III.G.4})$$

enthalten, wobei das Ende des Drahts ( $j = 1$ ) über die Kopplungs-Matrixelemente  $V_{k,i}$  an alle Quantenpunktszustände koppelt. Die  $N$  Drähte können zusätzlich auch noch durch transversale Nichtdiagonalelemente,  $\sum_{k=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{\infty} (c_j^k)^\dagger c_j^{k+1} + (c_j^{k+1})^\dagger c_j^k$ , gekoppelt werden, so dass sie dann zusammen breitere Drähte mit mehr als einem Leitfähigkeits-Kanal ergeben.





**Abb. III.G.1:** Zustandsdynamik in einem Quantenpunkt, an den (a) einzelne Drähte bzw. (b) ein breiter (quasi-zweidimensionaler) Draht angekoppelt werden. Die Zuwächse  $\Delta n(\mu, N)$  der Besetzung des Quantenpunkts mit  $N_{\text{QP}} = 16$  ursprünglichen Zuständen ist in Abhängigkeit vom chemischen Potenzial  $\mu$  und von der Anzahl bzw. Breite  $N$  der Drähte dargestellt. Die Stärke der auftretenden Zuwächse ist farbkodiert (siehe Balken). Nicht-ganzzahlige Werte von  $N$  entsprechen  $[N]$  vollständig gekoppelten Drähten bzw. Kanälen und einem zusätzlichen, schwächer gekoppelten Draht bzw. Kanal. Der Anstieg der Kopplungsstärke des zusätzlichen Drahts bzw. Kanals erfolgt logarithmisch. Die Länge der Drähte ist  $M = 100 \gg N_{\text{QP}}$ , so dass deren Zustände hinreichend dicht liegen. Die Kreise zeigen die Eigenwerte des vereinfachten Systems, bei dem die Drähte durch einzelne Gitterpunkte ersetzt sind, und entsprechen dem Grenzfall unendlicher Kopplungsstärke (nach [BERKOVITSetal-04]).

### III.G.2. Zustandsdynamik in Quantenpunkten ohne Coulomb-Wechselwirkung

Als erstes soll das Modell ohne Coulomb-Wechselwirkung im Quantenpunkt ( $U = 0$ ) betrachtet werden, in dem numerische Simulationen durch eine exakte Diagonalisierung der Matrizen des Hamilton-Operators (III.G.1) einfach sind. Zwar kann man damit keine wirklich unendlich ausgehenden Drähte betrachten, aber solange die Zustands-Verbreiterung  $\Gamma$  im Quantenpunkt viel größer ist als der Abstand der Energieniveaus in den Drähten, ist die Beschreibung trotzdem hinreichend genau. Die Diagonalisierung liefert die Eigenwerte  $E_m$  und die Eigenzustände  $|m\rangle$  des Systems aus Quantenpunkt und Drähten. Da eine Veränderung des chemischen Potenzials  $\mu$  einer Verschiebung des Energienullpunkts entspricht, muss diese Berechnung nur für  $\mu = 0$  durchgeführt werden. Die Eigenwerte für  $\mu \neq 0$  sind dann  $E_m - \mu$  und die Eigenzustände bleiben unverändert. Die Anzahl der Elektronen auf dem Quantenpunkt für ein gegebenes chemisches Potenzial  $\mu$  beträgt

$$n(\mu) = \sum_{m=1}^{E_m < \mu} \sum_{i=1}^{N_{\text{QP}}} \left| \langle m | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i | m \rangle \right|^2. \quad (\text{III.G.5})$$

Zustände, die nur auf den Drähten einen wesentlichen Anteil haben, tragen zu  $n(\mu)$  nicht bei, denn es werden nur die Quantenpunkt-Niveaus berücksichtigt. Abbildung III.G.1(a) zeigt – in Abhängigkeit von  $\mu$  und der Anzahl  $N$  der gekoppelten eindimensionalen Drähte – die diskreten Zuwächse

$$\Delta n(\mu, N) = \int_{\mu-0.001}^{\mu+0.001} \frac{dn(\mu')}{d\mu'} d\mu' \quad (\text{III.G.6})$$

in der Besetzung eines ungeordneten Quantenpunkts mit  $N_{\text{QP}} = 16$  ursprünglichen Zuständen, die als Eigenwerte einer Zufallsmatrix mit Gauß-verteilten Elementen mit der Verteilungsbreite  $w = 0.1$  erzeugt wurden. Ohne Drähte ( $N = 0$ ) treten alle Zuwächse  $\Delta n(\mu, N) > 0$  bei den ursprünglichen Eigenniveaus des Quantenpunkts auf, d.h. für  $\mu = E_m = \epsilon_i$  mit passenden Indizes  $m$  und  $i$ . Die ganzzahligen Punkte auf der  $N$ -Achse in Abb. III.G.1(a) entsprechen exakt  $N$  Drähten, deren Kopplungs-Matrixelemente  $V_{k,i}$  Gauß-verteilt sind mit Mittelwert 0 und Varianz 1. Die nicht-ganzzahligen Werte von  $N$  entsprechen logarithmisch anwachsenden Werten der Kopplungskonstanten  $V_{[N]+1,i}$  für einen zusätzlichen,  $[N]+1$ -ten Draht, der erst bei der nächsten ganzen Zahl  $N$  voll verbunden ist. Für  $N - [N]$  zwischen 0.04 und 1 steigen die  $V_{[N]+1,i}$  dabei von 0.007 bis auf die vollen Werte mit Varianz 1. So kann man erkennen, wie sich die Anzahl und Lage der Zustände im Quantenpunkt mit zunehmender Anzahl von Drähten dynamisch verändert; in diesem Sinne zeigt Abb. III.G.1 die „Zustandsdynamik“ des Quantenpunkts. Es werden nur Zuwächse  $\Delta n > 0.3$  gezeigt, damit die viel zahlreicheren Zustände mit Aufenthaltswahrscheinlichkeit primär in den Drähten das Bild nicht stören.

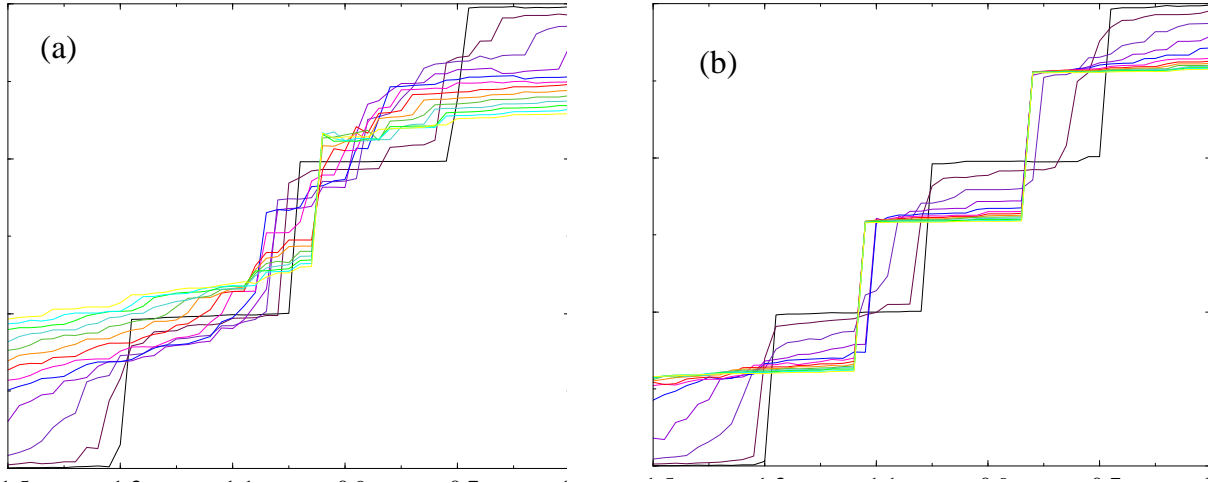
Für ganzzahlige  $N$  erkennt man klar, dass  $N_{\text{QP}} - N$  Sprünge auftreten in der Besetzung des Quantenpunkts, entsprechend der Anzahl von  $N_{\text{QP}} - N$  gebundenen Niveaus im Quantenpunkt bei  $N$  Drähten. Mit zunehmender Ankopplung eines weiteren Drahts verändern sich diese Quantenpunkt-Niveaus kontinuierlich, bis – für eine mittlere Kopplungsstärke – eine größere Veränderung eintritt, sich einige Zustände teilen und einige verschwinden. Für stärkere Kopplung des zusätzlichen Drahts, d.h. nah an dem nächsten ganzzahligen Wert von  $N$ , taucht die eindeutige Struktur der Niveaus wieder auf, aber mit anderen Energiewerten und einem Zustand weniger als vorher.

Die Kreise bei den ganzzahligen Werten von  $N$  in Abb. III.G.1 zeigen die Niveaus, die im Grenzfall sehr starker Kopplung auftreten. Dafür können die eindimensionalen Drähte durch einzelne Gitterplätze mit lokalem Potenzial 0 und sehr großer Kopplung  $V_{k,i}$  an alle Quantenpunkt-Zustände ersetzt werden. Jeder zusätzliche, auf diese Weise stark angekoppelte Platz führt zu zwei Eigenwerten, die nicht im Bereich der Quantenpunkt-Zustände liegen und die zu an diesem Platz lokalisierten – und damit nicht auf dem Quantenpunkt gebundenen – Zuständen gehören. Damit wird durch jeden solchen Platz ein Niveau des Quantenpunkts eliminiert; das Hinzufügen eines Platzes erhöht die Gesamtanzahl der Eigenwerte nur um 1.

Wie Abb. III.G.1(b) zeigt, beobachten wir praktisch das gleiche Verhalten wenn zwischen den  $N$  Drähten eine zusätzliche transversale Kopplung eingeführt ist, d.h. es sich nicht um getrennte Drähte handelt, sondern um einen breiteren (quasi-zweidimensionalen) Draht mit  $N$  Leitfähigkeits-Kanälen (dimensionslose Leitfähigkeit  $g = N$ ). Der einzige Unterschied ist, dass das Erweitern des quasi-zweidimensionalen Drahts größere Schwankungen der Zustände mit sich bringt als das Hinzufügen eines getrennten Drahts. Offensichtlich kommt es für die Verringerung der Anzahl von im Quantenpunkt gebundenen Niveaus nicht auf die Anzahl der Drähte, sondern vielmehr auf deren dimensionslose Leitfähigkeit  $g$  an. Die Anzahl der verbleibenden Zustände beträgt  $N_{\text{QP}} - g$ .

Wichtig für dieses Ergebnis ist allerdings, dass die Kopplungs-Matrixelemente  $V_{k,i}$  nicht gleich sind. Sobald zwei Drähte  $k$  und  $k'$  mit gleichen Kopplungskonstanten verbunden werden,  $V_{k,i} = V_{k',i}$  für alle Quantenpunkt-Zustände  $i$ , sind diese beiden Drähte keine unabhängigen Kanäle mehr und sie können die Anzahl der gebundenen Niveaus im Quantenpunkt nur noch um 1 verringern. Wie Abb. III.G.3 zeigt, kommt es beim Hinzufügen von Drähten mit gleichen Kopplungskonstanten  $V_{k,i} = V_{k',i}$  nur einmal zu einer Verschiebung der im Quantenpunkt gebundenen Energieniveaus und die Anzahl wird insgesamt nur um 1 reduziert.

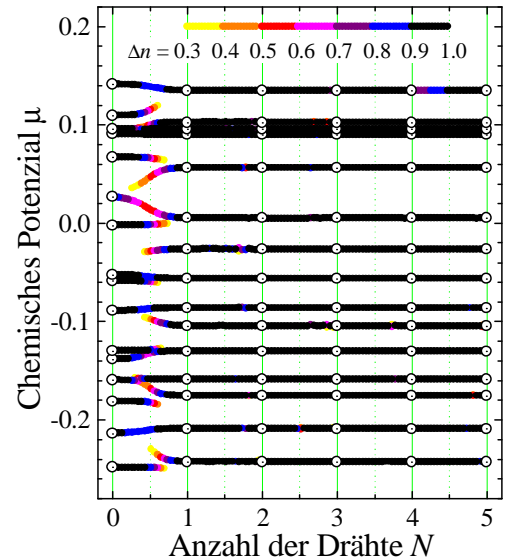
### III.G.3. Simulation unter Berücksichtigung der Coulomb-Wechselwirkung



**Abb. III.G.2:** Besetzung eines Quantenpunkts mit drei schwach wechselwirkenden Zuständen, an den zwei Drähte mit zunehmender Stärke angekoppelt werden. Die gebundenen Niveaus im Quantenpunkt zeigen sich als Sprünge in der Besetzungszahl  $n$  bei Veränderung des chemischen Potenzials  $\mu$ . Die Quantenpunkt-Zustände sind  $\varepsilon_1 = -1.1$ ,  $\varepsilon_2 = -1.2$  und  $\varepsilon_3 = -1.3$ , die Wechselwirkungsstärke beträgt  $U = 0.2$  und die Kopplungs-Matrixelemente lauten für (a)  $V_{1,1} = 0.01p$ ,  $V_{1,2} = 0.09p$ ,  $V_{1,3} = 0.01p$ ,  $V_{2,1} = 0.09p$ ,  $V_{2,2} = 0.01p$  und  $V_{2,3} = 0.01p$ , sowie für (b) einheitlich  $V = 0.05p$ , wobei  $p = 0$  (schwarz),  $1$  (violett), ...,  $6$  (rot), ...,  $11$  (hellblau),  $12$  (gelb) den verschiedenen Kurven entsprechen (aus [BERKOVITSetal-04]).

Wenn entsprechend Gl. (III.G.2) zusätzlich eine repulsive Wechselwirkung zwischen den Zuständen im Quantenpunkt berücksichtigt wird, müssen wieder Vielteilchen-Zustände berechnet werden. Daher ist die erreichbare Systemgröße stärker beschränkt. Trotzdem müssen die Drähte weiterhin so lang gemacht werden, dass ihr Spektrum im Vergleich mit den Quantenpunktniveaus kontinuierlich erscheint. Darum betrachten wir hier numerisch nur Quantenpunkte mit drei Niveaus. Die Frage ist, ob sich durch die Vielteilchen-Wechselwirkungen etwas an den Ergebnissen für die Anzahl der Niveaus im Quantenpunkt ändert, oder ob nur der bekannte Coulomb-Blockade-Effekt [ALHASSID-00] hinzukommt.

Abbildung III.G.2 zeigt die Simulationsergebnisse für einen Quantenpunkt mit  $N_{QP} = 3$  schwach ( $U = 0.2$ ) wechselwirkenden Zuständen und  $N = 2$  Drähten, deren Ankopplung  $V_{k,i}$  schrittweise erhöht wird. Man erkennt in Abb. III.G.2(a), dass bei sehr schwach angekoppelten Drähten drei diskrete Stufen in der Quantenpunkt-Besetzung  $n$  als Funktion des chemischen Potenzials  $\mu$  auftreten, die den drei Niveaus  $\varepsilon_i$  entsprechen. Bei stark angekoppelten Drähten gibt es hingegen nur noch eine einzige deutliche Stufe – wie im Fall der nicht-wechselwirkenden Quantenpunkt-Zustände wird durch die zwei eindimensionalen Drähte die Zahl der gebundenen Zustände um zwei reduziert auf  $N_{QP} - g = 1$ . Wenn allerdings beide Drähte mit gleichen Kopplungs-Matrixelementen angekoppelt sind (Abb. III.G.2(b)), gibt es auch bei starker Kopplung noch zwei gebundene Niveaus im Quantenpunkt. Der Abstand dieser beiden Niveaus beträgt  $\Delta + U$  anstelle von dem normalen Niveaub-



**Abb. III.G.3:** Zustandsdynamik in einem Quantenpunkt, an den einzelne Drähte mit gleichen Kopplungs-Matrixelementen  $V_{k,i} = V$  angekoppelt werden; siehe Abb. III.G.1 für aufgetragene Größen und Parameter.

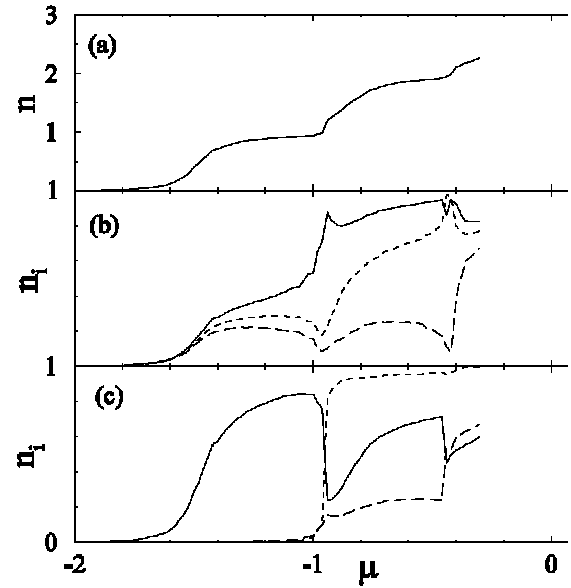
stand  $\Delta$  (siehe Abschnitt III.G.1), womit auch das Auftreten der Coulomb-Blockade demonstriert ist. Damit ist gezeigt, dass Wechselwirkungen in dem Quantenpunkt keine qualitativen Veränderungen verursachen, solange sie hinreichend klein sind. Ein ähnliches Verhalten wurde kürzlich bei einem Kondo-System gesehen [LEBANONetal-03].

Das Verhalten der Quantenpunkte ändert sich allerdings bei sehr starker Wechselwirkung zwischen den Zuständen,  $U \gg \pi v N_{\text{QP}} V^2$ , wobei  $V^2$  die Varianz der Kopplungs-Matrixelemente  $V_{k,i}$  bezeichnet. Dann überwiegt der Coulomb-Blockade-Effekt selbst bei einer starken Ankopplung der Drähte. Abbildung III.G.4(a) zeigt, dass nun wieder  $N_{\text{QP}}$  statt  $N_{\text{QP}} - g$  Stufen in der Besetzung  $n$  des Quantenpunkts in Abhängigkeit vom chemischen Potenzial  $\mu$  auftreten. Die Breite dieser Coulomb-Blockade-Stufen ist sehr groß im Vergleich zur Stufenbreite ohne Coulomb-Wechselwirkung. Abbildung III.G.4(b) zeigt, dass diese Stufen einer gleichzeitig und kontinuierlich ansteigenden Besetzung der drei ursprünglichen Quantenpunkt-Niveaus mit  $n_1$ ,  $n_2$  und  $n_3$  entsprechen. Daher sind diese ursprünglichen Zustände keine gute Basis zur Darstellung des Besetzungsprozesses. Verwendet man stattdessen die Zustände im Grenzfalle einer starken Kopplung als Basis (siehe Abb. III.G.4(c)), so erkennt man eine oszillierende Besetzung  $n_1'$  des einzigen, im Quantenpunkt ohne Wechselwirkung noch gebundenen Zustands (durchgezogene Linie).

An den Sprungstellen der gesamten Besetzungszahl

$n = n_1 + n_2 + n_3 = n_1' + n_2' + n_3'$  erfolgt eine Übertragung der Besetzung auf andere Zustände ( $n_2'$  und  $n_3'$ ), so dass sich für höhere  $\mu$  wieder ein Anstieg der Besetzung  $n_1'$  des einzigen, im Quantenpunkt ohne Wechselwirkung noch gebundenen, Zustands anschließen kann. Ein ähnlicher Mechanismus, bei dem ein Zustand in einem Quantenpunkt für mehrere Niveaus verantwortlich ist, wurde kürzlich in einem anderen Zusammenhang betrachtet [SILVESTROV&IMRY-00].

Die Frage ist nun, wie die einfache Vorstellung und die analytischen Rechnungen [MATVEEV-95, ALEINERetal-02], nach denen ein gut angekoppelter Quantenpunkt keine gebundenen Zustände hat, sich mit diesen numerischen Ergebnissen vereinbaren lassen. Dazu betrachten wir in einem Gedankenexperiment einen Abschnitt aus  $N_{\text{QP}}$  Gitterplätzen eines ungestörten (eindimensionalen) Quanten-Drahts als „Quantenpunkt mit zwei angekoppelten Drähten“. Ohne Ankopplung sind die Eigenwerte dieses „Quantenpunkts“  $E_j = -2 \cos(2\pi j/N_{\text{QP}})$  und die Eigenvektoren  $\sin(2\pi jx/N_{\text{QP}})/(N_{\text{QP}})^{1/2}$ , wobei  $x$  der Gitterplatz-Index ist und  $j$  die Eigenwerte und -funktionen nummeriert. Ohne eine Barriere, also wenn der letzte Platz des Quantenpunkts mit einem Nichtdiagonalelement von 1 an den ersten Platz des Drahts angebunden ist, sind die „Quantenpunkt-Zustände“ im Durchschnitt effektiv mit  $V_{k,i} \approx 1/(N_{\text{QP}})^{1/2}$  an den Draht angebunden, weil so die mittlere Amplitude auf dem letzten Platz des Quantenpunkts mit  $N_{\text{QP}}$  skaliert. Das bedeutet, dass der als Quantenpunkt aufgefasste Abschnitt des Drahts nicht stark ( $V_{k,i} \approx 1$ ), sondern nur mit mittlerer Stärke angekoppelt ist. Eine



**Abb. III.G.4:** Besetzung eines Quantenpunkts mit drei stark wechselwirkenden Zuständen, an den ein Draht angekoppelt ist. Die Quantenpunkt-Zustände sind  $\epsilon_1 = -1.39$ ,  $\epsilon_2 = -1.4$  und  $\epsilon_3 = -1.41$ , die Wechselwirkungsstärke beträgt  $U = 0.6$  und die Kopplungs-Matrixelemente sind alle  $V = 0.2$ . Als Funktion des chemischen Potenzials sind aufgetragen (a) die gesamte Besetzung  $n$  des Quantenpunkts, (b) die Besetzung dargestellt in der Basis der drei ursprünglichen Zustände ( $n_1 + n_2 + n_3 = n$ ) und (c) die Besetzung dargestellt in der Basis von Zuständen bei sehr starker Kopplung ( $n_1' + n_2' + n_3' = n$ ), wobei  $n_1'$  (durchgezogene Linie) sich auf den gebunden bleibenden Zustand bezieht (aus [BERKOVITSetal-04]).

„gute“ Ankopplung entspricht demnach einem mittleren Kopplungs-Matrixelement  $V_{k,i} \sim 1/(N_{\text{QP}})^{1/2}$ . Die starke Ankopplung mit  $V_{k,i} \approx 1$  ist stärker als für ein homogenes System und führt darum zu im Quantenpunkt lokalisierten Zuständen. Man kann sich das durch eine Separation der Energie- und Zeitskalen in einem mechanischen System aus mit schwachen Federn verbundenen Massen (Quantenpunkt) und mit starken Federn daran angeknüpften Ketten (Drähten) veranschaulichen: Bei niedrigen Frequenzen (niedriger Energie) werden die starken Federn nur wenig ausgelenkt, die damit verbundenen Massen erscheinen als starre Blöcke, und die Bewegungen beschränken sich auf die schwachen Federn, d.h. den Quantenpunkt. Bei hohen Frequenzen beschränken sich die Bewegungen hingegen auf die starken Federn, weil die schwachen zu langsam sind. Tatsächlich zeigt Abb. III.G.2, dass es für Kopplungen mittlerer Stärke keine scharfen Sprünge und damit keine im Quantenpunkt gebundenen Zustände gibt, während bei schwacher und starker Kopplung, wenn sich die Energieskalen separieren lassen, eindeutig gebundene Zustände vorliegen.

Dennoch lässt sich wahrscheinlich auch der Grenzfall einer starken Kopplung eines Quantenpunkts an Drähte experimentell realisieren. Eine Möglichkeit dafür wäre eine quasi-eindimensionale Metallspitze, die in ein Molekül gedrückt wird, und die so einen engeren Kontakt zu den Atomen des Moleküls (des Quantenpunkts) hat als viele der Quantenpunkt-Atome untereinander. Eine andere Möglichkeit wäre, die Zustandsdichte in dem Quantenpunkt lokal an der Stelle zu erhöhen, wo der Draht angeschlossen wird, beispielsweise durch eine Symmetrie-Entartung. Alternativ könnte der Draht an mehrere Quantenpunkte angeschlossen werden, deren Niveaus künstlich durch Einstellung geeigneter Gate-Spannungen nahezu zur Entartung gebracht sind.

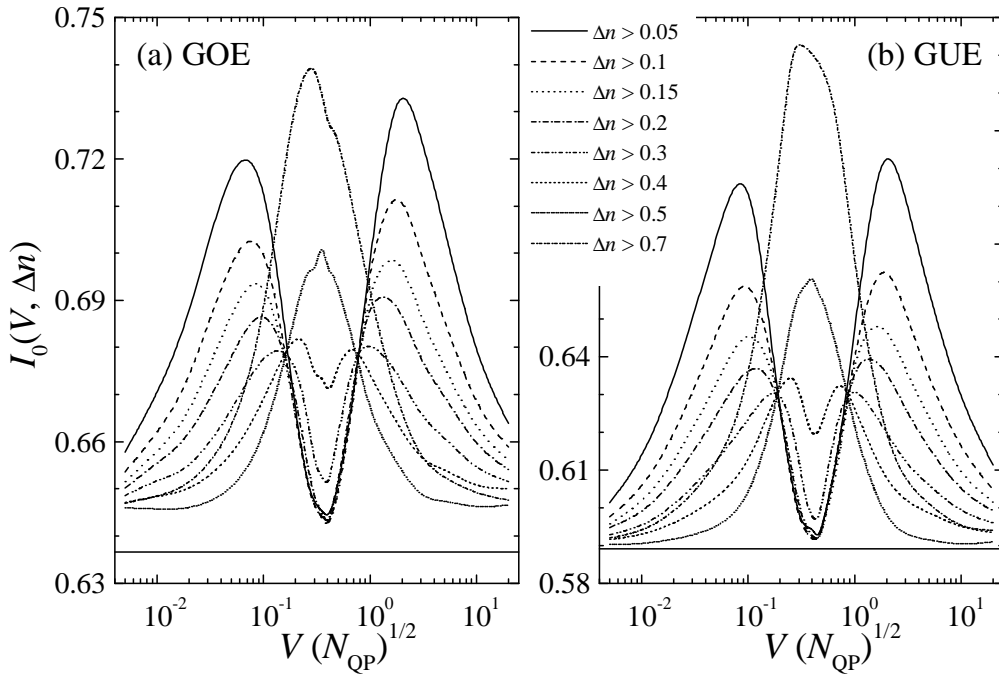
#### III.G.4. Eigenwert-Statistik für Quantenpunkte mit gekoppelten Drähten

In diesem Abschnitt sollen die Veränderungen in der Niveau-Statistik untersucht werden für einen Quantenpunkt, der an Drähte gekoppelt ist. Es ist aus den obigen Ergebnissen klar, dass bei sehr schwacher oder sehr starker Ankopplung der Drähte die Energieniveaus des Quantenpunkts nur unwesentlich von den Drähten beeinflusst werden, und dass man daher eine Niveau-Statistik mit der Universalitätsklasse des Quantenpunkts erwarten kann. Für eine Ankopplung mittlerer Stärke gibt es dagegen keine eindeutig auf dem Quantenpunkt lokalisierten Eigenzustände mehr, denn dann tragen sehr viele Zustände jeweils ein wenig zur Besetzung des Quantenpunkts bei, und der Verlauf der Besetzung  $n$  in Abhängigkeit vom chemischen Potenzial  $\mu$  wird kontinuierlich (siehe Gl. (III.G.5) und Abb. III.G.2). Man kann dennoch eine Eigenwertstatistik bestimmen, wenn man nur die Zustände berücksichtigt, die eine vorgegebene minimale Besetzungsänderung  $\Delta n$  (siehe Gl. (III.G.6)) des Quantenpunkts hervorrufen (für Abb. III.G.1 und III.G.3 war dieses Minimum  $\Delta n > 0.3$ ). Dann stellt sich die Frage unter welchen Bedingungen die so aufgestellte Eigenwertstatistik nicht nur eine Mischung aus der Eigenwert-Statistik des Quantenpunkts und der Eigenwertstatistik der Drähte ist, sondern eine eigene Universalität aufweist.

Da die Eigenwertstatistik Einteilchen-Zustände voraussetzt, wird jetzt die Elektron-Elektron-Wechselwirkung weggelassen, und auch das chemische Potenzial muss nicht mehr im Hamilton-Operator stehen, weil die Eigenwertspektren als Ganzes betrachtet werden. Anstelle von Gl. (III.G.2) verwenden wir jetzt wieder einen normalen Anderson-Hamiltonoperator für den Quantenpunkt, bei dem die Nichtdiagonalelemente  $t_{ij}$  die Universalitätsklasse bestimmen (siehe auch Gl. (III.B.13) und (III.B.15)),

$$H_{\text{QP}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{QP}}} \varepsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{\sqrt{N_{\text{QP}}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{QP}}} \sum_{j=i+1}^{N_{\text{QP}}} \left[ t_{i,j} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + t_{j,i}^* \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \right]. \quad (\text{III.G.7})$$

Die Diagonalelemente  $\varepsilon_i$  sind reelle, Gauß-verteilte Zufallszahlen mit einer Standardabweichung  $w$ , die kleiner als die Breite des Bandes der Drähte sein muss. Hier verwende ich  $w = 0.1$ , während die Breite des Draht-Bandes durch die Wahl der Energieeinheit  $t = 1$  in Gl. (III.G.3) auf 2 festgelegt ist.



**Abb. III.G.5:** Ergebnisse der Eigenwertstatistik für an  $N = 2$  Drähte gekoppelte Quantenpunkte mit  $N_{\text{QP}} = 50$  Zuständen aus dem (a) orthogonalen bzw. (b) unitären Ensemble. Der gegen die Kopplungsstärke  $V$  zwischen Quantenpunkt und Drähten aufgetragene Parameter  $I_0$  ist das halbe zweite Moment der Eigenwertabstandsverteilung  $P(s)$  und erreicht theoretisch im Wigner-Grenzfall für ein unendliches, homogenes System die unten durch waagerechte Linien markierten Grenzwerte. Die unterschiedlichen Kurven entsprechen verschiedenen minimalen Besetzungszahländerungen  $\Delta n$ , und es sind in der Eigenwertstatistik immer nur die Zustände des Systems aus Quantenpunkt und Draht berücksichtigt, deren Anteil im Quantenpunkt  $\Delta n$  übersteigt. Man erkennt Wigner-artiges Verhalten für ganz kleine und ganz große Kopplungsstärken  $V$  sowie im Zwischenbereich bei „guter“ Kopplung  $V \approx 0.4/(N_{\text{QP}})^{1/2}$ ; letzteres nur, wenn die Grenze  $\Delta n$  nicht zu groß ist.

Die Nichtdiagonalelemente  $t_{i,j}$  müssen für das orthogonale Ensemble ebenfalls reelle, für das unitäre Ensemble komplexe Zufallszahlen sein, deren Real- und Imaginärteile Gauß-verteilt sind, und zwar ebenfalls mit der Standardabweichung  $w$ . Der Vorfaktor  $1/(N_{\text{QP}})^{1/2}$  vor den Nichtdiagonaltermen ist notwendig, weil jeder Gitterplatz im Quantenpunkt mit jedem anderen wechselwirkt. Ohne den Vorfaktor würde die Unordnung mit der Systemgröße zunehmen. Alternativ habe ich auch zweidimensionale Quantenpunkte betrachtet, bei denen die Plätze auf einem Quadratgitter angeordnet sind, und die Elektronen nur zwischen nächsten Nachbarn springen können wie in Gl. (III.B.13); dann braucht man keinen Vorfaktor  $1/(N_{\text{QP}})^{1/2}$  vor den Nichtdiagonalelementen. Der gesamte Hamilton-Operator besteht aus Gl. (III.G.7) für den Quantenpunkt, Gl. (III.G.3) für die Drähte und Gl. (III.G.4) für die Kopplung zwischen beiden. Die Kopplungs-Matrixelemente  $V_{k,i}$  sind auch Zufallsvariable aus einer Gaußverteilung, und da sie jeden Draht an alle Quantenpunkt-Zustände koppeln, muss wie für die Nichtdiagonalelemente der Vorfaktor  $1/(N_{\text{QP}})^{1/2}$  hinzugefügt werden, um eine Unabhängigkeit von der Systemgröße zu erreichen.

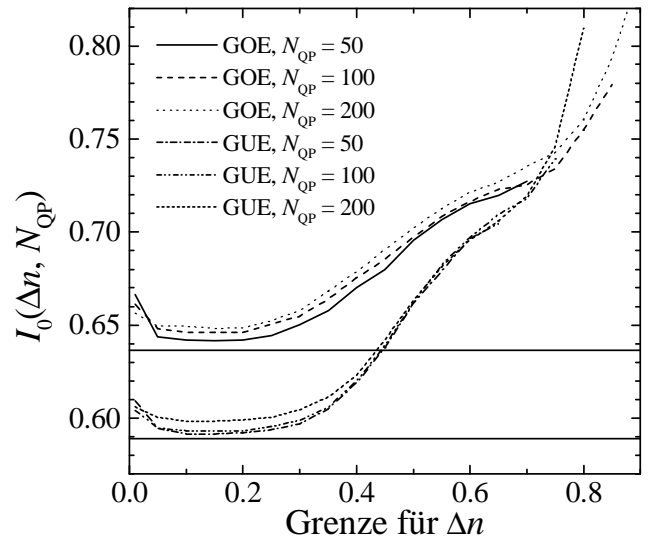
Abbildung III.G.5 zeigt die numerischen Ergebnisse der Eigenwertstatistik für verschiedene minimale Besetzungsänderungen  $\Delta n$  (nach Gl. (III.G.6)); d.h. es wurden jeweils nur die Eigenwerte berücksichtigt, deren Zustände die kontinuierliche Besetzung  $n$  des Quantenpunkts um mehr als  $\Delta n$  erhöhen. Die Eigenwertabstandsverteilungen  $P(s)$  (siehe Abschnitt III.C.2) werden durch die Hälfte ihres zweiten Moments  $I_0$  nach Gl. (III.C.10) charakterisiert, die im idealen Wigner-Grenzfall, d.h. für Eigenwerte einer Zufallsmatrix, die Werte  $I_{0,\text{Wigner}} \cong 0.6366$  für das orthogonale Ensemble und  $I_{0,\text{Wigner}} \cong 0.5890$  für das unitäre Ensemble annimmt (waagerechte Linien in Abb. III.G.5). Bei lokalisierten Zuständen, die einem zufälligen Eigenwertspektrum ohne Niveauabstoßung entsprechen, gilt stattdessen der Poisson-Grenzfall  $I_{0,\text{Poisson}} = 1$ . Man erkennt, dass wie erwartet für sehr kleine

und sehr große Kopplungsstärken  $V$  die Eigenwertabstandsverteilung ungefähr dem Wigner-Grenzfall für die jeweilige Symmetrie-Klasse entspricht. Wie immer bei Systemen endlicher Größe werden diese Grenzwerte nur näherungsweise erreicht. Die stärksten Abweichungen gibt es, wenn die Grenze  $\Delta n$  sehr klein gewählt ist, weil dann einige Zustände aus den Drähten, die etwas in den Quantenpunkt vordringen, schon mitgerechnet werden und das Eigenwertspektrum zufälliger, d.h. eher Poisson-artig machen. Man kann auch sagen, dass die Eigenwertabstoßung durch diese zusätzlichen, zufälligen Eigenwerte verringert ist. Aus diesem Grund steigt der  $I_0$ -Wert zunächst an, wenn man die sehr schwache Ankopplung der Drähte etwas verstärkt (von links zur Mitte hin) bzw. die sehr starke Ankopplung etwas abschwächt (von rechts zur Mitte hin).

Bei einer mittleren Kopplungsstärke  $V \approx 0.4/(N_{\text{QP}})^{1/2}$  kommt es überraschenderweise zu einer teilweisen Wiederherstellung der ursprünglichen Wigner-Verteilung, und

zwar wie Abb. III.G.5 zeigt in gleicher Weise beim orthogonalen wie auch beim unitären Ensemble. Bei dieser mittleren Kopplung kann man im Sinne des vorhergehenden Abschnitts von einer „guten Kopplung“ sprechen, die für eine gute Mischung von Quantenpunkts-Zuständen und Draht-Zuständen sorgt. Für die gemischten Zustände erscheint das System aus Quantenpunkt und Drähten bei mittlerer Kopplungsstärke nicht mehr inhomogen. Dadurch wird eine Eigenwertabstandsverteilung wiederhergestellt, bei der eine Eigenwertabstoßung vorliegt, wie bei den Eigenwerten einer völlig zufälligen Matrix. Abbildung III.G.6 zeigt, dass diese Eigenwertabstandsverteilung für  $V \approx 0.4/(N_{\text{QP}})^{1/2}$  näherungsweise unabhängig von der Systemgröße  $N_{\text{QP}}$  ist. Aber etwas merken die Zustände doch noch von der Inhomogenität des Systems, denn mit zunehmender Systemgröße kommt es zu leicht zunehmenden Abweichungen von den Wigner-Grenzwerten.

Es sind zwei einschränkende Bemerkungen angebracht: Erstens dürfen keine zu strengen Bedingungen an die für die Eigenwertstatistik verwendeten Niveaus gestellt werden in Bezug auf ihren Beitrag  $\Delta n$  zur Besetzung des Quantenpunkts. Nur wenn Zustände mit  $\Delta n \approx 0.25$ , d.h. Zustände, die nur zu einem Viertel im Quantenpunkt gebunden sind, noch berücksichtigt werden, tritt die Wigner-Verteilung im Zwischenbereich auf. Zweitens hängt das Auftreten der Wigner-Verteilung in dem Zwischenbereich auch empfindlich von der Unordnung im Quantenpunkt und ggf. einer zusätzlichen Unordnung in den Drähten ab, ist also nicht universell. Bei einer Kopplung von ungeordneten Drähten an den ungeordneten Quantenpunkt bleibt  $I_0$  im Zwischenbereich bei guter Kopplung über dem Wigner-Grenzwert. Insgesamt bestätigt die Betrachtung der Eigenwertstatistik aber klar, dass im Zwischenbereich die Kopplung zwischen Quantenpunkt und Drähten am besten ist im Sinne einer guten Durchmischung der Zustände, die sogar zu einem nahezu homogen erscheinenden System führen kann.



**Abb. III.G.6:** Systemgrößenabhängigkeit der Eigenwertstatistik für an 2 Drähte gekoppelte Quantenpunkte im orthogonalen (GOE) und unitären (GUE) Ensemble bei „guter“ Kopplung  $V \approx 0.4/(N_{\text{QP}})^{1/2}$ . Der gegen die Grenze für den Anteil im Quantenpunkt  $\Delta n$  aufgetragene Parameter  $I_0$  ist das halbe zweite Moment der Eigenwertabstandsverteilung  $P(s)$  und erreicht theoretisch im Wigner-Grenzfall für ein unendlich großes homogenes System die unten durch waagerechte Linien markierten Grenzwerte. Die Kurven entsprechen verschiedenen Systemgrößen (siehe Legende) und liegen nahezu übereinander.





## IV. Zusammenfassung und Ausblick

### IV.A. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden komplexe Systeme unterschiedlicher Art betrachtet und anhand der bei verschiedenen Messgrößen auftretenden Fluktuationen charakterisiert. Verbindendes Element der beiden Teile der Arbeit ist, dass die modellierten und analysierten Systeme eine Dynamik mit wesentlichen Fluktuationen aufweisen.

Der erste Teil hatte die Analyse komplexer biomedizinischer und geophysikalischer Systeme anhand von Zeitreihen zum Thema. Mit Hilfe der trendbereinigenden Fluktuationsanalyse (DFA) und ihrer hier eingeführten multifraktalen Verallgemeinerung (MF-DFA) kann das Langzeit-Korrelationsverhalten trotz Nichtstationaritäten und Trends in den Zeitreihen zuverlässig charakterisiert werden. Die MF-DFA ist der etablierten WTMM-Methode mindestens gleichwertig, aber einfacher zu implementieren und anzuwenden. Mit der PRSA-Methode kann man Quasiperiodizitäten in nichtstationären Reihen empfindlicher detektieren als mit der konventionellen Spektralanalyse.

Die Untersuchung der Fluktuationsdynamik des menschlichen Herz- und Atemrhythmus getrennt nach verschiedenen Aktivitäts- und Schlafphasen zeigte, dass sowohl die Herz- als auch die Atemfrequenzen im Leicht- und Tiefschlaf praktisch unkorreliert fluktuieren, wenn man von leichten, durch die Sinus-Arrhythmie verursachten, Kurzzeitkorrelationen absieht. Im REM-Schlaf sind hingegen Langzeitkorrelationen zu finden, die denen in der Wachphase ähneln. Diese Langzeitkorrelationen sind wahrscheinlich kortikalen Ursprungs, und sie sind im Wachen bei der Atmung abgeschwächt, weil sich der Atemrhythmus im Gegensatz zum Herzrhythmus bewusst beeinflussen lässt. Beim Atemantrieb dominieren im Gegensatz zum Atemrhythmus Kurzzeitkorrelationen, was auf eine andersartige Regelung unabhängig von Schlafstadien hinweist. Die Regelung des Herzrhythmus im REM-Schlaf und in den Wachphasen ist stärker nichtlinear als im Leicht- und Tiefschlaf. Bei der Abschätzung des Risikos für plötzlichen Herztod von Herzinfarktpatienten konnte die Überlegenheit des aus PRSA-Kurven abgeleiteten Parameters CWA gegenüber dem heutigen „Goldstandard“-Parameter LVEF nachgewiesen werden.

Die Zeitreihenanalyse hydroklimatischer Messdaten ermöglichte eine Charakterisierung der Wetter- und Klimadynamik der Erde sowie der Abflussdynamik von Flüssen. In langjährigen Temperatur-Zeitserien liegen weitgehend universelle Langzeitkorrelationen aber keine Multifraktalitäten vor. Niederschlagszeitserien sind hingegen nahezu unkorreliert, weisen aber Multifraktalität auf. Am stärksten multifraktal (aber nicht universell) sind Abflusszeitserien, wobei die Speicherwirkung des Bodens und anderer Wasserspeicher bei der Regen-Abfluss-Dynamik eine wichtige Rolle spielt. Die Langzeitkorrelationen in den hydroklimatischen Zeitserien, die auch in langen historischen und rekonstruierten Datenreihen auftreten, haben wesentliche Auswirkungen auf die Statistik der Wiederkehrintervalle zwischen Extremereignissen. Die Wiederkehrintervalle sind ebenfalls langreichweitig korreliert, so dass sich nach einer längeren Pause zwischen zwei Extremereignissen auch das nächste Ereignis im Mittel verzögert, während in anderen Bereichen der Zeitreihe die Extremereignisse gehäuft auftreten. Daher sollte bei der Abschätzung von Eintrittswahrscheinlichkeiten für Extremereignisse nicht nur die Gesamtverteilung und die seit dem letzten Ereignis vergangene Zeit, sondern auch der Zeitabstand zwischen den beiden vorhergehenden Extremereignissen berücksichtigt werden. Die Häufungen von Extremereignissen, die auch in den langjährigen rekonstruierten Datenreihen auftreten, wurden in jüngster Zeit oft in Zusammenhang mit der globalen Klimaerwärmung gebracht; die Langzeitkorrelationen sind ein alternativer Erklärungsansatz.

Bei der Untersuchung der zeitlichen Fluktuationen kohärent gebeugter Synchrotron-Röntgenstrahlung wurde die Aktivierungsenergie der Diffusionsdynamik von Antiphasendomänen in einer Ein-

phasen-Legierung bestimmt und – durch einen Vergleich der Ergebnisse der Fluktuationsanalyse mit den Ergebnissen von Monto-Carlo-Simulationen – nachgewiesen, dass beim Wachstum von Ausscheidungen in verschiedenen metallischen Zweiphasen-Legierungen unterschiedliche Diffusions-Mechanismen dominieren.

Der zweite Teil der Arbeit beschäftigte sich mit komplexen elektronischen Systemen in Festkörpern. Hier interessierten wir uns zunächst für die Auswirkungen einer ungeordneten Potenziallandschaft und für die Frage, ob die Ein-Parameter-Skalentheorie der Lokalisierung wie in eindimensionalen unkorrelierten Systemen gilt. Die Fluktuationen der Wellenfunktionen, die die komplexe Dynamik verursacht, ermöglichen einen Test der theoretischen Konzepte anhand numerischer Simulationen. Bei zweidimensionalen, unkorrelierten Systemen wurde gezeigt, dass entgegen der allgemeinen Überzeugung zwei Abweichungen von der Ein-Parameter-Skalentheorie vorliegen, wobei die starken logarithmischen Korrekturen zu der einfach exponentiellen Form der lokalisierten Eigenfunktionen die wesentlichere Abweichung darstellen, weil dadurch die Lokalisierungslänge möglicherweise für große Systeme logarithmisch divergiert. Selbstaffin fluktuierende Potenziallandschaften weisen bereits in einer Dimension entweder einen Übergang zwischen lokalisierten und scheinbar ausgedehnten Zuständen auf oder einen Übergang zwischen stark und schwach lokalisierten (quasi ausgedehnten) Eigenzuständen – je nachdem ob die Potenziale künstlich renormiert werden oder nicht. Im Übergangsbereich treten so starke Fluktuationen auf, dass die Lokalisierungslänge keine selbstmittelnde Größe ist und die Ein-Parameter-Skalentheorie nicht gilt.

Zum Verständnis der Phasenübergänge, insbesondere der bisher noch weitgehend unverstandenen experimentellen Ergebnisse zum Metall-Isolator-Übergang in zweidimensionalen Elektronensystemen, sind neben der Unordnung Wechselwirkungseffekte von besonderem Interesse. Hier wurde gezeigt, dass die normierte Vielteilchen-Tunnelamplitude das Äquivalent zur Einelektronen-Wellenfunktion ist für das Studium der Transporteigenschaften wechselwirkender Elektronen. Bei vollständiger Berücksichtigung aller Elektron-Elektron-Wechselwirkungen wurde für Systeme ohne und mit Spinfreiheitsgraden nachgewiesen, dass die langreichweitige Coulomb-Wechselwirkung immer den Transport behindert, also die Zustände stärker isolierend macht. Nur die Hubbard-Wechselwirkung in Systemen mit Spin kann für kleine Wechselwirkungsstärken eine Tendenz zu einem weniger isolierenden Verhalten verursachen, aber diese Änderung liegt nicht in dem experimentell relevanten Parameterbereich und ist vergleichsweise schwach. Durch Mitnahme von Unordnung und Elektron-Elektron-Wechselwirkungen lässt sich also kein Phasenübergang in den zweidimensionalen Systemen reproduzieren. Die simulierte Magnetleitfähigkeit der Systeme verläuft in senkrechten und parallelen Magnetfeldern weitgehend im Einklang mit experimentellen Ergebnissen aus dem metallischen Bereich, was wiederum darauf hindeutet, dass es sich um einen Bereich mit (sehr) schwacher Lokalisierung handelt. Die isolierende Phase könnte mit dem kürzlich entdeckten Divergieren der Elektronenmasse am Metall-Isolator-Übergang zusammenhängen.

Den Abschluss des zweiten Teils bildete eine Analyse von Lokalisierungsübergängen und Fluktuationen in Quantenpunkten bei einer Kontaktierung mit idealen Drähten. Es wurde gezeigt, dass die scharfen Niveaus nur verschwinden, wenn die Drähte mit mittlerer Stärke angekoppelt sind. Dann kann das System in bestimmten Energiebereichen nahezu homogen erscheinen. Bei starker Kopplung treten wieder scharfe Niveaus auf, aber ihre Anzahl ist verringert.

## **IV.B. Ausblick**

Eine Fortsetzung der hier vorgestellten Arbeiten erscheint mir in mehreren Richtungen aussichtsreich: Das unterschiedliche Korrelationsverhalten des Herzrhythmus in den verschiedenen Aktivitäts- und Schlafstadien bildet die Grundlage für eine automatische Unterscheidung der verschiedenen Phasen, die wir durch eine zusätzliche Berücksichtigung des Atemrhythmus und einer – noch im Einzelnen zu klärenden – Altersabhängigkeit der Fluktuationsdynamik weiter verbessern wollen. Da Herz- und Atemrhythmus ein ähnliches Korrelationsverhalten aufweisen, erscheint mir über die durchgeführten Arbeiten hinaus eine gründliche Untersuchung der Synchronisation und der Kreuzkorrelationen zwischen den beiden Signalen lohnend, denn damit kann die bisher nur andeutungsweise beantwortete Frage nach der Wechselwirkung zwischen den beiden Regelungssystemen näher beleuchtet werden. Es stellt sich für mich auch die Frage, ob langsamere, quasiperiodische Regulationsprozesse, wie beispielsweise Mayer-Wellen, die in den Herzrhythmus eingehen, mit den in dieser Arbeit behandelten Methoden und mit der Synchronisationsanalyse charakterisiert werden können. Als Alternative zur konventionellen Phasen-Synchronisationsanalyse für quasiperiodische Signale sehe ich vor allem die hier nur kurz erwähnte Verallgemeinerung der PRSA-Methode mit Triggerung auf ein zweites Signal als sehr viel versprechend an. Eine konkrete klinische Anwendung der PRSA-Ergebnisse zur diagnostischen Risikoabschätzung bei Herzinfarktpatienten liegt bereits nahe. Die Ergebnisse zum Fluktuationsverhalten von Herz- und Atemrhythmus bei Gesunden können durch einen Vergleich mit entsprechenden Ergebnissen bei Patienten mit verschiedenen Erkrankungen, wie Parkinson, Schlafstörungen, Herzrhythmusstörungen, Depression und Diabetes, für eine verbesserte Diagnostik der Erkrankungen und eine Abschätzung des Risikos für ernsthafte Herz-Kreislauf-Störungen genutzt werden. Konkret kann man so voraussichtlich einfacher als bisher Parkinson von Multisystem-Atrophie (MSA), einer peripheren autonomen Störung, unterscheiden und die beiden Schlafstörungen Schlafapnoe und periodische Beinbewegungen, die verschiedene Ursachen aber ähnliche Symptome haben, leichter diagnostizieren.

Die Ergebnisse zum Korrelationsverhalten von hydroklimatischen Zeitreihen legen als Anwendung einen weiter gehenden Vergleich mit den Simulationsergebnissen von Klimamodellen und Regen-Abfluss-Modellen nahe, der eine Verbesserung der Modelle zum Ziel hat. Meiner Meinung nach ist es darüber hinaus sinnvoll, die Vorgehensweise bei der Rekonstruktion von langjährigen Datenreihen, bei der teilweise Interpolationen eingesetzt werden, sowie die Bestimmung von überregionalen Mittelwerten und Hemisphären-Mittelwerten unter dem Gesichtspunkt der Fluktuationen zu überprüfen, um zu verstehen, warum diese Reihen oft unrealistische Langzeitkorrelationen oder sogar nichtstationäres Verhalten aufweisen. Die Frage ist, wie sich Korrelationen und Nichtstationaritäten in einem Teilsystem auf Mittelwerte des Gesamtsystems auswirken oder übertragen. Die Ergebnisse zur Extremwertstatistik sollten meiner Ansicht nach an weiteren konkreten Beispielen überprüft und dann den mit der Abschätzung von Eintrittswahrscheinlichkeiten betrauten Ingenieuren nahe gebracht werden. Um die Kluft zur praktischen Anwendung weiter zu verengen, erscheint es mir hilfreich, zusätzlich zur Statistik der Wiederkehrintervalle auch die Statistik der Extremwerte in festen Perioden und ihre Beeinflussung durch Langzeitkorrelationen näher zu untersuchen.

Die Analyse von Röntgen-Speckle-Fluktuationen zur Klärung der Diffusionsdynamik in zwei Arten von Legierungen legt entsprechende Experimente und Analysen bei weiteren harten und weichen Festkörper-Systemen nahe. Mir erscheint darüber hinaus eine Ausweitung auf spektroskopische Untersuchungen in anderen Energie- bzw. Wellenlängenbereichen, insbesondere auf die Laserspektroskopie, als durchaus machbar und viel versprechend.

Bei den komplexen Elektronensystemen sehe ich Möglichkeiten für eine lohnende Fortsetzung der hier vorgestellten Arbeiten durch einen weiteren Test der theoretischen Modellvorstellungen in Sys-

temen mit anderer Raumdimension oder zusätzlichen Wechselwirkungseffekten. Insbesondere sollte die von uns für unkorrelierte zweidimensionale Systeme gefundene logarithmische Abhängigkeit der Lokalisierungslänge vom Abstand zum Lokalisierungszentrum dabei überprüft werden, da sie eine sehr wesentliche Abweichung von der Ein-Parameter-Skalentheorie ausmacht. Für mich stellt sich die Frage, ob diese Abhängigkeit charakteristisch nur für exakt zweidimensionale Systeme, d.h. nur an der kritischen Dimension der Quanten-Lokalisierung, ist, oder ob ähnliche Abweichungen auch beispielsweise für dreidimensionale Systeme oder Systeme mit nicht ganzzahliger (fraktaler) Dimension auftreten, so z.B. für Perkolationssysteme bei der kritischen Konzentration. Darüber hinaus sind die Auswirkungen kurz- und langreichweitiger Korrelationen in zweidimensionalen Systemen ein lohnendes Thema.

Zur Klärung der Natur des Metall-Isolator-Übergangs in Halbleiter-Bauelementen mit zweidimensionaler Elektronenstruktur sind meiner Meinung nach zunächst Experimente bei tieferen Temperaturen sinnvoll, die zeigen, ob wirklich metallische Zustände vorliegen oder ob diese vielleicht doch sehr schwach lokalisiert sind. Für eine Beschreibung des isolierenden Bereichs sind wegen der am Übergang divergierenden effektiven Elektronenmasse andere Modelle notwendig, bei denen die Lokalisierung nicht primär unordnungsinduziert ist. Als Fortsetzung der hier vorgestellten Arbeiten erscheint mir daher vor allem eine Simulation der parallelen und senkrechten Magnetoleitfähigkeit dünner (quasi zweidimensionaler) Schichten viel versprechend, die mittlerweile auch aus anderen Materialien als den traditionellen Halbleitern in guter Qualität hergestellt werden können. In Silberselenid-Schichten wurde kürzlich ein starker, mit abnehmender Schichtdicke von positiv auf negativ wechselnder Magnetowiderstand gefunden. Bei dünnen Schichten und tiefen Temperaturen gibt es einen zusätzlichen positiven Beitrag, der schon bei kleinen Magnetfeldern sättigt. Hier stellt sich für mich die Frage, durch welche Ergänzungen in den betrachteten Modellen für wechselwirkende zweidimensionale Elektronensysteme sich diese experimentellen Ergebnisse reproduzieren und erklären lassen.

Die Ergebnisse unserer Untersuchungen von mit Drähten gekoppelten Quantenpunkten harren einer experimentellen Überprüfung; Vorschläge für eine Realisierung haben wir gegeben. Eine Fortsetzung der theoretischen Arbeiten erscheint mir vor allem in Richtung auf gekoppelte Quantenpunkte aussichtsreich. Dabei ist zu klären, wie sich die Niveaus der Quantenpunkte gegenseitig bei unterschiedlicher Kopplungsstärke beeinflussen und ob sich entsprechende Effekte möglicherweise bei Einzel-Elektronen-Transistoren ausnutzen lassen. In Zukunft könnten auch die Auswirkungen von magnetischen Feldern und – im Hinblick auf die Spin-Elektronik – ein spinpolarisierter Transport durch Quantenpunkte mit angekoppelten ferromagnetischen Drähten studiert werden.

## V. Literaturverzeichnisse und Anhang

### V.A. Literaturverzeichnis für Teil II

- [AKSELROD<sup>etal</sup>-81] S. Akselrod, D. Gordon, F. A. Ubel, D. C. Shannon, A. C. Barger und R. J. Cohen, *Science* **213**, 220 (1981).
- [AMARAL<sup>etal</sup>-98] L. A. Amaral, A. L. Goldberger, P. Ch. Ivanov und H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2388 (1998).
- [AMARAL<sup>etal</sup>-01] L. A. N. Amaral, P. Ch. Ivanov, N. Aoyagi, I. Hidaka, S. Tomono, A. L. Goldberger, H. E. Stanley und Y. Yamamoto, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 6026 (2001).
- [AMMANN<sup>etal</sup>-03] C. M. Ammann, G. A. Meehl, W. M. Washington und C. S. Zender, *Geophys. Res. Lett.* **30**, 1657 (2003).
- [ANTAL<sup>etal</sup>-01] T. Antal, M. Droz, G. Györgyi und Z. Racz, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 240601 (2001).
- [ARNEODO<sup>etal</sup>-95] A. Arneodo, E. Bacry, P. V. Graves und J. F. Muzy, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3293 (1995).
- [ARNEODO<sup>etal</sup>-98a] A. Arneodo, S. Manneville und J. F. Muzy, *Eur. Phys. J. B* **1**, 129 (1998).
- [ARNEODO<sup>etal</sup>-98b] A. Arneodo, Y. d'Aubenton-Carafa, B. Audit, E. Bacry, J. F. Muzy und C. Thermes, *Eur. Phys. J. B* **1**, 259 (1998).
- [ARNEODO<sup>etal</sup>-02] A. Arneodo, B. Audit, N. Decoster, J.-F. Muzy und C. Vaillant, *Wavelet Based Multifractal Formalism: Applications to DNA Sequences, Satellite Images of the Cloud Structure, and Stock Market Data*, in: [BUNDE<sup>etal</sup>-02].
- [ASHKENAZY<sup>etal</sup>-01a] Y. Ashkenazy, M. Lewkowicz, J. Levitan, S. Havlin, K. Saermark, H. Moelgaard, P. E. B. Thomsen, M. Moller, U. Hintze und H. V. Huikuri, *Europhys. Lett.* **53**, 709 (2001).
- [ASHKENAZY<sup>etal</sup>-01b] Y. Ashkenazy, P. Ch. Ivanov, S. Havlin, C.-K. Peng, A. L. Goldberger und H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1900 (2001).
- [ASHKENAZY<sup>etal</sup>-03a] Y. Ashkenazy, S. Havlin, P. Ch. Ivanov, C.-K. Peng, V. Schulte-Frohlinde und H. E. Stanley, *Physica A* **323**, 19 (2003).
- [ASHKENAZY<sup>etal</sup>-03b] Y. Ashkenazy, D. R. Baker, H. Gildor und S. Havlin, eingereicht bei *Geophys. Res. Lett.* (2003).
- [AUDIT<sup>etal</sup>-01] A. Audit, C. Thermes, C. Vaillant, Y. d'Aubenton-Carafa, J. F. Muzy und A. Arneodo, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2471 (2001).
- [AZAD<sup>etal</sup>-02a] R. K. Azad, P. Bernaola-Galvan, R. Ramaswamy und J. Subba Rao, *Phys. Rev. E* **65**, 051909 (2002).
- [AZAD<sup>etal</sup>-02b] R. K. Azad, J. S. Rao, W. Li und R. Ramaswamy, *Phys. Rev. E* **66**, 031913 (2002).
- [BACRY<sup>etal</sup>-01] E. Bacry, J. Delour, J. F. Muzy, *Phys. Rev. E* **64**, 026103 (2001).
- [BAHAR<sup>etal</sup>-01] S. Bahar, J. W. Kantelhardt, A. Neiman, H. H. A. Rego, D. F. Russell, L. Wilkens, A. Bunde und F. Moss, *Europhys. Lett.* **56**, 454 (2001).
- [BAO<sup>etal</sup>-02] Y. Bao, A. Braeuning, K. R. Johnson und Y. Shi, *Geophys. Res. Lett.* **29**, 1324 (2002).
- [BARABÁSI&VICSEK-91] A.-L. Barabási und T. Vicsek, *Phys. Rev. A* **44**, 2730 (1991).
- [BARTHE<sup>etal</sup>-03] P. Barthel, R. Schneider, A. Bauer, K. Ulm, C. Schmitt, A. Schomig und G. Schmidt, *Circulation* **108**, 1221 (2003).
- [BAUER<sup>etal</sup>-04] A. Bauer, J. W. Kantelhardt, P. Barthel, R. Schneider, T. Mäkilä, K. Ulm, A. Bunde, K. Hnatkova, A. Schömig, H. Huikuri, M. Malik, und G. Schmidt, Preprint (2004).
- [BENAVRAHAM&HAVLIN-00] D. Ben-Avraham und S. Havlin, *Diffusion and reactions in fractals and disordered system* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [BENZI<sup>etal</sup>-84] R. Benzi, G. Paladin, G. Parisi und A. Vulpiani, *J. Phys. A* **17**, 3521 (1984).
- [BERAN-94] J. Beran, *Statistics for Long Memory Processes*, Monograph in Statistics and Applied Probability (Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, 1994).
- [BERNAOLA-GALVAN<sup>etal</sup>-01] P. Bernaola-Galván, P. Ch. Ivanov, L. A. N. Amaral und H. E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 168105 (2001).
- [BHATTACHARYA<sup>etal</sup>-83] R. N. Bhatthacharya, V. K. Gupta und E. C. Waymire, *J. Appl. Probability* **20**, 649 (1983).

- [BIGGERetal-92] J. Bigger, J. L. Fleiss, R. C. Steinman, L. M. Rolnitzky, R. E. Kleiger und J. N. Rottman, *Circulation* **85**, 164 (1992).
- [BINDER&STAUFFER-74] K. Binder und D. Stauffer, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 1006 (1974).
- [BLENDER&FRAEDRICH-03] R. Blender und K. Fraedrich, *Geophys. Res. Lett.* **30**, 1769 (2003).
- [BOXetal-94] G. E. P. Box, G. M. Jenkins und G. C. Reinsel, *Time-series analysis*, 3rd ed. (Prentice Hall, New Jersey, 1994).
- [BRACIC&STEFANOVSKA-00] M. Bracic-Lotric und A. Stefanovska, *Physica A* **283**, 451 (2000).
- [BRAUERetal-95] S. Brauer, G. B. Stephenson, M. Sutton, R. Brüning, E. Dufresne, S. G. J. Mochrie, G. Grübel, J. Als-Nielsen und D. L. Abernathy, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2010 (1995).
- [BRAUNetal-98] H. A. Braun, M. T. Huber, M. Dewald, K. Schafer und K. Voigt, *Int. J. Bifurcat. Chaos* **8**, 881 (1998).
- [BRIFFA-00] K. R. Briffa, *Quaternary Sci. Rev.* **19**, 87 (2000).
- [BRIFFAetal-01] K. R. Briffa, T. J. Osborn, F. H. Schweingruber, I. C. Harris, P. D. Jones, S. G. Shiyatov und E. A. Vaganov, *J. Geophys. Res.* **106**, 2929 (2001).
- [BULDYREVetal-94] S. V. Buldyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, C.-K. Peng und H. E. Stanley, in: [BUNDE&HAVLIN-94], Seite 49.
- [BULDYREVetal-95] S. V. Buldyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, R. N. Mantegna, M. E. Matsu, C.-K. Peng, M. Simons und H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **51**, 5084 (1995).
- [BULDYREVetal-98] S. V. Buldyrev, N. V. Dokholyan, A. L. Goldberger, S. Havlin, C.-K. Peng, H. E. Stanley und G. M. Viswanathan, *Physica A* **249**, 430 (1998).
- [BULLOCKetal-83] T. H. Bullock, D. A. Bodznick und R. G. Northcutt, *Brain Res. Rev.* **6**, 25 (1983).
- [BUNDE&HAVLIN-94] A. Bunde und S. Havlin (Hrsg.), *Fractals in Science* (Springer, Berlin, 1994).
- [BUNDEetal-00] A. Bunde, S. Havlin, J. W. Kantelhardt, T. Penzel, J.-H. Peter und K. Voigt, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3736 (2000).
- [BUNDE&KANTELHARDT-01] A. Bunde und J. W. Kantelhardt, *Phys. Bl.* **57**, 49 (2001).
- [BUNDEetal-02] A. Bunde, J. Kropp und H. J. Schellnhuber (Hrsg.), *The science of disaster: Climate disruptions, market crashes und heart attacks* (Springer, Berlin, 2002).
- [BUNDEetal-03a] A. Bunde, J. F. Eichner, S. Havlin, E. Koscielny-Bunde, H. J. Schellnhuber und D. Vjushin, Preprint physics/0305080 (2003).
- [BUNDEetal-03b] A. Bunde, J. F. Eichner, S. Havlin und J. W. Kantelhardt, *Physica A* **330**, 1 (2003).
- [BUNDEetal-04a] A. Bunde, J. F. Eichner, J. W. Kantelhardt und S. Havlin, *Il Nuovo Cimento B* (im Druck, 2004).
- [BUNDEetal-04b] A. Bunde, J. F. Eichner, S. Havlin und J. W. Kantelhardt, *Physica A* (im Druck, 2004).
- [BUNDEetal-04c] A. Bunde, J. F. Eichner, J. W. Kantelhardt und S. Havlin, Preprint (2004).
- [BURGESSetal-97] H. J. Burgess, J. Trinder, Y. Kim und D. Luke, *Am. J. Physiol.* **273**, H1761 (1997).
- [CHARNEY&DEVORE-79] J. G. Charney und J. Devore, *J. Atmos. Sci.* **36**, 1205 (1979).
- [CHATFIELD-89] C. Chatfield, *The analysis of time series: An introduction*, 4th ed. Chapman & Hall, London, 1989.
- [CHENetal-02] Z. Chen, P. Ch. Ivanov, K. Hu und H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **65**, 041107 (2002).
- [CLEAVELAND-00] M. K. Cleaveland, *The Holocene* **10**, 33 (2000).
- [COOKetal-00] E. R. Cook, B. M. Buckley, R. D. D'Arrigo und M. J. Peterson, *Climate Dynamics* **16**, 79 (2000).
- [COOKetal-03] E. R. Cook, P. J. Krusic und P. D. Jones, *Int. J. Climat.* **23**, 707 (2003).
- [COPIEetal-96] X. Copie, K. Hnatkova, A. Staunton, L. Fei, A. J. Camm und M. Malik, *J. Am. Coll. Cardiol.* **27**, 270 (1996).
- [CORRAL-03] A. Corral, Preprint cond-mat/0310407 (2003).
- [CORRAL-04] A. Corral, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 108501 (2004).
- [CROWLEY-00] T. J. Crowley, *Science* **289**, 270 (2000).
- [CROWLEY&LOWERY-00] T. J. Crowley und T. S. Lowery, *Ambio* **29**, 51 (2000).
- [DAIetal-01] A. Dai, T. M. L. Wigley, B. A. Boville, J. T. Kiehl und L. E. Buja, *J. Climate* **14**, 485 (2001).
- [DAUBECHIES-88] I. Daubechies, *Commun. Pure Appl. Math.* **41**, 909 (1988).
- [DAVISetal-96] A. Davis, A. Marshak, W. Wiscombe und R. Cahalan, in: *Current topics in non-*

- stationary analysis*, Hrsg.: G. Trevino, J. Harding, B. Douglas und E. Andreas (World Scientific, Singapore, 1996), Seite 97.
- [DEIDDAetal-99] R. Deidda, R. Benzi und F. Siccaldi, *Wat. Resour. Res.* **35**, 1853 (1999).
- [DEIDDA-00] R. Deidda, *Wat. Resour. Res.* **36**, 1779 (2000).
- [DOUGLAS&BARROS-03] E. M. Douglas und A. P. Barros, *J. Hydrometeorol.* **4**, 1012 (2003).
- [DOUGLASSetal-93] J. K. Douglass, L. Wilkens, E. Pantazelou und F. Moss, *Nature* **365**, 337 (1993).
- [EFRON&TIBSHIRANI-93] B. Efron und R. J. Tibshirani, in: *Monographs on Statistics and Applied Probability* (Chapman & Hall, London, 1993).
- [EICHNER-02] J. F. Eichner, *Trendbeseitigende Fluktuationsanalyse von Temperaturzeitreihen*, Diplomarbeit, Universität Gießen (2002).
- [EICHNERetal-03] J. F. Eichner, E. Koscielny-Bunde, A. Bunde, S. Havlin und H.-J. Schellnhuber, *Phys. Rev. E* **68**, 046133 (2003).
- [EMBRECHTSetal-97] P. Embrechts, C. Klüppelberg und T. Mikosch, *Modelling Extremal Events*, Hrsg.: I. Karatzas und M. Yor (Springer, Berlin, 1997).
- [ESPERetal-02] J. Esper, E. R. Cook und F. H. Schweingruber, *Science* **295**, 5563 (2002).
- [FEDER-88] J. Feder, *Fractals* (Plenum Press, New York, 1988).
- [FISHER&TIPPET-28] R. A. Fisher und L. H. C. Tippett, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **24**, 180 (1928).
- [FOLLANDetal-01] C. K. Folland, N. A. Rayner, S. J. Brown, T. M. Smith, S. S. P. Shen, D. E. Parker, I. Macadam, P. D. Jones, R. N. Jones, N. Nicholls und D. M. H. Sexton, *Geophys. Res. Lett.* **28**, 2621 (2001).
- [FRAEDRICH&LARNER-93] K. Fraedrich und C. Lerner, *Tellus* **45A**, 289 (1993).
- [FRAEDRICH&BLENDER-03] K. Fraedrich und R. Blender, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 108501 (2003).
- [FRANCOUAletal-03] S. Francoal, F. Livet, M. de Boissieu, F. Yakhov, F. Bley, A. Létoublon, R. Caudron und J. Gastaldi, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 225501 (2003).
- [FRISCH&PARISI-85] U. Frisch und G. Parisi, in: *Turbulency and predictability in geophysical fluid dynamics*, Hrsg.: M. Ghil, R. Benzi und G. Parisi (Noth Holland, New York, 1985), Seite 84.
- [FUKUDAetal-03] K. Fukuda, H. E. Stanley und L. A. N. Amaral, Preprint cond-mat/0308068 (2003).
- [GALAMBOSetal-94] J. Galambos, J. Lechner und E. Simin (Hrsg.), *Extreme value theory and applications* (Kluwer, Dordrecht, 1994).
- [GANOPOLSKI&RAHMSTORF-01] A. Ganopolski und S. Rahmstorf, *Nature* **409**, 153 (2001).
- [GEORGE&KRYGER-85] C. F. George und M. H. Kryger, *Clinics in Chest Medicine* **6**, 595 (1985).
- [GLASER-01] R. Glaser, *Klimageschichte Mitteleuropas* (Wiss. Buchgesellschaft, Darmstadt, 2001).
- [GLASS-01] L. Glass, *Nature* **410**, 277 (2001).
- [GOLDBERGER-96] A. L. Goldberger, *Lancet* **347**, 1312 (1996).
- [GOLDBERGERetal-00] A. L. Goldberger, L. A. N. Amaral, L. Glass, J. M. Hausdorff, P. Ch. Ivanov, R. G. Mark, J. E. Mietus, G. B. Moody, C.-K. Peng und H. E. Stanley, *Circulation* **101**, 215 (2000).
- [GOLDBERGERetal-02] A. L. Goldberger, L. A. N. Amaral, J. M. Hausdorff, P. Ch. Ivanov, C.-K. Peng und H. E. Stanley, *Proc. Nat. Acad. Sci. (PNAS)* **99**, 2466 (2002).
- [GOUPILLAUDetal-84] P. Goupillaud, A. Grossmann und J. Morlet, *Geoexploration* **23**, 85 (1984).
- [GOVINDANetal-01] R. B. Govindan, A. Bunde und S. Havlin, *Physica A* **318**, 529 (2003).
- [GOVINDANetal-02] R. B. Govindan, D. Vyushin, A. Bunde, S. Brenner, S. Havlin und H.-J. Schellnhuber, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 028501 (2002).
- [GOVINDANetal-03] R. B. Govindan, A. Bunde und S. Havlin, *Physica A* **318**, 529 (2003).
- [GRASSL-00] H. Grassl, *Science* **288**, 1991 (2000).
- [GRAUMLICHetal-03] L. J. Graumlich, M. F. J. Pisaric, L. A. Waggoner, J. S. Littell und J. C. King, *Climatic Change* **59**, 245 (2003).
- [GREGORATOSetal-02] G. Gregoratos, J. Abrams, A. E. Epstein, R. A. Freedman, D. L. Hayes, M. A. Hlatky, R. E. Kerber, G. V. Naccarelli, M. H. Schoenfeld, M. J. Silka und S. L. Winters, ACC/AHA/NASPE 2002 guideline update for implantation of cardiac pacemakers and antiarrhythmia devices (Committee on Pacemaker Implantation), Online: [www.acc.org/clinical/guidelines/pacemaker/pacemaker.pdf](http://www.acc.org/clinical/guidelines/pacemaker/pacemaker.pdf) (2002).
- [GRISSINO-MAYER-96] H. D. Grissino-Mayer, in: *Tree Rings, Environment, and Humanity*, Hrsg.: J. S. Dean, D. M. Meko und T. W. Swetnam, (Department of Geosciences, The Uni-

- versity of Arizona, Tucson, 1996), Seite 191.
- [GUMBEL-58] E. J. Gumbel, *Statistics of extremes* (Columbia University Press, New York, 1958).
- [GUPTAetal-94] V. K. Gupta, O. J. Mesa, und D. R. Dawdy, *Wat. Resour. Res.* **30**, 3405 (1994).
- [GUPTA&DAWDY-95] V. K. Gupta und D. R. Dawdy, in: *Scale issues in hydrological modelling*, Hrsg.: J. D. Kalma (Wiley, Chichester, 1995), Seite 106.
- [GUPTAetal-96] V. K. Gupta, S. L. Castro und T. M. Over, *J. Hydrol.* **187**, 81 (1996).
- [GURGENSetal-00] C. Gurgens, D. F. Russell und L. A. Wilkens, *J. Fish Biol.* **57**, 277 (2000).
- [HANLEY&MCNEIL-82] J. A. Hanley und B. J. McNeil, *Radiology* **143**, 29 (1982).
- [HANTEMIROV&SHIYATOV-02] R. M. Hantemirov und S. G. Shiyatov, *The Holocene* **12**, 717 (2002).
- [HARRISetal-96] D. Harris, M. Menabde, A. Seed und G. Austin, *J. Geophys. Res.* **101** (D21), 26405 (1996).
- [HASSELMANN-97] K. Hasselmann, *Nature* **390**, 225 (1997).
- [HAVLIN&BEN AVRAHAM-00] S. Havlin und Y. Ben Avraham, *Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [HENEGHAN&MCDARBY-00] C. Heneghan und G. McDarby, *Phys. Rev. E* **62**, 6103 (2000).
- [HOetal-97] K. K. L. Ho, G. B. Moody, C.-K. Peng, J. E. Mietus, M. G. Larson, D. Levy und A. L. Goldberger, *Circulation* **96**, 842 (1997).
- [HUetal-01] K. Hu, P. Ch. Ivanov, Z. Chen, P. Carpena und H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **64**, 011114 (2001).
- [HUGHES&GRAUMLICH-96] M. K. Hughes und L. J. Graumlich, in: *Climatic variations and forcing mechanisms of the last 2000 years: Multi-millennial dendroclimatic studies from the western United States*, NATO ASI Series **141**, 109 (1996).
- [HUIKURIetal-03] H. V. Huikuri, T. H. Makikallio, M. J. Raatikainen, J. Perkiomaki, A. Castellanos und R. J. Myerburg, *Circulation* **108**, 110 (2003).
- [HUNT-51] G. A. Hunt, *Trans. Amer. Math. Soc.* **71**, 38 (1951).
- [HURST-51] H. E. Hurst, *Long-term storage capacity of reservoirs*, *Transactions of the American Society of Civil Engineering* **116**, 770 (1951).
- [HURSTetal-65] H. E. Hurst, R. P. Black und Y. M. Simaika, *Long-term storage: An experimental study* (Constable & Co. Ltd., London, 1965).
- [HUXLEY-1880] T. H. Huxley, *The Crayfish. An Introduction to the Study of Zoology* (D. Appleton, New York, 1880).
- [IPCC-01] *Climate Change 2001: The Scientific Basis, Contribution of Working Group I to the Third Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC)*, Hrsg.: J. T. Houghton *et al.* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2001).
- [ISDALEetal-98] P. J. Isdale, B. J. Stewart, K. S. Tickle und J. M. Lough, *The Holocene* **8**, 1 (1998).
- [IVANOVetal-96] P. Ch. Ivanov, L. A. N. Amaral, A. L. Goldberger, S. Havlin, M. G. Rosenblum, Z. Struzik und H. E. Stanley, *Nature* **383**, 323 (1996).
- [IVANOVetal-98a] P. Ch. Ivanov, L. A. N. Amaral, A. L. Goldberger und H. E. Stanley, *Europhys. Lett.* **43**, 363 (1998).
- [IVANOVetal-98b] P. Ch. Ivanov, M. G. Rosenblum, C.-K. Peng, J. Mietus, S. Havlin, H. E. Stanley, and A. L. Goldberger, *Physica A* **249**, 587 (1998).
- [IVANOVetal-99a] P. Ch. Ivanov, A. Bunde, L. A. N. Amaral, S. Havlin, J. Fritsch-Yelle, R. M. Baevsky, H. E. Stanley und A. L. Goldberger, *Europhys. Lett.* **48**, 594 (1999).
- [IVANOVetal-99b] P. Ch. Ivanov, M. Rosenblum, L. Amaral, Z. Struzik, S. Havlin, A. L. Goldberger und H. E. Stanley, *Nature* **399**, 461 (1999).
- [IVANOVetal-01] P. Ch. Ivanov, L. A. N. Amaral, A. L. Goldberger, S. Havlin, M. G. Rosenblum, H. E. Stanley und Z. R. Struzik, *Chaos* **11**, 641 (2001).
- [IVANOVetal-04] P. Ch. Ivanov, P. Ch. Ivanov, Y. Ashkenazy, J. W. Kantelhardt, H. E. Stanley, in: *Unsolved Problems of Noise and Fluctuations*, Hrsg.: S. M. Bezrukov, *AIP Conf. Proc.* **665**, 383 (Melville, New York, 2003).
- [JAFFARD-99] S. Jaffard, *Probab. Theory Relat.* **114**, 207 (1999).
- [JONESetal-98] P. D. Jones, K. R. Briffa, T. P. Barnett und S. F. B. Tett, *The Holocene* **8**, 455 (1998).
- [JONESetal-99] P. D. Jones, M. New, D. E. Parker, S. Martin und I. G. Rigor, *Rev. Geophys.* **37**, 173 (1999).



- [JONES&MOBERG-03] P. D. Jones und A. Moberg, *J. Climate*, **16**, 206 (2003).
- [KANTELHARDT-96] J. W. Kantelhardt, *Elektronen und Fraktonen in ungeordneten Festkörpern*, Diplomarbeit, Justus-Liebig-Universität Gießen, 1996.
- [KANTELHARDTetal-01] J. W. Kantelhardt, E. Koscielny-Bunde, H. H. A. Rego, S. Havlin und A. Bunde, *Physica A* **295**, 441 (2001).
- [KANTELHARDTetal-02a] J. W. Kantelhardt, S. A. Zschiegner, A. Bunde, S. Havlin, E. Koscielny-Bunde und H. E. Stanley, *Physica A* **316**, 87 (2002).
- [KANTELHARDTetal-02b] J. W. Kantelhardt, Y. Ashkenazy, P. Ch. Ivanov, A. Bunde, S. Havlin, T. Penzel, H.-J. Peter und H. E. Stanley, *Phys. Rev. E* **65**, 051908 (2002).
- [KANTELHARDTetal-03a] J. W. Kantelhardt, S. Havlin und P. Ch. Ivanov, *Europhys. Lett.* **62**, 147 (2003).
- [KANTELHARDTetal-03b] J. W. Kantelhardt, T. Penzel, S. Rostig, H. F. Becker, S. Havlin und A. Bunde, *Physica A* **319**, 447 (2003).
- [KANTELHARDTetal-03c] J. W. Kantelhardt, D. Rybski, S. A. Zschiegner, P. Braun, E. Koscielny-Bunde, V. Livina, S. Havlin und A. Bunde, *Physica A* **330**, 240 (2003).
- [KANTELHARDTetal-04] J. W. Kantelhardt, E. Koscielny-Bunde, D. Rybski, P. Braun, A. Bunde und S. Havlin, eingereicht bei *J. Geophys. Res.* (2004).
- [KAPLANetal-98] A. Kaplan, M. Cane, Y. Kushnir, A. Clement, M. Blumenthal und B. Rajagopalan, *J. Geophys. Res.* **103**, 18567 (1998).
- [KARASIKetal-02] R. Karasik, N. Sapir, Y. Ashkenazy, P. Ch. Ivanov, I. Dvir, P. Lavie und S. Havlin, *Phys. Rev. E* **66**, 062902 (2002).
- [KIRCHHEFER-01] A. J. Kirchhefer, *The Holocene* **11**, 41 (2001).
- [KLEIGERetal-87] R. E. Kleiger, J. P. Miller, J. J. Bigger und A. J. Moss, *Am. J. Cardiol.* **59**, 256 (1987).
- [KLEMES-74] V. Klemes, *Wat. Resour. Res.* **10**, 675 (1974).
- [KOBAYASHI&MUSHA-82] M. Kobayashi und T. Musha, *IEEE Trans. Biomed. Eng.* **29**, 456 (1982).
- [KOSCIELNY-BUNDEetal-96] E. Koscielny-Bunde, A. Bunde, S. Havlin, und Y. Goldreich, *Physica A* **231**, 393 (1996).
- [KOSCIELNY-BUNDEetal-98a] E. Koscielny-Bunde, A. Bunde, S. Havlin, H. E. Roman, Y. Goldreich und H.-J. Schellnhuber, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 729 (1998).
- [KOSCIELNY-BUNDEetal-98b] E. Koscielny-Bunde, H. E. Roman, A. Bunde, S. Havlin und H.-J. Schellnhuber, *Philos. Mag. B* **77**, 1331 (1998).
- [KOSCIELNY-BUNDEetal-04] E. Koscielny-Bunde, J. W. Kantelhardt, P. Braun, A. Bunde und S. Havlin, eingereicht bei *J. Hydrol.* (2004), Preprint physics/0305078.
- [KUNZetal-00] D. Kunz, H. Danker-Hopfe, G. Gruber, G. Klösch, J. L. Lorenzo, S. L. Himanen, B. Kemp, T. Penzel, J. Rösche und G. Dorffner, *J. Sleep Res.* **9**, Supp. 1, 106 (2000).
- [LANGMAYRetal-92] F. Langmayr, P. Fratzl und G. Vogl, *Acta Metall. Mater.* **40**, 3381 (1992).
- [LAROVEREEetal-98] M. T. La Rovere, J. T. Bigger, F. I. Marcus, A. Mortasa und P. J. Schwartz, *Lancet* **351**, 478 (1998).
- [LAVALLEEetal-93] D. Lavallee, S. Lovejoy und D. Schertzer, in: *Fractals in Geography*, Hrsg.: L. DeCola und N. Lam, (PTR Prentice-Hall, 1993), Seite 158.
- [LEGUTKEetal-96] S. E. Legutke, E. Maier-Reimer, U. Cubasch, A. Stössel und A. Hellbach, *World Meteorological Organization, CAS/JSC Report No. 21* (1996).
- [LI&KANEKO-92] W. Li und K. Kaneko, *Europhys. Lett.* **17**, 655 (1992).
- [LIEBOVITCHetal-02] L. S. Liebovitch, T. Penzel und J. W. Kantelhardt, in: [BUNDEetal-02], Seite 258.
- [LITZ-00] H. P. Litz, *Multivariate statistische Methode* (Oldenburg Verlag, München, 2000).
- [LIVINAetal-03a] V. N. Livina, Y. Ashkenazy, P. Braun, R. Monetti, A. Bunde und S. Havlin, *Phys. Rev. E* **67**, 042101 (2003).
- [LIVINAetal-03b] V. N. Livina, Y. Ashkenazy, Z. Kizner, V. Strygin, A. Bunde und S. Havlin, *Physica A* **330**, 283 (2003).
- [LOetal-01] C.-C. Lo, L. A. N. Amaral, S. Havlin, P. Ch. Ivanov, T. Penzel, J. H. Peter, *Europhys. Lett.* **57**, 625 (2001).
- [LOetal-03] C.-C. Lo, P. Ch. Ivanov, L. A. N. Amaral, T. Penzel, C. F. Vogelmeier und H. E. Stanley, Preprint cond-mat/0305660 (2003).
- [LOISetal-94] A. K. Louis, P. Maaß und A. Rieder, *Wavelets – Theorie und Anwendungen* (B. G. Teubner, Stuttgart, 1994).
- [LOVEJOY&MANDELBROT-85] S. Lovejoy und B. Mandelbrot, *Tellus* **37A**, 209 (1985).

- [LOVEJOY&SCHERTZER-91] S. Lovejoy und D. Schertzer, *Nonlinear Variability in Geophysics: Scaling and Fractals* (Kluwer Academic Publ., Dordrecht, 1991).
- [LOVEJOY&SCHERTZER-95] S. Lovejoy und D. Schertzer, in: *New Uncertainty Concepts in Hydrology and Water Resources*, Hrsg.: Z. W. Kunzewicz (Cambridge Univ. Press, New York, 1995), Seite 61.
- [LUMMAetal-01] D. Lumma, M. A. Borthwick, P. Falus, L. B. Lurio und S. G. J. Mochrie, Phys. Rev. Lett. **86**, 2042 (2001).
- [MADSENetal-03] A. Madsen, J. Als-Nielsen und G. Grübel, Phys. Rev. Lett. **90**, 085701 (2003).
- [MAKSEetal-96] H. A. Makse, S. Havlin, M. Schwartz und H. E. Stanley, Phys. Rev. E **53**, 5445 (1996).
- [MALIKetal-98] A. Malik, A. R. Sandy, L. B. Lurio, G. B. Stephenson, S. G. J. Mochrie, I. McNulty und M. Sutton, Phys. Rev. Lett. **81**, 5832 (1998).
- [MALLAT-89] S. Mallat, IEEE Trans. Pattern Anal. and Machine Intell. **11**, 674 (1989).
- [MANDELBROT&VANNES-68] B. B. Mandelbrot und J. W. van Ness, SIAM Review **10**, 422 (1968).
- [MANDELBROT&WALLIS-68] B. B. Mandelbrot und J. R. Wallis, Wat. Resour. Res. **4**, 909 (1968).
- [MANDELBROT&WALLIS-69] B. B. Mandelbrot und J. R. Wallis, Wat. Resour. Res. **5**, 321 (1969).
- [MANDELBROT-71] B. B. Mandelbrot, Water Resour. Res. **7**, 543 (1971).
- [MANDELBROT-72] B. B. Mandelbrot, in: *Statistical Models and Turbulence*, Hrsg.: M. Rosenblatt und C. van Atta, Lecture Notes in Physics **12** (Springer, New York, 1972), Seite 333.
- [MANDELBROT-74] B. B. Mandelbrot, J. Fluid Mech. **62**, 331 (1974).
- [MANDELBROT-02] B. B. Mandelbrot, *Gaussian Self-Affinity and Fractals* (Springer, Berlin, 2002).
- [MANNetal-99] M. E. Mann, R. S. Bradley und M. K. Hughes, Geophys. Res. Lett. **26**, 759 (1999).
- [MANN&JONES-03] M. E. Mann und P. D. Jones, Geophys. Res. Lett. **30**, 1820 (2003).
- [MANTEGNA&STANLEY-99] R. N. Mantegna und H. E. Stanley, *An introduction to econophysics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1999).
- [MARANI-03] M. Marani, Wat. Resour. Res. **39**, 1128 (2003).
- [MATSOUKASetal-00] C. Matsoukas, S. Islam und I. Rodriguez-Iturbe, J. Geophys. Res. **105** (D23), 29165 (2000).
- [MEEHLetal-03] G. A. Meehl, W. M. Washington, T. M. L. Wigley, J. M. Arblaster und A. Dai, J. Climate **16**, 426 (2003).
- [MEKOetal-01] D. M. Meko, M. D. Therrell, C. H. Baisan und M. K. Hughes, J. Amer. Wat. Resour. Assoc. **37**, 4 (2001).
- [MESA&POVEDA-93] O. J. Mesa und G. Poveda, Water Resour. Res. **29**, 3995 (1993).
- [MILIC-EMILI&GRUNSTEIN-76] J. Milic-Emili und M. M. Grunstein, Chest **70** (Suppl), 131 (1976).
- [MONTANARIetal-00] A. Montanari, R. Rosso und M. S. Taqqu, Wat. Resour. Res. **36**, 1249 (2000).
- [MOOREetal-01] J. J. Moore, K. A. Huguen, G. H. Miller und J. T. Overpeck, J. Paleolimnology **25**, 503 (2001).
- [MOSSetal-02] A. J. Moss, W. Zareba, W. J. Hall, H. Klein, D. J. Wilber, D. S. Cannom, J. P. Daubert, S. L. Higgins, M. W. Brown und M. L. Andrews, New Engl. J. Med. **346**, 877 (2002).
- [MUZYetal-91] J. F. Muzy, E. Bacry und A. Arneodo, Phys. Rev. Lett. **67**, 3515 (1991).
- [MUZYetal-93] J. F. Muzy, E. Bacry und A. Arneodo, Phys. Rev. E **47**, 875 (1993).
- [MUZYetal-94] J. F. Muzy, E. Bacry und A. Arneodo, Int. J. Bifurcat. Chaos **4**, 245 (1994).
- [MYERBURGetal-93] R. J. Myerburg, K. M. Kessler und A. Castellanos, Ann. Intern. Med. **119**, 1187 (1993).
- [MYERBURGetal-97] R. J. Myerburg, A. Interian, R. M. Mitrani, K. M. Kessler, A. Castellanos, Am. J. Cardiol. **80**, 10F (1997).
- [NAKAO-00] H. Nakao, Phys. Lett. A **266**, 282 (2000).
- [NEIMANetal-00] A. B. Neiman, D. F. Russell, X. Pei, W. Wojtenek, J. Twitty, E. Simonotto, B. A. Wetrting, E. Wagner, L. A. Wilkens und F. Moss, Int. J. Bifurcat. Chaos **10**, 2499 (2000).
- [NEWELL&ROSENBLATT-62] G. F. Newell und M. Rosenblatt, Ann. Math. Statist. **33**, 1306 (1962).
- [NORMANetal-00] R. G. Norman, I. Pal, C. Stewart, J. A. Walsleben und D. M. Rapoport, Sleep **23**, 901 (2000).
- [OLSSONetal-99] J. Olsson, V. P. Singh und K. Jinno, J. Geophys. Res. **104** (D16), 19117 (1999).

- [OSAMURAetal-88] K. Osamura, H. Okuda, Y. Amemiya und H. Hashizume, *Metall. Mater. Trans. A* **19**, 1973 (1988).
- [OSSADNIKetal-94] S. M. Ossadnik, S. B. Buldyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, R. N. Mantegna, C.-K. Peng, M. Simons und H. E. Stanley, *Biophys. J.* **67**, 64 (1994).
- [OVERPECKetal-97] J. Overpeck, K. Hughen, D. Hardy, R. Bradley, R. Case, M. Douglas, B. Finney, K. Gajewski, G. Jacoby, A. Jennings, S. Lamoureux, A. Lasca, G. MacDonald, J. Moore, M. Retelle, S. Smith, A. Wolfe und G. Zielinski, *Science* **278**, 1251 (1997).
- [PALMER-00] T. N. Palmer, *Rep. Prog. Phys.* **63**, 71 (2000).
- [PANDEYetal-98] G. Pandey, S. Lovejoy und D. Schertzer, *J. Hydrol.* **208**, 62 (1998).
- [PANG&TZENG-03] N.-N. Pang und W.-J. Tzeng, Preprint eingereicht bei *Phys. Rev. E* (2003).
- [PARKERetal-94] D. E. Parker, P. D. Jones, C. K. Folland und A. Bevan, *J. Geophys. Res.* **99**, 14373 (1994).
- [PEITGENetal-92] H.-O. Peitgen, H. Jürgens und D. Saupe, *Chaos and fractals* (Springer, New York, 1992), Anhang B.
- [PELLETIER-97] J. D. Pelletier, *J. Clim.* **10**, 1331 (1997).
- [PELLETIER&TURCOTTE-97] J. D. Pelletier und D. L. Turcotte, *J. Hydrol.* **203**, 198 (1997).
- [PELLETIER-98] J. D. Pelletier, *Earth Plan. Sci. Lett.* **158**, 157 (1998).
- [PENGetal-92] C.-K. Peng, S. V. Buldyrev, A. L. Goldberger, S. Havlin, F. Sciortino, M. Simons, und H. E. Stanley, *Nature* **356**, 168 (1992).
- [PENGetal-93] C.-K. Peng, J. Mietus, J. M. Hausdorff, S. Havlin, H. E. Stanley und A. L. Goldberger, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1343 (1993).
- [PENGetal-94] C.-K. Peng, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. Simons, H. E. Stanley und A. L. Goldberger, *Phys. Rev. E* **49**, 1685 (1994).
- [PENGetal-95] C.-K. Peng, S. Havlin, H. E. Stanley und A. L. Goldberger, *Chaos* **5**, 82 (1995).
- [PENGetal-99] C.-K. Peng, J. M. Hausdorff, S. Havlin, J. E. Mietus, H. E. Stanley und A. L. Goldberger, *Physica A* **249**, 491 (1998).
- [PENZEL-95] T. Penzel, *Pathophysiologie schlafbezogener Atmungsstörungen*, Habilitationsschrift (Roderer, Regensburg, 1995).
- [PENZELetal-99] T. Penzel, A. Bunde, J. Heitmann, J. W. Kantelhardt, J. H. Peter und K.-H. Voigt, *Computers in Cardiology* **26**, 249 (1999).
- [PENZELetal-02] T. Penzel, J. McNames, P. de Chazal, B. Raymond, A. Murray und G. Moody, *Med. Biol. Eng. Comput.* **40**, 402 (2002).
- [PENZELetal-03a] T. Penzel, J. W. Kantelhardt, L. Grote, J.-H. Peter und A. Bunde, *IEEE Transact. Biomed. Eng.* **50**, 1143 (2003).
- [PENZELetal-03b] T. Penzel, J. W. Kantelhardt, C.-C. Lo, K. Voigt und C. F. Vogelmeier, *Neuropsychopharmacology* **28** (Suppl.), 48 (2003).
- [PENZELetal-03c] T. Penzel, P.-G. Behler, M. v. Buttlar, R. Conradt, M. Meier, A. Möller und H. Danker-Hopfe, *Somnologie* **7**, 49 (2003).
- [PENZELetal-04] T. Penzel, J. W. Kantelhardt, S. Rostig, H. F. Becker, A. Bunde, C. Vogelmeier, Preprint (2004).
- [PETERSetal-02] O. Peters, C. Hertlein und K. Christensen, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 018701 (2002).
- [PETERS&CHRISTENSEN-02] O. Peters und K. Christensen, *Phys. Rev. E* **66**, 036120 (2002).
- [PETITetal-99] J. R. Petit, J. Jouzel, D. Raynaud, N. I. Barkov, J. M. Barnola, I. Basile, M. Bender, J. Chappellaz, J. Davis, G. Delaygue, M. Delmotte, V. M. Kotlyakov, M. Legrand, V. Lipenkov, C. Lorius, L. Pépin, C. Ritz, E. Saltzman und M. Stievenard, *Nature* **399**, 429 (1999).
- [POPPER-51] W. Popper, *The Cairo Nilometer*, in: *Publications in Semitic Philology* **12** (University of California, Berkeley, 1951).
- [POTTER-76] K. W. Potter, *Water Resour. Res.* **12**, 1047 (1976).
- [PROCTORetal-02] C. J. Proctor, A. Baker und W. L. Barnes, *Climate Dynamics* **19**, 449 (2002).
- [PROKHOROVetal-03] M. D. Prokhorov, V. I. Ponomarenko, V. I. Gridnev, M. B. Bodrov und A. B. Bespyatov, *Phys. Rev. E* **68**, 041913 (2003).
- [RAETZ-91] S. L. Raetz, C. A. Richard, A. Garfinkel und R. M. Harper, *Sleep* **14**, 526 (1991).
- [RAFFERTY&GARDNER-96] G. F. Rafferty und W. N. Gardner, *J. Appl. Physiology* **81**, 1744 (1996).
- [RAHMSTORF-03] S. Rahmstorf, *Klimawandel – Rote Karte für die Leugner*, Bild der Wissenschaften, Heft 1 (2003).

- [RANGARAJAN&DING-00] G. Rangarajan und M. Ding, Phys. Rev. E **61**, 4991 (2000).
- [RATNAM&NELSONetal-00] R. Ratnam und M. E. Nelson, J. Neuroscience **20**, 6672 (2000).
- [RAYNERetal-03] N. A. Rayner, D. E. Parker, E.B. Horton, C. K. Folland, L. V. Alexander, D. P. Rowell, A. Kaplan und E.C. Kent, J. Geophys. Res. **108** (D14), 4407 (2003).
- [REDWOODetal-97] S. R. Redwood, O. Odemuyiwa, K. Hnatkova, A. Staunton, I. Poloniecki, A. J. Camm und M. Malik, Eur Heart J. **18**, 1278 (1997).
- [REYNOLDS&MARSICO-93] R. Reynolds und D. Marsico, J. Climate **6**, 114 (1993).
- [REYNOLDS&SMITH-94] R. Reynolds und T. Smith, J. Climate **7**, 929 (1994).
- [ROCHE-99] Roche Lexikon Medizin, 4. Aufl. (Urban & Fischer, München, 1999).
- [RODRIGUEZ-ITURBE&RINALDO-97] I. Rodriguez-Iturbe und A. Rinaldo, *Fractal River Basins - Change and Self-Organization* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1997).
- [ROECKNERetal-96] E. Roeckner *et al.*, Max-Planck-Institut für Meteorologie, Report No. 218 (Hamburg, 1996).
- [ROSASetal-02] A. Rosas, E. Nogueira, Jr., und J. F. Fontanari, Phys. Rev. E **66**, 061906 (2002).
- [ROSENBLUMetal-02] M. G. Rosenblum, L. Cimonieriu, A. Bezerianos, A. Patzak, R. Mrowka, Phys. Rev. E **65**, 041909 (2002).
- [ROSTIGetal-04] S. Rostig, J. W. Kantelhardt, T. Penzel, W. Cassel, J. H. Peter, C. Vogelmeier, H. F. Becker, Preprint eingereicht bei Europ. Respir. J. (2004).
- [ROUSSEL&BELLON-01] J.-M. Roussel und P. Bellon, Phys. Rev. B **63**, 184114 (2001).
- [RUSSELetal-99] D. F. Russell, L. A. Wilkens und F. Moss, Nature **402**, 219 (1999).
- [RYBSKI-02] D. Rybski, *Trendbereinigende Fluktuationsanalyse von Niederschlagszeitreihen*, Diplomarbeit, Universität Gießen, 2002.
- [SALASetal-79] J. D. Salas, D. C. Boes, V. Yevjevich und G. G. S. Pegram, J. Hydrol., **44**, 1 (1979).
- [SCAFETTA&GRIGOLINI-02] N. Scafetta und P. Grignolini, Phys. Rev. E **66**, 036130 (2002).
- [SCAFETTA&WEST-03] N. Scafetta und B. J. West, Phys. Rev. Lett. **90**, 248701 (2003).
- [SCHÄFERetal-95] K. Schäfer, H. A. Braun, R. C. Peters und F. Bretschneider, Pflügers Archiv, Eur. J. Physiol. **429**, 378 (1995).
- [SCHÄFERetal-98] C. Schäfer, M. G. Rosenblum, J. Kurths und H.-H. Abel, Nature **392**, 239 (1998).
- [SCHÄFERetal-99] C. Schäfer, M. G. Rosenblum, H.-H. Abel und J. Kurths, Phys. Rev. E **60**, 857 (1999).
- [SCHERTZER&LOVEJOY-87] D. Schertzer und S. Lovejoy, J. Geophys. Res. **92**, 9693 (1987).
- [SCHREIBER&SCHMITZ-96] T. Schreiber und A. Schmitz, Phys. Rev. Lett. **77**, 635 (1996).
- [SCHREIBER&SCHMITZ-00] T. Schreiber und A. Schmitz, Physica D **142**, 346 (2000).
- [SHLESINGERetal-87] M. F. Shlesinger, B. J. West und J. Klafter, Phys. Rev. Lett. **58**, 1100 (1987).
- [SIVAPALANetal-02] M. Sivapalan, C. Jothityangkoon und M. Menabde, Wat. Resour. Res. **38**, 1012 (2002).
- [SOONetal-01] W. Soon, S. Baliunas, S. B. Idso, K. Y. Kondratyev und E. S. Posmentier, Climate Res. **18**, 259 (2001).
- [SORNETTE&KNOPOFF-97] D. Sornette und L. Knopoff, Bull. Seism. Soc. Am. **87**, 789 (1997).
- [STADLERetal-03] L. M. Stadler, B. Sepiol, R. Weinkamer, M. Hartmann, P. Frantzl, J. W. Kantelhardt, F. Zontone, G. Grübel und G. Vogl, Phys. Rev. B **68**, 180101(R) (2003).
- [STADLERetal-04] L.-M. Stadler, B. Sepiol, J. W. Kantelhardt, I. Zizak, G. Grübel und G. Vogl, Phys. Rev. B **69**, 224301 (2004).
- [STAHLE&CLEAVELAND-92] D. W. Stahle und M. K. Cleaveland, Bul. Am. Meteorol. Soc. **73**, 1947 (1992).
- [STAUDACHERetal-03] M. Staudacher, S. Telser, A. Amann, H. Hinterhuber und M. Ritsch-Marte, Preprint eingereicht bei Europhys. Lett. (2003).
- [STOLWIJKetal-80] N. A. Stolwijk, M. van Gend und H. Bakker, Philos. Mag. A **42**, 783 (1980).
- [SUTTONetal-91] M. Sutton, E. E. Nagler, S. G. Mochrie, T. Greytak, L. E. Bermann, G. Held und G. B. Stephenson, Nature **352**, 608 (1991).
- [TALKNER&WEBER-00] P. Talkner und R. O. Weber, Phys. Rev. E **62**, 150 (2000).
- [TANetal-03] M. Tan, T. S. Liu, J. Hou, X. Qin, H. Zhang und T. Li, Geophys. Res. Lett. **30**, 1617 (2003).
- [TAQQUetal-95] M. S. Taqqu, V. Teverovsky und W. Willinger, Fractals **3**, 785 (1995).
- [TASKFORCE-96] *Task force of the European Society of Cardiology and the North American Society of Pacing and Electrophysiology*, Circulation **93**, 1043 (1996).

- [TELSERetal-04] S. Telser, M. Staudacher, Y. Ploner, A. Amann, H. Hinterhuber und M. Ritsch-Marte, *Somnologie* **8**, 33 (2004).
- [TESSIERetal-93] Y. Tessier, S. Lovejoy und D. Schertzer, *J. Appl. Meteorol.* **32**, 223 (1993).
- [TESSIERetal-96] Y. Tessier, S. Lovejoy, P. Hubert, D. Schertzer und S. Pecknold, *J. Geophys. Res. Atmosph.* **101** (D21), 26427 (1996).
- [THURN-ALBERECHTetal-96] T. Thurn-Albrecht, W. Steffen, A. Patkowski, G. Meier, E. W. Fischer, G. Grübel und D. L. Abernathy, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5437 (1996).
- [THURN-ALBERECHTetal-03] T. Thurn-Albrecht, F. Zontone, G. Grübel, W. Steffen, P. Müller-Buschbaum und A. Patkowski, *Phys. Rev. E* **68**, 031407 (2003).
- [TOBINetal-88] M. J. Tobin, M. J. Mador, S. M. Guenther, R. F. Lodato und M. A. Sackner, *J. Appl. Physiology* **65**, 309 (1988).
- [TOUCHANetal-03] R. Touchan, G. M. Garfin, D. M. Meko, G. Funkhouser, N. Erkan, M. K. Hughes und B. S. Wallin, *Int. J. Climatology* **23**, 157 (2003).
- [TOUSSON-25] O. Tousson, *Mémoire sur l'Histoire du Nil*, Mémoire de l'Institute d'Egypte **18**, 366 (1925).
- [TURCOTTE&GREENE-93] D. L. Turcotte und L. Greene, *Stoch. Hydrol. Hydraul.* **7**, 33 (1993).
- [VERRIERetal-96] R. L. Verrier, J. E. Muller und J. L. Hobson, *Cardiovasc. Res.* **31**, 181 (1996).
- [VISWANATHANetal-97] G. M. Viswanathan, C.-K. Peng, H. E. Stanley und A. L. Goldberger, *Phys. Rev. E* **55**, 845 (1997).
- [VISWANATHANetal-98] G. M. Viswanathan, S. V. Buldyrev, S. Havlin und H. E. Stanley, *Physica A* **249**, 581 (1998).
- [VJUSHINetal-01] D. Vyushin, R. B. Govindan, R. A. Monetti, S. Havlin und A. Bunde, *Physica A* **302**, 234 (2001).
- [VJUSHINetal-02] D. Vyushin, R. B. Govindan, S. Brenner, A. Bunde, S. Havlin und H.-J. Schellnhuber, *J. Phys. (Cond. Mat.)* **14**, 2275 (2002).
- [VJUSHINetal-04] D. Vyushin, I. Zhidkov, S. Havlin, A. Bunde und S. Brenner, Preprint physics/0401143 (2004).
- [VONOMMEN&DEMIRANDA-81] A. H. van Ommen und J. de Miranda, *Philos. Mag. A* **43**, 387 (1981).
- [VONSTORCH&ZWIERS-02] H. von Storch und F. W. Zwiers, *Statistical Analysis in Climate Research* (Cambridge Univ. Press, 2002).
- [VOSS-85] R. F. Voss, in: *Fundamental algorithms in computer graphics*, Hrsg.: R. A. Earnshaw (Springer-Verlag, Berlin, 1985).
- [VOSS-92] R. F. Voss, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3805 (1992).
- [WASHINGTONetal-00] W. M. Washington, J. W. Weatherly, G. A. Meehl, A. J. Semtner, T. W. Bettge, A. P. Craig, W. G. Strand, J. Arblaster, V. B. Wayland, R. James und Y. Zhang, *Climate Dynamics* **16**, 755 (2000).
- [WEBER&TALKNER-01] R. O. Weber und P. Talkner, *J. Geophys. Res.* **106** (D17), 20141 (2001).
- [WEINKAMERetal-98] R. Weinkamer, P. Fratzl, B. Sepiol und G. Vogl, *Phys. Rev. B* **58**, 3082 (1998).
- [WEINKAMER&FRANTZL-03] R. Weinkamer und P. Fratzl, *Europhys. Lett.* **61**, 261 (2003).
- [WHITCHERetal-02] B. Whitcher, S. D. Byers, P. Guttorp und D. B. Percival, *Wat. Resour. Res.* **38**, 12 (2002).
- [WILKENS-88] L. A. Wilkens, *Comp. Biochem. Physiol.* **91**, 61 (1988).
- [WILKENS&DOUGLASS-94] L. A. Wilkens und J. Douglass, *J. Exp. Biol.* **189**, 263 (1994).
- [WILKENSetal-97] L. A. Wilkens, D. F. Russell, X. Pei und C. Gurgens, *Proc. Roy. Soc. (Lond.)* **264**, 1723 (1997).
- [WINE-84] J. J. Wine, *J. Exp. Biol.* **112**, 283 (1984).
- [WITHNEYetal-98] C. W. Whitney, D. J. Gottlieb, S. Redline, R. G. Norman und R. R. Dodge, *Sleep* **21**, 749 (1998).
- [WOLFFetal-97] J.-O. Wolff, E. Maier-Reimer und S. Legutke, Deutsches Klima-Rechenzentrum, Report No. 13 (Hamburg, 1997).
- [WOODHOUSE-00] C. Woodhouse, *Wat. Resour. Impact* **2**, 25 (2000).
- [YE&LU-03] D. Z. Ye und J. H. Lu, *Prog. Nat. Sci.* **13**, 241 (2003).
- [YUetal-01] Z.-G. Yu, V. Anh und K.-S. Lauc, *Physica A* **301**, 351 (2001).
- [ZEMAITYTEetal-86] D. Zemaityte, G. Varoneckas, K. Plauska und J. Kaukenas, *Int. J. Psychophysiol.* **4**, 129 (1986).
- [ZSCHIEGNER-02] S. Zschiegner, *Trendbeseitigende Multifraktalanalyse: Methodenentwicklung und Anwendung auf künstliche und reale Zeitreihen*, Diplomarbeit, Universität Gießen

- (2002).  
 [ZSCHIEGNERetal-04] S. Zschiegner, J. W. Kantelhardt, T. Penzel, A. Bunde und S. Havlin, Preprint (2004).  
 [ZUANETTIetal-96] G. Zuanetti, J. M. Neilson, R. Latini, E. Santoro, A. P. Maggioni und D. J. Ewing, *Circulation* **94**, 432 (1996).

### V.B. Literaturverzeichnis für Teil III

- [ABRAHAMSetal-79] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello und T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).  
 [ABRAHAMSetal-01] E. Abrahams, S. V. Kravchenko und M. P. Sarachik, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 251 (2001).  
 [ALEINERetal-02] I. L. Aleiner, P. W. Brouwer und I. L. Glazman, *Phys. Rep.* **358**, 309 (2002).  
 [ALHASSID-00] Y. Alhassid, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 895 (2000).  
 [ALTSHULERetal-80] B. L. Altshuler, D. Khmelnitzkii, A. I. Larkin und P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **22**, 5142 (1980).  
 [ALTSHULER&SHKLOVSKII-86] B. L. Altshuler und B. Shklovskii, *Sov. Phys. JETP* **64**, 127 (1986).  
 [ALTSHULERetal-88] B. L. Altshuler, I. Kh. Zharekeshev, S. A. Kotochigova und B. I. Shklovskii, *Sov. Phys. JETP* **67**, 625 (1988).  
 [ALTSHULER&MASLOV-99] B. L. Altshuler und D. L. Maslov, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 145 (1999).  
 [ANDERSON-58] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).  
 [ANDERSONetal-80] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams und D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **22**, 3519 (1980).  
 [AUBRY&ANDRE-80] S. Aubry und G. Andre, *Ann. Isr. Phys. Soc.* **3**, 133 (1980).  
 [BATSCH-97] M. Batsch, *Numerical studies on level statistics of electrons in disordered solids*, Dissertation, Universität Hamburg, 1997.  
 [BELITZetal-01] D. Belitz, T. R. Kirkpatrick, M. T. Mercaldo und S. L. Sessions, *Phys. Rev. B* **63**, 174428 (2001).  
 [BELLANIetal-99] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, C. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame und R. Gómez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2159 (1999).  
 [BENENTIetal-99] G. Benenti, X. Waintal und J.-L. Pichard, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1826 (1999).  
 [BENENTIetal-00] G. Benenti, X. Waintal und J.-L. Pichard, *Europhys. Lett.* **51**, 89 (2000).  
 [BENENTI&SHEPELYANSKY-01] G. Benenti und D. L. Shepelyansky, *Phys. Rev. B* **63**, 235103 (2001).  
 [BERKOVITS-94] R. Berkovits, *Europhys. Lett.* **25**, 681 (1994).  
 [BERKOVITS&AVISHAI-96] R. Berkovits und Y. Avishai, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 291 (1996).  
 [BERKOVITS&AVISHAI-98] R. Berkovits und Y. Avishai, *Phys. Rev. B* **57**, R15076 (1998).  
 [BERKOVITS&SIVAN-98] R. Berkovits und U. Sivan, *Europhys. Lett.* **41**, 653 (1998).  
 [BERKOVITSetal-01] R. Berkovits, J. W. Kantelhardt, Y. Avishai, S. Havlin und A. Bunde, *Phys. Rev. B* **63**, 085102 (2001).  
 [BERKOVITS&KANTELHARDT-02a] R. Berkovits und J. W. Kantelhardt, *Phys. Rev. B* **65**, 125308 (2002).  
 [BERKOVITS&KANTELHARDT-02b] R. Berkovits und J. W. Kantelhardt, *Phys. stat. sol. B* **330**, 101 (2002).  
 [BERKOVITSetal-04] R. Berkovits, F. v. Oppen und J. W. Kantelhardt, Preprint (2004).  
 [BISHOPetal-80] D. J. Bishop, D. C. Tsui und R. C. Dynes, *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1153 (1980).  
 [BRODYetal-81] T. A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey und S. S. M. Wong, *Rev. Mod. Phys.* **53**, 385 (1981).  
 [BROJEN-SINGH&KUMAR-02] R. K. Brojen Singh und D. Kumar, *Phys. Rev. B* **66**, 075123 (2002).  
 [BROJEN-SINGH&KUMAR-04] R. K. Brojen Singh und D. Kumar, *Phys. Rev. B* **69**, 115420 (2004).  
 [BUNDEetal-00] A. Bunde, S. Havlin, J. W. Kantelhardt, S. Ruß und I. Webman, *J. Molecular Liquids* **86**, 151 (2000).  
 [BÜTTIKER-86] M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761 (1986).  
 [CAINetal-99] P. Cain, R. A. Römer und M. Schreiber, *Ann. Phys. (Leipzig)* **8**, SI33 (1999).  
 [CARPENAetal-02] P. Carpena, P. B. Galvan, P. Ch. Ivanov und H. E. Stanley, *Nature* **418**, 955 (2002).  
 [CARPENAetal-03] P. Carpena, P. B. Galvan, P. Ch. Ivanov und H. E. Stanley, *Nature* **421**, 764 (2003).  
 [CASTELLANIetal-98] C. Castellani, C. DiCastro und P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **57**, 9381 (1998).  
 [CHAKRAVARTYetal-98] S. Chakravarty, L. Yin und E. Abrahams, *Phys. Rev. B* **58**, 559 (1998).

- [CHANGetal-96] A. M. Chang, H. U. Baranger, L. N. Pfeiffer, K. W. West und T. Y. Chang, Phys. Rev. Lett. **76**, 1695 (1996).
- [COLERIDGEetal-97] P. T. Coleridge, R. L. Williams, Y. Feng und P. Zawadzki, Phys. Rev. B **56**, R12764 (1997).
- [COSTA-SANTOS-03] R. Costa-Santos, Phys. Rev. B **68**, 224423 (2003).
- [CUEVAS-99] E. Cuevas, Phys. Rev. Lett. **83**, 140 (1999).
- [CUEVAS-02] E. Cuevas, M. Ortuno, V. Gasparian und A. Perez-Garrido, Phys. Rev. Lett. **88**, 016401 (2002).
- [CUEVAS-03a] E. Cuevas, Phys. Rev. B **68**, 024206 (2003).
- [CUEVAS-03b] E. Cuevas, Phys. Rev. B **68**, 184206 (2003).
- [CULLUM&WILLOUGHBY-85] J. Cullum und R. Willoughby, *Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalue computations*, Volume 1: *Theory*, Volume 2: *Programs*, Progress in Scientific Computing, (Birkhäuser, Boston, 1985).
- [DASSARMA&HWANG-99] S. Das Sarma und E. H. Hwang, Phys. Rev. Lett. **83**, 164 (1999).
- [DASSARMA&HWANG-00] S. Das Sarma und E. H. Hwang, Phys. Rev. Lett. **84**, 5596 (2000).
- [DASSARMA&HWANG-03] S. Das Sarma und E. H. Hwang, Phys. Rev. B **68**, 195315 (2003).
- [DEMOURAetal-98] F. A. B. F. de Moura und M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3735 (1998).
- [DEMOURAetal-99] F. A. B. F. de Moura und M. L. Lyra, Physica A **266**, 465 (1999).
- [DEMOURAetal-03] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo und M. L. Lyra, Phys. Rev. B **68**, 012202 (2003).
- [DENTENEERetal-99] P. J. H. Denteneer, R. T. Scalettar und N. Trivedi, Phys. Rev. Lett. **83**, 4610 (1999).
- [DENTENEER&SCALETAR-03] P. J. H. Denteneer und R. T. Scalettar, Phys. Rev. Lett. **90**, 246401 (2003).
- [DEQUEIROZ-02] S. L. A. de Queiroz, Phys. Rev. B **66**, 195113 (2002).
- [DERRIDAetal-87] B. Derrida, K. Mecheri und J. L. Pichard, J. Phys. (Paris) **48**, 733 (1987).
- [DEYCHetal-98] L. I. Deych, D. Zaslavsky und A. A. Lisyansky, Phys. Rev. Lett. **81**, 5390 (1998).
- [DEYCHetal-00] L. I. Deych, A. A. Lisyansky und B. L. Altshuler, Phys. Rev. Lett. **84**, 2678 (2000).
- [DEYCHetal-01] L. I. Deych, A. A. Lisyansky und B. L. Altshuler, Phys. Rev. B **64**, 224202 (2001).
- [DEYCHetal-02] L. I. Deych, M. V. Erementchouk und A. A. Lisyansky, Phys. Rev. Lett. **90**, 126601 (2002).
- [DEYCHetal-03] L. I. Deych, M. V. Erementchouk, A. A. Lisyansky und B. L. Altshuler, Phys. Rev. Lett. **91**, 096601 (2003).
- [DICKE-53] R. H. Dicke, Phys. Rev. **89**, 472 (1953).
- [DICKE-54] R. H. Dicke, Phys. Rev. **93**, 99 (1954).
- [DOBROSAVLJEVICetal-97] V. Dobrosavljevic, E. Abrahams, E. Miranda und S. Chakravarty, Phys. Rev. Lett. **79**, 455 (1997).
- [DOLAN&OSHEROFF-79] G. J. Dolan und D. D. Osheroff, Phys. Rev. Lett. **43**, 721 (1979).
- [DOLGOPOLOVetal-92] V. T. Dolgoplov, G. V. Kravchenko, A. A. Shashkin und S. V. Kravchenko, JETP Lett. **55**, 733 (1992).
- [DOLGOPOLOV&GOLD-00] V. T. Dolgoplov und A. Gold, JETP Lett. **71**, 27 (2000).
- [DOMINGUEZ-ADAMEetal-03] F. Dominguez-Adame, V. A. Malyshev, F. F. A. B. F. de Moura und M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **91**, 197402 (2003).
- [DUNLAPetal-90] D. H. Dunlap, H.-L. Wu und P. W. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990).
- [DYSON-62] F. J. Dyson, J. Math. Phys. **3**, 140 (1962).
- [ECONOMOU-90] E. N. Economou, *Green's functions in quantum physics*, 2. Aufl. (Springer, Berlin, 1990).
- [EFETOV-83] K. B. Efetov, Adv. Phys. **32**, 53 (1983).
- [EFROS&PIKUS-95] A. L. Efros und F. G. Pikus, Sol. Stat. Comm. **96**, 183 (1995).
- [EILMESetal-98] A. Eilmes, R. A. Römer und M. Schreiber, Eur. Phys. J. B **1**, 29 (1998).
- [EVANGELOU-90] S. N. Evangelou, Physica A **167**, 199 (1990).
- [EVERS&MIRLIN-00] F. Evers und A. D. Mirlin, Phys. Rev. Lett. **84**, 3690 (2000).
- [EVERSetal-01] F. Evers, A. Mildenberger und A. D. Mirlin, Phys. Rev. B **64**, 241303 (2001).
- [FLORES&HILKE-93] J. C. Flores und M. Hilke, J. Phys. A **26**, L1255 (1993).
- [FOLKetal-96] J. A. Folk, S. R. Patel, S. F. Godijn, A. G. Huibers, S. M. Cronenwett, C. M. Marcus, K. Campman und A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. **76**, 1699 (1996).

- [FOLKetal-01] J. A. Folk, C. M. Marcus, R. Berkovits, I. L. Kurland, I. L. Aleiner und B. L. Altshuler, *Physica Scripta* **T90**, 26 (2001).
- [GAOetal-02] X. P. A. Gao, A. P. Mills, A. P. Ramirez, L. N. Pfeiffer und K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 016801 (2002).
- [GOLDSTEIN&BERKOVITS-03] M. Goldstein und R. Berkovits, *Phys. Rev. B* **68**, 245116 (2003).
- [GRUSSBACH&SCHREIBER-95] H. Grussbach und M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **51**, 663 (1995).
- [GUHRetal-98] T. Guhr, A. Müller-Groeling und H. A. Weidenmüller, *Phys. Reports* **299**, 189 (1998).
- [GULÁCSI-04] Z. Gulácsi, *Phys. Rev. B* **69**, 054204 (2004).
- [HAMILTONetal-99] A. R. Hamilton, M. Y. Simmons, M. Pepper, E. H. Linfield, P. D. Rose und D. A. Ritchie, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1542 (1999).
- [HANEINetal-98] Y. Hanein, U. Meirav, D. Shahar, C. C. Li, D. C. Tsui und H. Shtrikman, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1288 (1998).
- [HAVLINetal-88] S. Havlin, R. B. Selinger, M. Schwartz, H. E. Stanley und A. Bunde, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1438 (1988).
- [HE&XIE-98] S. He und X. C. Xie, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3324 (1998).
- [HIKAMIetal-80] S. Hikami, A. I. Larkin und Y. Nagaoka, *Prog. Theor. Phys.* **63**, 707 (1980).
- [HILKE&FLORES-97] M. Hilke und J. C. Flores, *Phys. Rev. B* **55**, 10625 (1997).
- [HILKE-03] M. Hilke, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 226403 (2003).
- [HIRAMOTO&KOHMOTO-92] H. Hiramoto und M. Kohmoto, *Int. J. Mod. Phys. B* **6**, 281 (1992).
- [HOFFMANN&SCHREIBER-96] K. H. Hoffmann und M. Schreiber, *Springer Series in Computational Physics: Proceedings of the WE-Heraeus-Summerschool 1995* (Springer-Verlag, Berlin, 1996).
- [HOFSTETTER&SCHREIBER-93] E. Hofstetter und M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **48**, 16979 (1993).
- [HOFSTETTER&SCHREIBER-94] E. Hofstetter und M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **49**, 14726 (1994).
- [HUANGetal-97] X. Huang, X. Wu und C. Gong, *Phys. Rev. B* **55**, 11018 (1997).
- [HUBBARD-63] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. London Ser. A* **276**, 238 (1963).
- [HUCKESTEIN&SCHWEITZER-94] B. Huckestein und L. Schweitzer, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 713 (1994).
- [HUCKESTEIN&KLESSE-97] B. Huckestein und R. Klesse, *Phys. Rev. B* **55**, R7303 (1997).
- [IMADAetal-98] M. Imada, A. Fujimori und Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
- [ISHII-73] K. Ishii, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53**, 77 (1973).
- [IZRAILEVetal-96] F. M. Izrailev, T. Kottos und G. P. Tsironis, *J. Phys. Cond. Mat.* **8**, 2823 (1996).
- [IZRAILEV&KROKHIN-99] F. M. Izrailev und A. A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999).
- [IZRAILEVetal-01] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin und S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **63**, 041102 (2001).
- [IZRAILEV&MAKAROV-03] F. M. Izrailev und N. M. Makarov, *Phys. Rev. B* **67**, 113402 (2003).
- [JANSSEN-98] M. Janssen, *Phys. Reports* **295**, 1 (1998).
- [JANSSEN&STENULL-03] H.-K. Janssen und O. Stenull, *Phys. Rev. E* **68**, 036131 (2003).
- [JANSSEN&STENULL-04] H.-K. Janssen und O. Stenull, *Phys. Rev. E* **69**, 016125 (2004).
- [JAROSZYNSKIetal-02] J. Jaroszynski, D. Popovic und T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 276401 (2002).
- [KAMALetal-95] M. Kamal, Z. H. Musslimani und A. Auerbach, *J. de Phys. I* **5**, 1481 (1995).
- [KANTELHARDTetal-95] J. W. Kantelhardt, H. E. Roman und M. Greiner, *Physica A* **220**, 219 (1995).
- [KANTELHARDT-99] J. W. Kantelhardt, *Lokalisierung und Delokalisierung in ungeordneten Festkörpern*, Dissertation, Justus-Liebig-Universität Gießen, 1999.
- [KANTELHARDTetal-00] J. W. Kantelhardt, S. Ruß, A. Bunde, S. Havlin und I. Webman, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 198 (2000).
- [KANTELHARDTetal-01] J. W. Kantelhardt, R. Berkovits und Y. Avishai, *Physica A* **302**, 359 (2001).
- [KANTELHARDT&BUNDE-02] J. W. Kantelhardt und A. Bunde, *Phys. Rev. B* **66**, 035118 (2002).
- [KAPPUS&WEGNER-81] M. Kappus und F. Wegner, *Z. Phys. B* **45**, 15 (1981).
- [KASTNER-92] M. A. Kastner, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 849 (1992).
- [KHRAPAIetal-03] V. S. Khrapai, A. A. Shashkin und V. T. Dolgoplov, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 126404 (2003).
- [KIRKPATRICK&BELITZ-00] T. R. Kirkpatrick und D. Belitz, *Phys. Rev. B* **62**, 966 (2000).
- [KLAPWIJK&DASSARMA-99] T. M. Klapwijk und S. Das Sarma, *Solid State Commun.* **110**, 581 (1999).
- [KOHMOTOetal-83] M. Kohmoto, L. P. Kadanoff und C. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1870 (1983).
- [KÖNIGetal-98] J. König, Y. Gefen und G. Schön, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4468 (1998).
- [KOTLYAR&DASSARMA-01] R. Kotlyar und S. Das Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2388 (2001).



- [KRAMER&MACKINNON-93] B. Kramer und A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).
- [KRAVCHENKOetal-94] S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov und M. D'Iorio, Phys. Rev. B **50**, 8039 (1994).
- [KRAVCHENKOetal-95] S. V. Kravchenko, W. E. Mason, G. E. Bowker, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov und M. D'Iorio, Phys. Rev. B **51**, 7038 (1995).
- [KRAVCHENKOetal-96] S. V. Kravchenko, D. Simonian, M. P. Sarachik, W. Mason und J. E. Furneaux, Phys. Rev. Lett. **77**, 4938 (1996).
- [KRAVCHENKOetal-98] S. V. Kravchenko, D. Simonian, M. P. Sarachik, A. D. Kent und V. M. Pudalov, Phys. Rev. B **58**, 3553 (1998).
- [KRAVCHENKO&SARACHIK-04] S. V. Kravchenko und M. P. Sarachik, Rep. Prog. Phys. **67**, 1 (2004).
- [KRAVTSOV&MUTTALIB-97] V. E. Kravtsov und K. A. Muttalib, Phys. Rev. Lett. **79**, 1913 (1997).
- [KUHLetal-00] U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. A. Krokhin und H.-J. Stöckmann, Appl. Phys. Lett. **77**, 633 (2000).
- [KURLANDetal-01] I. L. Kurland, R. Berkovits und B. L. Altshuler, Phys. Rev. Lett. **86**, 3380 (2001).
- [KUZOVOVetal-02] V. N. Kuzovov, W. von Niessen, V. Kashcheyevs und O. Hein O, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 13777 (2002).
- [LANCZOS-50] C. Lanczos, J. Res. Nat. Bur. Stand. **45**, 255 (1950).
- [LANDAUER-57] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 233 (1957).
- [LEBANONetal-03] E. Lebanon, A. Schiller und F. B. Anders, Phys. Rev. B **68**, 041311 (2003).
- [LEE&RAMAKRISHNAN-82] P. A. Lee und T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. B **26**, 4009 (1982).
- [LEE&RAMAKRISHNAN-85] P. A. Lee und T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).
- [LEVITOV-89] L.S. Levitov, Europhys. Lett. **9**, 83 (1989).
- [LEVITOV-90] L.S. Levitov, Phys. Rev. Lett. **64**, 547 (1990).
- [LILLIEHÖÖK&FURNEAUX-02] D. Lilliehöök und J. E. Furneaux, Phys. Rev. B **66**, 165328 (2002).
- [LIMAetal-02] R. P. A. Lima, M. L. Lyra, E. M. Nascimento und A. D. de Jesus, Phys. Rev. B **65**, 104416 (2002).
- [MACKINNON&KRAMER-81] A. MacKinnon und B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **47**, 1546 (1981).
- [MACKINNON&KRAMER-83] A. MacKinnon und B. Kramer, Z. Phys. B **53**, 1 (1983).
- [MARKOS-03] P. Markos, E-Mail Mitteilung (2003).
- [MARKOSetal-04] P. Markos, L. Schweitzer und M. Weyrauch, Preprint cond-mat/0402068 (2004).
- [MASONetal-95] W. Mason, S. V. Kravchenko, G. E. Bowker und J. E. Furneaux, Phys. Rev. B **52**, 7857 (1995).
- [MATVEEV-95] K. A. Matveev, Phys. Rev. B **51**, 1743 (1995).
- [MEIR&WINGREEN-92] Y. Meir und N. Wingreen, Phys. Rev. Lett. **68**, 2512 (1992).
- [MEIR-99] Y. Meir, Phys. Rev. Lett. **83**, 3506 (1999).
- [MEIR-01] Y. Meir, Phys. Rev. B **63**, 073108 (2001).
- [MERLINetal-85] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, F.-Y. Yuang und P. K. Bhattacharya, Phys. Rev. Lett. **55**, 1768 (1985).
- [MERTENSEtal-01] K. M. Mertes, H. Zheng, S. A. Vitkalov, P. Sarachik und T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **63**, 041101(R) (2001).
- [METHA-91] M. L. Metha, *Random Matrices* (Academic Press, Boston, 1991).
- [MILDENBERGERetal-02] A. Mildenberger, F. Evers und A. D. Mirlin, Phys. Rev. B **66**, 033109 (2002).
- [MIRLINetal-96] A. D. Mirlin, Y. V. Fyodorov, F. M. Dittes, J. Quezada und T. H. Seligman, Phys. Rev. E **54**, 3221 (1996).
- [MIRLIN-00] A. D. Mirlin, Phys. Rep. **326**, 260 (2000).
- [MIRLINetal-03] A. D. Mirlin, F. Evers und A. Mildenberger, J. Phys. A (Math.) **36**, 3255 (2003).
- [MOHANTY&WEBB-02] P. Mohanty und R. A. Webb, Phys. Rev. Lett. **88**, 146601 (2002).
- [MÜLLERetal-97] K. Müller, B. Mehlig, F. Milde und M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **78**, 215 (1997).
- [MUTTALIBetal-87] K. A. Muttalib, J.-L. Pichard und A. D. Stone, Phys. Rev. Lett. **59**, 2475 (1987).
- [NAKHMEDOV&MORAWETZ-02] E. P. Nakhmedov und K. Morawetz, Phys. Rev. B **66**, 195333 (2002).
- [NAZARENOetal-02] H. N. Nazareno, P. E. de Brito und E. S. Rodrigues, Phys. Rev. B **66**, 012205 (2002).
- [NIKOLIC-01] B. K. Nikolic, Phys. Rev. B **64**, 014203 (2001).
- [NITAetal-04] M. Nita, V. Dinu, A. Aldea und B. Tanatar, Phys. Rev. B **69**, 073106 (2004).
- [NOHetal-04] J. P. Noh, F. Shimogishi, Y. Idutsu und N. Otsuka, Phys. Rev. B **69**, 045321 (2004).
- [OBUSE&YAKUBO-04] H. Obuse und K. Yakubo, Phys. Rev. B **69**, 125301 (2004).

- [OKAMOTOetal-99] T. Okamoto, K. Hosoya, S. Kawaji und A. Yagi, Phys. Rev. Lett. **82**, 3875 (1999).
- [OSELEDEC-68] V. I. Oseledec, Trans. Moscow Math. Soc. **19**, 197 (1968).
- [OSTLUNDEtal-83] S. Ostlund, R. Pandit, D. Rand, H. J. Schellnhuber und E. D. Siggia, Phys. Rev. Lett. **50**, 1873 (1983).
- [PAPADAKIS&SHAYEGAN-98] S. J. Papadakis und M. Shayegan, Phys. Rev. B **57**, R15068 (1998).
- [PAPADAKISetal-99] S. J. Papadakis, E. P. De Poortere, H. C. Manoharan, M. Shayegan und R. Winkler, Science **283**, 2056 (1999).
- [PAPADAKISetal-00] S. J. Papadakis, E. P. De Poortere, M. Shayegan und R. Winkler, Phys. Rev. Lett. **84**, 5592 (2000).
- [PARSHIN&SCHOBER-99] D. A. Parshin und H. R. Schober, Phys. Rev. Lett. **83**, 4590 (1999).
- [PASCAUD&MONTAMBAUX-99] M. Pascaud und G. Montambaux, Phys. Rev. Lett. **83**, 1076 (1999).
- [PEPPERetal-74] M. Pepper, S. Pollitt und C. J. Adkins, J. Phys. C: Solid State Phys. **7**, L273 (1974).
- [PICHARD-86] J. L. Pichard, J. Phys. C **19**, 1519 (1986).
- [PIKUS&EFROS-94] F. G. Pikus und A. L. Efros, Sol. Stat. Comm. **92**, 485 (1994).
- [PILLARISSETTYetal-03] R. Pillarisetty, H. Noh, E. Tutuc, E. P. De Poortere, D. C. Tsui und M. Shayegan, Phys. Rev. Lett. **90**, 226801 (2003).
- [POPOVICetal-97] D. Popovic, A. B. Fowler und S. Washburn, Phys. Rev. Lett. **79**, 1543 (1997).
- [PORTER&THOMAS-56] C. E. Porter und R. G. Thomas, Phys. Rev. **104**, 483 (1956).
- [POTEMPA&SCHWEITZER-02] H. Potempa und L. Schweitzer, Phys. Rev. B **65**, 201105(R) (2002).
- [PROSKURYAKOVetal-02] Y. Y. Proskuryakov, A. K. Savchenko, S. S. Safonov, M. Pepper, M. Y. Simmons und D. A. Ritchie, Phys. Rev. Lett. **89**, 076406 (2002).
- [PUDALOVetal-97] V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz und G. Bauer, JETP Lett. **65**, 932 (1997).
- [PUDALOVetal-02] V. M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz und G. Bauer, Phys. Rev. Lett. **88**, 076401 (2002).
- [PUDALOVetal-03] V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, H. Kojima, G. Brunthaler, A. Prinz und G. Bauer, Phys. Rev. Lett. **91**, 126403 (2003).
- [PUNNOOSE&FINKELSTEIN-02] A. Punnoose und A. M. Finkelstein, Phys. Rev. Lett. **88**, 016802 (2002).
- [RAMINETal-95] M. Ramin, B. Reulet und H. Bouchiat, Phys. Rev. B **51**, 5582 (1995).
- [ROMAN&WIECKO-86] H. E. Roman und C. Wiecko, Z. Phys. B **62**, 163 (1986).
- [RÖMER&PUNNOOSE-95] R. A. Römer und A. Punnoose, Phys. Rev. B **52**, 14809 (1995).
- [ROSENSTEIN&MINHTIEN-03] B. Rosenstein und T. Minh-Tien, Phys. Rev. B **68**, 245321 (2003).
- [RUßetal-98] S. Ruß, S. Havlin und I. Webman, Philos. Mag B **77**, 1449 (1998).
- [RUßetal-99] S. Ruß, J. W. Kantelhardt, A. Bunde, S. Havlin und I. Webman, Physica A **266**, 492 (1999).
- [RUßetal-01] S. Ruß, J. W. Kantelhardt, A. Bunde und S. Havlin, Phys. Rev. B **64**, 134209 (2001).
- [RUB-02] S. Ruß, Phys. Rev. B **66**, 012204 (2002).
- [SARACHIK&KRAVCHENKO-99] M. P. Sarachik und S. V. Kravchenko, Proc. Natl. Acad. Sci. **96**, 900 (1999).
- [SCHOMERUS&TITOV-03] H. Schomerus und M. Titov, Phys. Rev. B **67**, 100201 (2003).
- [SCHREIBER-90] M. Schreiber, Physica A **167**, 188 (1990).
- [SCHREIBER&GRUSSBACH-91] M. Schreiber und H. Grussbach, Phys. Rev. Lett. **67**, 607 (1991).
- [SEDRAKYAN-04] T. Sedrakyan, Phys. Rev. B **69**, 085109 (2004).
- [SELVA&WEINMANN-00] F. Selva und D. Weinmann, Eur. Phys. J. B **18**, 137 (2000).
- [SELVA&PICHARD-01] F. Selva und J.-L. Pichard, Europhys. Lett. **55**, 518 (2001).
- [SENZetal-00] V. Senz, T. Heinzel, T. Ihn, K. Ensslin, G. Dehlinger, D. Gruetzmacher und U. Gennser, Phys. Rev. B **61**, R5082 (2000).
- [SHAHBAZYAN&RAIKH-94] T. V. Shahbazyan und M. E. Raikh, Phys. Rev. B **49**, 17123 (1994).
- [SHAHBAZYAN&ULLOA-98] T. V. Shahbazyan und S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **57**, 6642 (1998).
- [SHAPIRO-86] B. Shapiro, Phys. Rev. B **34**, 4396 (1986).
- [SHASHKINETal-01a] A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov und T. M. Klapwijk, Phys. Rev. Lett. **87**, 86801 (2001).
- [SHASHKINETal-01b] A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko und T. M. Klapwijk, Phys. Rev. Lett. **87**, 266402 (2001).
- [SHASHKINETal-02] A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov und T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **66**, 073303 (2002).

- [SHASHKINetal-03a] A. A. Shashkin, M. Rahimi, S. Anissimova, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov und T. M. Klapwijk, Phys. Rev. Lett. **91**, 046403 (2003).
- [SHASHKINetal-03b] A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov und T. M. Klapwijk, J. Phys. A **36**, 9237 (2003).
- [SHENG&WENG-99] D. N. Sheng und Z. Y. Weng, Phys. Rev. Lett. **83**, 144 (1999).
- [SHEPELYANSKY&SONG-99] D. L. Shepelyansky und P. H. Song, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 665 (1999).
- [SHEPELYANSKY-00] D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. B **61**, 4588 (2000).
- [SHKLOVSKIIetal-93] B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides und H. B. Shore, Phys. Rev. B **47**, 11487 (1993).
- [Sietal-98] Q. Si und C. M. Varma, Phys. Rev. Lett. **81**, 4951 (1998).
- [SIEBESMA&PIETRONERO-87] A. P. Siebesma und L. Pietronero, Europhys. Lett. **4**, 597 (1987).
- [SILVAetal-02] A. Silva, Y. Oreg und Y. Gefen, Phys. Rev. B **66**, 195316 (2002).
- [SILVESTROV&IMRY-00] P. Silvestrov und Y. Imry, Phys. Rev. Lett. **85**, 2565 (2000).
- [SIMMONSetal-00] M. Y. Simmons, A. R. Hamilton, M. Pepper, E. H. Linfield, P. D. Rose und D. A. Ritchie, Phys. Rev. Lett. **84**, 2489 (2000).
- [SIMMONSetal-98] M. Y. Simmons, A. R. Hamilton, M. Pepper, E. H. Linfield, P. D. Rose, D. A. Ritchie, A. K. Savchenko und T. G. Griffiths, Phys. Rev. Lett. **80**, 1292 (1998).
- [SIMONIANetal-97] D. Simonian, S. V. Kravchenko, M. P. Sarachik und V. M. Pudalov, Phys. Rev. Lett. **79**, 2304 (1997).
- [SLEVIN&OHTSUKI-99] K. Slevin und T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **82**, 382 (1999).
- [SOUKOULIS&ECONOMOU-84] C. M. Soukoulis und E. N. Economou, Phys. Rev. Lett. **52**, 565 (1984).
- [SPIVAK-01] B. Spivak, Phys. Rev. B **64**, 085317 (2001).
- [SPIVAK-03] B. Spivak, Phys. Rev. B **67**, 125205 (2003).
- [SRINIVASANetal-03] B. Srinivasan, G. Benenti und D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. B **67**, 205112 (2003).
- [STENULL&JANSSEN-03] O. Stenull und H.-K. Janssen, Phys. Rev. E **68**, 036129 (2003).
- [TALAMANTESetal-96] J. Talamanes, M. Pollak und L. Elam, Europhys. Lett. **35**, 511 (1996).
- [TALAMANTES&POLLAK-00] J. Talamantes und M. Pollak, Phys. Rev. B **62**, 12785 (2000).
- [TERAO-97] T. Terao, Phys. Rev. B **56**, 975 (1997).
- [THOULESS-79] D. J. Thouless, in: *Ill-Condensed Matter*, Hrsg.: R. Belian, R. Maynard und G. Toulouse (North-Holland, Amsterdam, 1979).
- [TITOV&SCHOMERUS-03] M. Titov und H. Schomerus, Phys. Rev. Lett. **91**, 176601 (2003).
- [URENetal-80] M. J. Uren, R. A. Davies und M. Pepper, J. Phys. C **13**, L985 (1980).
- [USKIetal-98] V. Uski, B. Mehlig und R. A. Römer, Ann. Phys. **7**, 437 (1998).
- [VAGNERetal-03] P. Vagner, P. Markos, M. Mosko und T. Schäpers, Phys. Rev. B **67**, 165316 (2003).
- [VARGA&PIPEK-98] I. Varga und J. Pipek, J. Phys. Cond. Mat. **10**, 305 (1998).
- [VARGA-02] I. Varga, Phys. Rev. B **66**, 094201 (2002).
- [VITKALOVetal-00] S. A. Vitkalov, H. Zheng, K. M. Mertes, M. P. Sarachik und T. M. Klapwijk, Phys. Rev. Lett. **85**, 2164 (2000).
- [VITKALOVetal-01] S. A. Vitkalov, H. Zheng, K. M. Mertes, M. P. Sarachik und T. M. Klapwijk, Phys. Rev. Lett. **87**, 86401 (2001).
- [VOJTAetal-98] T. Vojta, F. Epperlein und M. Schreiber, Phys. Rev. Lett. **81**, 4212 (1998).
- [VOJTAetal-00] T. Vojta, F. Epperlein, S. Kilina und M. Schreiber, phys. stat. sol. (b) **218**, 31 (2000).
- [WAINTAetal-99] X. Waintal, G. Benenti und J.-L. Pichard, Europhys. Lett. **49**, 466 (2000).
- [WAINTAetal-00] X. Waintal, G. Benenti, J. L. Pichard, Europhys. Lett. **49**, 466 (2000).
- [WANGetal-96] Q. H. Wang, Z. D. Wang und J. X. Zhu, Phys. Rev. B **54**, 8101 (1996).
- [WIEBEetal-03] J. Wiebe, Chr. Meyer, J. Klijn, M. Morgenstern und R. Wiesendanger, Phys. Rev. B **68**, 041402 (2003).
- [WIGNER-51] E. P. Wigner, Ann. Math. **53**, 36 (1951).
- [XIONGetal-03] Y. Xiong, X. C. Xie und S.-J. Xiong, Phys. Rev. B **67**, 140201 (2003).
- [YAISHetal-00] Y. Yaish, O. Prus, E. Buchstab, S. Shapira, G. Ben Yoseph, U. Sivan und A. Stern, Phys. Rev. Lett. **84**, 4954 (2000).
- [YAKUBO&ONO-98] K. Yakubo und M. Ono, Phys. Rev. B **58**, 9767 (1998).
- [YAMADA-04] H. Yamada, Phys. Rev. B **69**, 014205 (2004).
- [YOONetal-99] J. Yoon, C. C. Li, D. Shahar, D. C. Tsui und M. Shayegan, Phys. Rev. Lett. **82**,

- 1744 (1999).  
 [YOONetal-00] J. Yoon, C. C. Li, D. Shahar, D. C. Tsui und M. Shayegan, Phys. Rev. Lett. **84**, 4421 (2000).  
 [ZALAetal-01] G. Zala, B. N. Narozhny und I. L. Aleiner, Phys. Rev. B **64**, 214204 (2001).  
 [ZHAREKESHEVetal-96] I. Kh. Zharekeshev, M. Batsch und B. Kramer, Europhys. Lett. **34**, 587 (1996).

## **V.C. Zuordnung der eigenen Publikationen zu den Kapiteln**

### **Zu Teil II:**

*Langzeitkorrelationen in der Natur: Von Klima, Erbgut und Herzrhythmus,*

A. Bunde und J. W. Kantelhardt, Phys. Bl. **57**, 49-54 (2001).

### **Zu Kapitel II.A:**

*Detecting long-range correlations with detrended fluctuation analysis,*

J. W. Kantelhardt, E. Koscielny-Bunde, H. H. A. Rego, S. Havlin und A. Bunde, Physica A **295**, 441-454 (2001).

*Multifractal detrended fluctuation analysis of nonstationary time series,*

J. W. Kantelhardt, S. A. Zschiegner, A. Bunde, S. Havlin, E. Koscielny-Bunde und H. E. Stanley, Physica A **316**, 87-114 (2002).

### **Zu Kapitel II.B:**

*Correlated and uncorrelated regions in heart-rate fluctuations during sleep,*

A. Bunde, S. Havlin, J. W. Kantelhardt, T. Penzel, J.-H. Peter und K. Voigt, Phys. Rev. Lett. **85**, 3736-3739 (2000).

*Physiological relevance of scaling of heart phenomena,*

L. S. Liebovitch, T. Penzel und J. W. Kantelhardt, in: "The science of disaster: climate disruptions, market crashes, and heart attacks", herausgegeben von A. Bunde, J. Kropp und H.-J. Schellnhuber, Seite 258-283 (Springer Verlag, Berlin, 2002).

*Characterization of sleep stages by correlations of magnitude and sign of heartbeat increments,*

J. W. Kantelhardt, Y. Ashkenazy, P. Ch. Ivanov, A. Bunde, S. Havlin, T. Penzel, H.-J. Peter und H. E. Stanley, Phys. Rev. E **65**, 051908 (2002).

*Quantifying heartbeat dynamics by magnitude and sign correlations,*

P. Ch. Ivanov, Y. Ashkenazy, J. W. Kantelhardt und H. E. Stanley, in: "Unsolved Problems of Noise and Fluctuations", herausgegeben von S. M. Bezrukov, AIP Conf. Proc. **665**, 383-391 (Melville, New York, 2003).

*Dynamics of heart rate and sleep stages in normals and patients with sleep apnea,*

T. Penzel, J. W. Kantelhardt, C.-C. Lo, K. Voigt und C. F. Vogelmeier, Neuropsychopharmacology **28** (Suppl.), 48-53 (2003).

*Comparison of detrended fluctuation analysis and spectral analysis for heart rate variability in sleep and sleep apnea,*

T. Penzel, J. W. Kantelhardt, L. Grote, J.-H. Peter und A. Bunde, IEEE Transact. Biomed. Eng. **50**, 1143-1151 (2003).

*Detrended fluctuation analysis and spectral analysis of heart rate variability for sleep stage and apnea identification,*

T. Penzel, J. W. Kantelhardt, H. F. Becker, J. H. Peter und A. Bunde, Computers in Cardiology, **30**, 307-310 (2003).

*Modeling transient correlations in heartbeat dynamics during sleep,*

J. W. Kantelhardt, S. Havlin und P. Ch. Ivanov,  
Europhys. Lett. **62**, 147-153 (2003).

*Breathing during REM and non-REM sleep: Correlated versus uncorrelated behaviour,*

J. W. Kantelhardt, T. Penzel, S. Rostig, H. F. Becker, S. Havlin und A. Bunde,  
Physica A **319**, 447-457 (2003).

*Nonrandom variability of respiration during sleep in healthy humans,*

S. Rostig, J. W. Kantelhardt, T. Penzel, W. Cassel, J. H. Peter, C. Vogelmeier  
und H. F. Becker, Sleep (eingereicht).

*Detection of R-waves in the Electrocardiogram using wavelet transform and pattern recognition,*

S. Zschiegner, T. Penzel, J. W. Kantelhardt, A. Bunde und C. Vogelmeier, Preprint.

*Detection of periodic signals in noisy, non-stationary time series: prediction of cardiac mortality by phase-pectified signal analysis,*

A. Bauer, J. W. Kantelhardt, P. Barthel, T. Mäkilä, R. Schneider, K. Ulm, A. Bunde,  
A. J. Camm, A. Schömig, H. Huikuri, M. Malik und G. Schmidt, Preprint.

### **Zu Kapitel II.C:**

*Long-range temporal anti-correlations in paddlefish electroreceptors,*

S. Bahar, J. W. Kantelhardt, A. Neiman, H. H. A. Rego, D. F. Russell, L. Wilkens, A. Bunde  
und F. Moss, Europhys. Lett. **56**, 454-460 (2001).

### **Zu Kapitel II.D:**

*Multifractality of river runoff and precipitation: Comparison of fluctuation analysis and wavelet methods,*

J. W. Kantelhardt, D. Rybski, S. A. Zschiegner, P. Braun, E. Koscielny-Bunde, V. Livina,  
S. Havlin und A. Bunde, Physica A **330**, 240-245 (2003).

*Long-term persistence and multifractality of river runoff records,*

E. Koscielny-Bunde, J. W. Kantelhardt, P. Braun, A. Bunde und S. Havlin,  
J. Hydrol. (eingereicht).

*Long-term persistence and multifractality of river runoff and precipitation records,*

J. W. Kantelhardt, E. Koscielny-Bunde, D. Rybski, P. Braun, A. Bunde und S. Havlin,  
J. Geophys. Res. Atmosph. (eingereicht).

### **Zu Kapitel II.E:**

*The Effect of long-term correlations on the statistics of rare events,*

A. Bunde, J. F. Eichner, S. Havlin und J. W. Kantelhardt,  
Physica A **330**, 1-7 (2003).

*The effect of long-term correlations on the statistics of the return intervals between rare events,*

A. Bunde, J. F. Eichner, J. W. Kantelhardt und S. Havlin,  
Il Nuovo Cimento B (im Druck, 2004).

*Return intervals of rare events in records with long-term persistence,*

A. Bunde, J. F. Eichner, S. Havlin und J. W. Kantelhardt,  
Physica A (im Druck, 2004).

*Long-term memory: A natural mechanism for the clustering of rare hazardous events and anomalous residual times,*

A. Bunde, J. F. Eichner, J. W. Kantelhardt und S. Havlin, Preprint.

**Zu Kapitel II.F:**

*Long-term correlations distinguish coarsening mechanisms in alloys,*

L. M. Stadler, B. Sepiol, R. Weinkamer, M. Hartmann, P. Frantzl, J. W. Kantelhardt,  
F. Zontone, G. Grübel und G. Vogl, Phys. Rev. B (rapid com.) **68**, 180101 (2003).

*Revealing antiphase domain dynamics in alloys by combining advanced statistical techniques with  
x-ray photon correlation spectroscopy,*

L.-M. Stadler, B. Sepiol, J. W. Kantelhardt, I. Zizak, G. Grübel und G. Vogl,  
Phys. Rev. B **69**, 224301 (2004).

**Zu Teil III:**

**Zu Kapitel III.D:**

*Comment on “Delocalization in the 1D Anderson model with long-range correlated disorder”,*

J. W. Kantelhardt, S. Ruß, A. Bunde, S. Havlin und I. Webman,  
Phys. Rev. Lett. **84**, 198 (2000).

*Localization in a highly correlated potential landscape,*

A. Bunde, S. Havlin, J. W. Kantelhardt, S. Ruß und I. Webman,  
Journal of Molecular Liquids **86**, 151-161 (2000).

*Localization in self-affine energy landscapes,*

S. Ruß, J. W. Kantelhardt, A. Bunde und S. Havlin,  
Phys. Rev. B **64**, 134209 (2001).

**Zu Kapitel III.E:**

*Sublocalization, superlocalization, and violation of standard single parameter scaling in the  
Anderson model,*

J. W. Kantelhardt und A. Bunde,  
Phys. Rev. B **66**, 035118 (2002).

**Zu Kapitel III.F:**

*No indications of metal-insulator transition in transport properties of interacting electrons in two  
dimensions,*

R. Berkovits, J. W. Kantelhardt, Y. Avishai, S. Havlin und A. Bunde,  
Phys. Rev. B **63**, 085102 (2001).

*Magnetoresistance study for systems of interacting electrons in two dimensions,*

J. W. Kantelhardt, R. Berkovits und Y. Avishai,  
Physica A **302**, 359-367 (2001).

*The parallel magnetoconductance of interacting electrons in a two dimensional disordered system,*

R. Berkovits und J. W. Kantelhardt,  
Phys. Rev. B **65**, 125308 (2002).

*Role of boundary conditions in the parallel magnetoconductance of a two dimensional disordered  
system,*

R. Berkovits und J. W. Kantelhardt,  
Phys. stat. sol. B **330**, 101-105 (2002).

**Zu Kapitel III.G:**

*Discrete charging of a quantum dot strongly coupled to external leads,*

R. Berkovits, F. v. Oppen und J. W. Kantelhardt, Preprint.

## V.D. Tabellenanhang

**Tabelle IV.D.1:** Übersicht über die rekonstruierten Niederschlags- und Abflussreihen, die ich in Abb. II.D.20 und Abb. II.D.21 analysiert habe. Neben Referenz, Angaben zur Datenart, zum Ort und zur Datenquelle, sowie der Dauer der Reihen sind (soweit zur Beschreibung erforderlich) zwei Skalenbereiche angegeben, in denen die betrachteten DFA2-Fluktuationsfunktionen skalieren. Die entsprechenden, durch lineare Regression bestimmten Steigungen  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  sind ebenfalls angegeben, sowie die Steigungen  $\alpha$  für die gesamte Länge der Reihen. Die  $\alpha$ -Werte, die das Skalenverhalten am besten repräsentieren, sind durch Fettdruck hervorgehoben, und die gesamten  $\alpha$ -Werte, die das Skalenverhalten nicht repräsentieren, sind eingeklammert. Die Reihe [PROCTOR<sup>etal</sup>-02] soll einem Quotienten aus Temperatur und Niederschlag entsprechen. Die Nil-Reihe [TOUSSON-25] habe ich zusätzlich in gekürzter Form (ab dem Jahr 722) analysiert, weil nach [WHITCHER<sup>etal</sup>-02] im Jahr 722 wahrscheinlich das Messprinzip verbessert wurde.

Originalpubl.	Datenart, Ort	Quelle	Länge	Ber. 1	$\alpha_1$	Ber. 2	$\alpha_2$	$\alpha$
[STAHL&CLE-AVELAND-92]	Niederschlag, Südwest USA	Baumringe	1053 a	10 – 70 a	<b>0.50</b>	70 – 250 a	0.25	(0.4)
[HUGHES&GRAUMLICH-96]	Niederschlag, Nevada, USA	Baumringe	7997 a	10 – 2000 a				<b>0.55</b>
[GRISSINO-MAYER-96]	Niederschlag, New Mexico, USA	Baumringe	2131 a	6 – 530 a				<b>0.80</b>
[PROCTOR <sup>etal</sup> -02]	Temperatur / Niederschlag, Schottland	Stalagmiten	3669 a	6 – 300 a				<b>1.12</b>
[TOUCHAN <sup>etal</sup> -03]	Frühlingsregen, Südwest-Türkei	Baumringe	660 a	10 – 160 a				<b>0.45</b>
[TOUSSON-25]	Minima des Nils ab 622, Roda bei Kairo	Historische Dokumente	663 a	6 – 160 a				<b>0.85</b>
[TOUSSON-25]	Minima des Nils ab 722, Roda bei Kairo	Historische Dokumente	563 a	6 – 140 a				<b>0.93</b>
[GLASER-01]	Hochwasser der Pegnitz, Deutschland	Historische Dokumente	701 a	10 – 75 a	0.5	75 – 170 a	<b>1.0</b>	(0.6)
[ISDALE <sup>etal</sup> -98]	Burdekin River, Australien	Korallen	337 a	6 – 80 a				<b>0.67</b>
[WOODHOUSE-00]	Clear Creek, Colorado, USA	Baumringe	303 a	6 – 25 a	0.51	25 – 70 a	<b>0.74</b>	(0.6)
[CLEAVELAND-00]	White River, Arkansas, USA	Baumringe	963 a	6 – 30 a	0.59	30 – 200 a	0.43	<b>0.50</b>
[MEKO <sup>etal</sup> -01]	Sacramento River, Kalifornien, USA	Baumringe	1109 a	6 – 270 a				<b>0.60</b>
[GRAUMLICH <sup>etal</sup> -03]	Yellowstone River, Montana, USA	Baumringe	294 a	6 – 75 a				<b>0.85</b>

**Tabelle IV.D.2:** Übersicht über die rekonstruierten Temperaturreihen der nördlichen Hemisphäre, die ich in Abb. II.D.17 gezeigt und in Abb. II.D.18 analysiert habe, wie in Tabelle IV.D.1. In der neuesten Reihe [MANN& JONES-03] sind offensichtlich nur die niederfrequenten Fluktuationen enthalten, so dass die DFA auf Skalen unter 240 Jahren nur die Sättigungssteigung zeigt.

Originalpublikation	Länge	Bereich 1	$\alpha_1$	Bereich 2	$\alpha_2$	$\alpha$	Bemerkung
[OVERPECKetal-97]	391 a	10 – 30 a	1.65	30 – 95 a	<b>1.05</b>	(1.8)	starker Übergang
[JONESetal-98]	992 a	6 – 80 a	0.78	80 – 210 a	1.00	<b>0.82</b>	
[MANNetal-99]	981 a	6 – 30 a	0.85	30 – 240 a	1.05	<b>0.95</b>	
[BRIFFA-00]	994 a	6 – 100 a	0.95	100 – 250 a	0.65	<b>0.90</b>	
[CROWLEY&LOWERY-00]	988 a	6 – 30 a	1.85	30 – 240 a	<b>1.20</b>	(1.5)	starker Übergang
[CROWLEY-00]	966 a	6 – 30 a	1.85	30 – 240 a	<b>1.20</b>	(1.5)	starker Übergang
[BRIFFAetal-01]	559 a	6 – 50 a	<b>0.92</b>	50 – 140 a	0.52	(0.8)	
[ESPERetal-02]	1163 a	10 – 70 a	1.20	70 – 210 a	0.80	<b>1.07</b>	
[MANN&JONES-03]	1781 a	80 – 240 a	1.30	240 – 440 a	0.45	(2.1)	nur Trends
[JONES&MOBERG-03]	148 a	6 – 15 a	<b>0.83</b>	15 – 30 a	0.45	0.68	Messwerte

**Tabelle IV.D.3:** Übersicht über die rekonstruierten lokalen Temperaturreihen, die ich in Abb. II.D.19 analysiert habe, wie in Tabelle IV.D.1. Bei den Eisbohrkern-Daten [PETITetal-99] und den Temperaturen in China [BAOetal-02] handelt es sich *nicht* um jährliche Daten, und die Länge sowie die Bereichangaben beziehen sich auf die Indizes. Beim Eisbohrkern gilt jeder der 1300 betrachteten Messwerte für etwa 78 Jahre, bei den chinesischen Temperaturen jeder Wert für genau 10 Jahre. Beim Eisbohrkern habe ich einen Bereich ausgewählt (Messwerte Nr. 300 - 1600), in dem die Werte ungefähr linear mit der Zeit gehen (Index  $\sim$  Zeit<sup>0.95</sup>); der Rest der 3310 Werte ist wegen stark nichtlinearem Zusammenhang nicht einfach auszuwerten (hierzu siehe auch [ASHKENAZYetal-03]).

Originalpubl.	Datenart, Ort	Quelle	Länge	Ber. 1	$\alpha_1$	Ber. 2	$\alpha_2$	$\alpha$
[PETITetal-99]	Temperatur Vostok (Sibirien)	Eisbohrkern	1300	10 – 40	<b>1.0</b>	40 – 300	<b>1.4</b>	1.25
[COOKetal-00]	Sommertemperatur Tasmanien	Baumringe	3592 a	6 – 20 a	1.3	60 – 850 a	<b>0.68</b>	(0.85)
[KIRCHHEFER-01]	Küstentemperatur Norwegen	Baumringe	636 a	6 – 160 a				<b>0.58</b>
[MOOREetal-01]	Sommertemperatur Baffin (Kanada)	See-Sedimente	1241 a	6 – 300 a				<b>0.725</b>
[BAOetal-02]	Temperatur China	Diverse	200	6 – 20	1.5	20 – 50	<b>0.78</b>	(1.3)
[HANTEMIROV&SHIYATOV-02]	Sommertemperatur Yamal (Sibirien)	Baumringe	4061 a	6 – 120 a	<b>0.53</b>	120 – 800 a	0.22	(0.43)
[COOKetal-03]	Pre-Monsun-Temperatur Nepal	Baumringe	446 a	6 – 30 a	1.3	30 – 120 a	<b>0.8</b>	(1.1)
[COOKetal-03]	Post-Monsun-Temperatur Nepal	Baumringe	387 a	6 – 30 a	1.2	30 – 120 a	<b>0.65</b>	(1.05)
[TANetal-03]	Temperatur Beijing (China)	Stalagmiten	2650 a	6 – 100 a	0.85	100 – 650 a	1.1	<b>0.95</b>



## **V.E. Danksagung**

Diese Arbeit kam nur durch Rat und Tat vieler meiner Lehrer, Kollegen und Freunde zustande. An erster Stelle möchte ich Prof. Armin Bunde herzlich danken, der schon mein Doktorvater war und mich in die meisten der in der Arbeit angesprochenen Themengebiete eingeführt hat. Er hat auch mehrere der Projekte initiiert und mit seinen Vorschlägen geprägt. Seine unermüdliche Energie bei der Verbesserung der Darstellung der Ergebnisse hat wesentlich zu den erfolgreichen Publikationen beigetragen. Prof. H. E. [Gene] Stanley (Boston University) möchte ich besonders danken für die herzliche Aufnahme in seine inspirierende Arbeitsgruppe, in der ich ein Jahr verbracht habe, sowie für die tatkräftige Unterstützung bei Anträgen und Veröffentlichungen.

Weiter möchte ich Prof. Shlomo Havlin (Bar-Ilan Universität) danken für die vielen Ideen, die er – auch während meiner Zeit in Boston – in die gemeinsamen Projekte zum Thema Zeitreihenanalyse eingebracht hat, und für seine vielfache freundliche Aufnahme in Israel. Prof. Richard Berkovits (ebenfalls Bar-Ilan Universität) möchte ich für die sehr effektive und angenehme Zusammenarbeit bei der Simulation von wechselwirkenden Elektronensystemen und Quantenpunkten danken. Prof. Ary Goldberger (Harvard Medical School, Boston) möchte ich danken für die freundliche Aufnahme und Unterstützung sowie die interessanten Diskussionen in der Physionet-Gruppe. Dort habe ich auch sehr von der Zusammenarbeit mit Dr. Plamen Ivanov (Boston University und Harvard Medical School) profitiert.

Mein besonderer Dank für die langjährige gemeinsame Arbeit an verschiedenen Projekten zur Zeitreihenanalyse in der Medizin gilt Prof. Thomas Penzel (Klinikum der Universität Marburg). Prof. Georg Schmidt und Dr. Axel Bauer (beide Klinikum der Technischen Universität München) möchte ich sehr für die inspirierende und freundschaftliche Zusammenarbeit danken. Weiterhin möchte ich an dieser Stelle Dr. Sven Rostig (Klinikum der Universität Marburg), Prof. Frank Moss (Biophysik, University of Missouri, St. Louis), Dr. Peter Braun (bis vor kurzem Bayerisches Landesamt für Wasserwirtschaft) und Dr. Ludwig Schweitzer (Physikalisch-Technische Bundesanstalt in Braunschweig) danken für gemeinsame Arbeiten und anregende Diskussionen. Ferner möchte ich mich bei Lorenz Stadler und Prof. Gero Vogl (beide Materialphysik, Universität Wien) für die sehr angenehme Zusammenarbeit über Speckle-Fluktuationen bedanken.

Der gesamten Arbeitsgruppe der Theoretischen Physik III in Gießen danke ich für die langjährige, freundschaftliche Zusammenarbeit und das angenehme Arbeitsklima. Insbesondere möchte ich hier Dr. habil. Stephanie Ruß, Dr. Eva Koscielny-Bunde und die Doktoranden Jan Eichner, Diego Rybski und Stephan Zschiegner nennen, mit denen mich auch viele gemeinsame Projekte verbinden. Vielfältige Unterstützung unter anderem bei Computeranwendungen habe ich von Dr. Markus Ulrich erhalten. Aus der Arbeitsgruppe in Boston danke ich besonders Dr. Yosef Ashkenazy, Dr. Verena Schulte-Frohlinde und nicht zuletzt Prof. Don Baker für gute Zusammenarbeit und Ermutigungen.

Schließlich möchte ich der Fachgruppe Theoretische Physik der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, konkret Prof. Ingrid Mertig und Prof. Steffen Trimper, danken für die freundliche Aufnahme und dafür, dass sie mir die Fertigstellung dieser Habilitationsschrift ermöglicht haben.

Halle (Saale), den 19. Juni 2004